

中間評価（ステージゲート審査）結果

1. 研究課題名： 外挿的探索が可能な機械学習を用いた未踏触媒空間の探索
2. 研究代表者： 鳥屋尾 隆（北海道大学 触媒科学研究所 准教授）
3. 中間評価（ステージゲート審査）コメント

本課題は、化学・材料科学における外挿的探索を可能とする機械学習手法を活用し、未踏探索空間に存在する革新的な固体触媒を創出することを目的としている。フェーズ1では、独自に提唱している外挿的機械学習法を用い、最適組成として予想外の元素を含む触媒の有効性を見いだしており、触媒探索における有用性を十分に実証できている。また、共同研究者と共に複数の化学変換に対して触媒の元素組成を最適化し、世界最高レベルの触媒能を達成することに成功しており、高く評価できる。フェーズ2では、複数の触媒系において触媒性能を更新する可能性があり、かつ、機械学習法としても新たな可能性を追求する内容となっており、十分な計画であると言える。触媒反応機構のより深い理解や新しい触媒構造の探索にも期待したい。

以上