

未来社会創造事業 探索加速型探索研究
事後評価結果

1. 領域

「共通基盤」領域

2. 重点公募テーマ

革新的な知や製品を創出する共通基盤システム・装置の実現

3. 研究開発課題名

超広域材料探索を実現する材料イノベーション創出システム

4. 研究開発代表者名（機関名および役職は評価時点）

谷池 俊明（北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 教授）

5. 評価結果

評点：S 特に優れている

総評：

本研究開発課題は、触媒などの材料を対象に、独自のハイスループット実験技術と機械学習を活用した大規模な材料探索システムの開発を目指したものである。

探索研究では、ハイスループット実験装置と機械学習を組み合わせたシステムを構築し、メタンドライリフォーミング反応を対象に触媒材料の自律探索を実現した。広い触媒組成範囲を効率的かつ精度良く探索するために、機械学習における記述子（変数）の自動設計技術を考案し、実験システムに組み込むことで、短期間で新規高性能触媒を多数発見することに成功した。従来、研究者が専門知識に基づいて設計していた記述子設計を自動化することで、これまでに報告のない多様な触媒組成を迅速に発見し、知識の蓄積が十分でない未知の組成の探索の実現可能性と有効性を示した。

また記述子の自動設計技術によって、材料探索の精度とスループットが改善されたことにより、触媒材料だけでなく、触媒の媒介する反応自体の同時探索の実行まで構想を広げた点も高く評価する。

今後は、世界的にも最先端の研究成果となる触媒と反応の両方の自動一括探索の実現を目指し、多くの研究者に使われる基盤技術として確立するとともに、ニーズを持つ企業との連携をはかることで、本技術の社会実装に向けた拠点設立を加速することを期待する。

以上