

中間評価（ステージゲート審査）結果

1. 研究課題名： 非平衡状態における触媒反応ネットワーク理論の開拓
2. 研究代表者： 大岡 英史（理化学研究所 環境資源科学研究センター 研究員）
3. 中間評価（ステージゲート審査）コメント

本課題では、応用数理の手法を既存の触媒理論に取り入れ、触媒反応における実際の反応環境による特性変化を予測できる新理論を確立し、数理・機械学習・物理化学の融合による新たな学問領域の樹立を目指している。フェーズ1では、触媒反応ネットワークの数学的記述、特に反応速度の定量的高精度化計算法を開発し、計算結果と実験結果を対応させるまでに至っており、その進捗を評価できる。フェーズ2では、フェーズ1の成果をベースに電圧や時間などに応じた変化を考慮して反応を記述しようとする計画を立てており、意欲的でありながらも着実な成果が期待できる。数理主導の触媒開発に大きな期待がある中で、広範な対象の性能制御が可能となるような研究を展開することが望まれる。

以上