

第 121 回触媒討論会 特別シンポジウム

触媒学会では、第 115 回触媒討論会より毎年継続して参りました特別シンポジウムを、第 121 回触媒討論会にて開催します。注目度の高いテーマや他分野と境界領域のテーマを選定し、この分野でご活躍されている産学官の第一人者の方々にご講演をお願いしています。今回は「始まった触媒インフォマティクス」および「多様な炭素資源を活用したものづくりを支える触媒技術」の二つのテーマについて特別シンポジウムを開催します。

本企画が、各界の研究者の交流を一層促進し革新的な成果を生み出す"触媒"となるよう、積極的なご参加をお願いします。

主催：触媒学会

協賛：(予定) 応用物理学会、化学工学会、高分子学会、触媒工業協会、石油学会、電気化学会、日本エネルギー学会、日本化学会、日本機械学会、日本金属学会、日本コンピューター化学会、日本製薬工業協会、日本プロセス化学会、日本薬学会、フロー精密合成コンソーシアム、有機合成化学協会

日時：平成30年3月23日(金) 14:30~17:30

会場：東京大学駒場キャンパス触媒討論会会場にて
(東京都目黒区駒場 3-8-1)

<http://www.shokubai.org/121/>

テーマ1 「始まった触媒インフォマティクス」

14:30~14:35 開会の挨拶と趣旨説明

(神奈川大学) 上田 渉

14:35~15:00 触媒インフォマティクスへの期待

(神奈川大学) 上田 渉

触媒開発は容易ではない。個々の触媒作用機能が明確になっていないことや触媒物質が反応下でダイナミックな変異を伴うものであることなどが理由である。しかし、社会からの新触媒実現への要求は強く、触媒が典型的な複雑物質であるという状況の中で、研究者は日々研究を重ねている。そのような中、従来のを超えた新しい触媒開発の起点を与えてくれる方法が望まれている。触媒インフォマティクスに期待が高まっている。

15:00~15:35 マテリアルズインフォマティクスの考え方とその応用事例

～材料設計・プロセス設計・品質管理と制御の連動～

(東京大学) 船津 公人

従来、順方向の予測、つまり与えた構造から、材料の評価、物性推算はできても、逆に目的物性を持つ構造、材料候補の提案(逆解析)は難しかった。近年この逆解析(つまり「何を作るか」)こそがデータ駆動型化学に求められる重要項目と理解され始めてきた。さらに「何を作るか」から、それを「どう作るか」という視点も、いまやデータ、情報の積極的活用の中で強く求められるようになってきた。これらについて有機・無機材料設計の事例を通してご紹介する。

15:35~16:10 マテリアルズインフォマティクスの触媒への展開

(北海道大学) 清水 研一

最近の文献の事例を中心に、アカデミアにおける"catalysis informatics"に関する研究状況を概説する。演者らが現在進めている理論計算データや触媒実験データ(文献値)と機械学

習を組み合わせた触媒の提案方法についても述べる。

**16:10~16:45 マテリアルズインフォマティクスによる材料設計の実例と
触媒科学への展開と挑戦**

(国立研究開発法人物質・材料研究機構) 高橋 啓介

ハイスループット実験や計算科学の発展により、材料科学と触媒科学では大量のデータが容易に得られる時代に突入している。これらの大量のデータに対して、機械学習のようなデータ科学技術を導入することによって従来の研究者の経験・ひらめき・偶発性をデータ科学で再現して、材料・触媒開発を加速することができる。本発表ではマテリアルズインフォマティクスによる材料設計の実例の紹介、そして触媒科学へ展開するための道筋と課題を紹介する。

16:45~17:05 企業の触媒開発におけるインフォマティクス手法の活用例

(日本触媒) 右田 啓哉

日本触媒において、機械学習を含むインフォマティクスの手法を用いて固体触媒の組成、性能、計測データ等を多面的に解析し、性能の因子推定と組成の最適化によって開発を促進した事例を紹介する。

データ秘匿性の観点から化学的側面よりも数値解析技術に特化した内容とするが、企業の開発現場においてインフォマティクスを適用するための現実的な一例を提供したい。

17:05~17:25 マテリアルズインフォマティクスの企業研究の事例紹介

(旭化成) 内 幸彦

社内の幾つかの開発テーマにマテリアルズインフォマティクスを適用してきた。企業内の材料開発は新素材以外に現行品をベースにしたグレード開発に対するニーズも高い。グレード開発では使用する原材料等に制約があるが、所望の性能を発現する組成、プロセス条件探索に機械学習と最適化計算を組合せ適用した効果を報告する。

17:25~17:30 閉会の挨拶

(神奈川大学) 上田 渉

テーマ2 「多様な炭素資源を活用したものづくりを支える触媒技術」

14:30~14:35 開会の挨拶と趣旨説明

(国立研究開発法人産業技術総合研究所) 濱川 聡

14:35~15:15 二酸化炭素と共役ジエンを原料とする高分子合成

(東京大学) 野崎 京子

二酸化炭素が燃焼反応の最終生成物であり熱力学的に安定な状態にあるため、二酸化炭素を他の有用な炭素化合物に変換するためには、なんらかの化学的・物理的エネルギーと組み合わせることが必須である。共反応剤を用いる場合も、大量生産が可能で廉価であることが望ましい。本講演では、最近われわれが開発した二酸化炭素と共役ジエン類の共重合による高分子合成を取り上げ、その反応機構と生じる高分子の特性について述べる。

15:15~15:55 バイオを活用した機能性材料の開発~DURABIOの開発事例を中心に~

(三菱ケミカル) 佐野 浩

KAITEKI®のコンセプトの下、我々は化学を基盤とした機能商品、素材、ヘルスケア分野で企業活動を展開している。特に環境負荷低減や天然資源枯渇への対応策として炭素の高度

利用を責務と考え、10年、20年後を見据え二酸化炭素の資源化や排出抑制に取り組んでいる。本セッションでは触媒技術を柱とする石油化学技術を礎とし、植物由来原料やバイオテクノロジーの知見を組合わせて商品化を実現した製品を紹介する。

15:55~16:35 バイオマス由来化学品製造のための固体触媒技術

(東北大学) 冨重 圭一

バイオマスから付加価値が高い化学品を合成するための研究が活発に行われている。多岐にわたる変換方法が検討され、より基盤的な化学品については、生成物と触媒の分離が容易な固体触媒を用いる方法が期待される。バイオマスは酸素含有率が高いため、石油化学プロセスとは異なり、酸素含有率を下げる脱水反応、炭素-酸素結合水素化分解触媒反応等の反応の重要性が増している。これらの反応のための固体触媒の開発について触れる。

16:35~17:15 化学品原料源の選択と開発すべき技術

(三井化学) 藤田 照典

化学品の主要な原料源は、現行のナフサ(石油)、エタン(天然ガス)からメタン(天然ガス)、非可食バイオマス、二酸化炭素にシフトして行くと考えられる。このような状況下、シェール革命やメタンハイドレートの発見によりメタンの資源量が極めて豊富であることが分かってきた。メタンは相対的にクリーンなエネルギーであるがクリーンな化学品原料源ではない。メタンをクリーンな原料源とする技術の開発が求められる。

17:15~17:20 閉会の挨拶

(国立研究開発法人産業技術総合研究所) 濱川 聡

参加費：

- 1) 第121回触媒討論会参加登録費に含まれます。
- 2) 特別シンポジウムのみ参加の場合(予定(税込))
 - ・触媒学会個人会員：一般4,200円、学生2,100円、S会員2,100円、シニア会員 無料
 - ・触媒学会団体会員：5,200円
 - ・協賛学協会個人会員(受け付けで会員証をご提示ください)：一般4,200円；学生、2,100円
 - ・協賛学協団体会員：5,200円
 - ・協賛学協会以外：一般15,600円、学生：8,400円

詳しくは、ウェブサイトをご覧ください。」

<http://www.shokubai.org/meeting/index.html>

参加申込方法：事前申込の必要はありません。特別シンポジウムのみ参加の場合、当日13時30分より総合受付にて受付を開始します。

問合先：触媒学会 事務局

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台1-5 化学会館3階

電話：03-3291-8224

E-Mail：catsj (@) pb3.so-net.ne.jp (カッコを外してください)