

第87回RISMセミナー データ駆動型AIセミナー(第25回)

触媒化学の理論と機械学習の複合的利用による新規合金触媒の設計

高山 大鑑 准教授 (奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学領域)

合金触媒の反応機構を実験化学や計算化学に基づいて解析し、重要な活性因子を解明することで、高活性な合金触媒を設計する手掛かりが得られる。しかし、その活性因子を満たす新規な合金触媒の組成を具体化することは容易ではないため、先行研究と類似した組成に研究事例が集中する傾向にあると思われる。本講演では、重要な活性因子に関わる計算データを学習した機械学習モデルを構築することで、活性因子を満たし、且つ先行研究と類似しない組成を具体化する試みについて紹介する。