

機械学習を用いた構造決定による TiCl_4 終端 MgCl_2 ナノ粒子の化学組成-構造相関の解明

(北陸先端科学技術大学院大学*・Dutch Polymer Institute**)

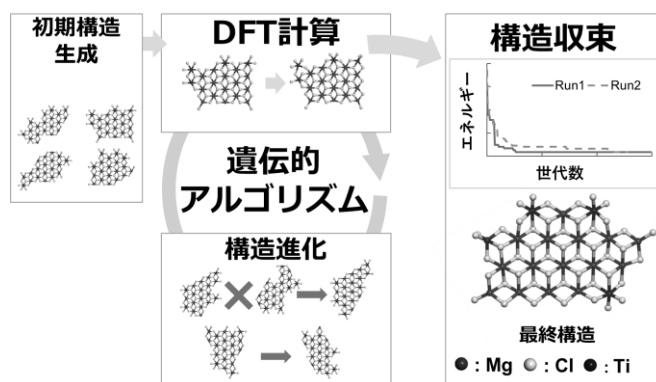
○高棹 玄德*, 和田 透**, Chammingkwan Patchanee**, 寺野 稔**, 谷池 俊明**

■研究の背景

コンピュータを用いた新規材料の設計はインシリコ設計と呼ばれ、計算化学の夢の一つである。しかし、その実践は比較的単純な有機分子を対象とする創薬のような分野に限られており、固体触媒に代表される複雑な材料ではほとんど報告例がない。今日の計算機や計算手法の発展は、複雑な材料のシミュレーションを可能としたが、その限界は材料を表現する分子モデルの精度にある。つまり、正確なシミュレーションを行うためには、正確な分子モデルが必要となるのである。一方、複雑な材料を分子のレベルで“見る”ことは実験的に難しく、また、予測を可能にするほどの正確な分子モデルを研究者の勘から推定することも同じく困難である。この問題を解決するためには、**実験的な前知見を必要としない、非経験的な分子モデルの決定法**を開発する必要がある。

■研究の概要

本研究では、**機械学習の一種である遺伝的アルゴリズムと密度汎関数計算(DFT)による構造最適化**を実装したプログラムを開発し、チーグラナーナツタ触媒の基本構成要素である TiCl_4 終端 MgCl_2 ナノ粒子の構造決定を実現した。



本研究は複雑な固体触媒分野に **Figure 1**. 開発したプログラムの概要
おける初の非経験的構造決定の試みである。また、工業的なポリオレフィン生産の大部分を担うチーグラナーナツタ触媒において、正確な分子モデルの決定は、**試行錯誤的な開発から脱却した新たな触媒設計の指針を示し得るものであり、産業的にも大きな意義を持つ**。本研究は日本-イタリア-オランダに跨る国際的なオープンイノベーションの枠組みの中で実践されたものである。

本内容は10月31日(木)から山形テルサ(山形市)で開催される石油学会山形大会(第49回石油・石油化学討論会)で発表される。

参考文献: **G. Takasao et al.**, *ACS Catal.*, vol. 9, no. 3, pp. 2599–2609, 2019.