研究課題別事後評価結果

１．研究課題名：　触媒インフォマティクスの創成のための実験・理論・データ科学研究

２．研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

清水 研一（北海道大学触媒科学研究所　教授）

主たる共同研究者

蒲池 高志（福岡工業大学工学部　教授）

濱本 信次（山口東京理科大学工学部　助教）

日沼 洋陽（産業技術総合研究所エネルギー・環境領域　主任研究員）

前野 禅（工学院大学先進工学部　准教授）

３．事後評価結果

〇評点：

A　優れている

〇総合評価コメント：

本プロジェクトは、理論データや機械学習を積極的に用いた触媒インフォマティクスの創成を目的とし、実験と機械学習のサイクルによる触媒探索方法を開発、材料設計の指針を示し、また表面欠陥サイトにおける多様な分子の活性化に関するデータ蓄積・理論モデル化手法を手掛けている。

多くの成果を挙げインパクトの高い雑誌に多数の論文を発表している点、若手研究者の育成も順調に進めた点で、本プロジェクトは高く評価することができる。

しかしながら、発見・開発された４種の新触媒が新手法によって導き出されたとは言い難く、革新的と述べている新触媒を含め、論文の発表に留まって特許を１件も出願しなかったことは、成果の真の意義に信頼性低下を生じさせ、材料研究のプロジェクト運営として適切ではない。

今後は、本プロジェクトで開発した優れた手法と発見した新触媒を有効に活用し、社会実装に繋げていっていただきたい。