

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 実験・計算・データ科学の統合によるメタン変換触媒の探索・発見と反応機構の解明・制御
2. 研究代表者： 高橋 啓介（北海道大学大学院理学研究院 准教授）
3. 中間評価結果

本研究課題は、実験・計算・データ科学を統合した触媒インフォマティクスを推進し、旧態依然とした今の開発論から脱却し、従来の枠を超えた方法で新しい触媒開発を与える方法論の確立を目指している。論文に報告されたメタン酸化カップリング触媒の性能データと反応条件データをデータベース化し、データ科学的手法から評価に必要な要素を明確にし、実際に新しい触媒構成元素を提示した点は高く評価する。同時に膨大なデータを自前で収集するハイスループット装置を組み上げ、過去30年で蓄積されたデータ数を一桁上回る12,000点ものデータを数日で取得することにも成功した。触媒インフォマティクスとして必要な、実験条件が統制されたデータ取得を早期に確立したことにより、計算・データ科学の手法がより精査されたといえる。今後、さらに収率の高い新規材料が探索されることを期待する。外部活動についても実施し、収集したデータが解析できる触媒プラットフォーム「CADS: Catalysts Acquisition by Data Science」をWeb上に立ち上げて公開し、触媒データベースの自立的な発展を促す端緒を切ったことも高く評価する。

触媒作用は複雑な現象でありながらも、論文の情報は性能を示すものへの情報に限られることが多い。その中で本チームの触媒インフォマティクスの取り組みは発生する複雑さをものともせず果敢に挑戦している。またさらに進化すべく、想定通りの触媒を設計する合成方法論やプロセスインフォマティクスも念頭に入れるなど活動を活発化させており、本チームのもつ自由な展開能力に大いに期待する。