

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： スパース動的モード分解による効率的な触媒設計手法の開発

2. 個人研究者名

坂田 逸志 (東京大学大学院理学系研究科 大学院生)

3. 事後評価結果

本研究は、化学における触媒設計を念頭におき、スパース動的モード分解(**Sparsity-promoting Dynamic Mode Decomposition, SpDMD**)という手法に着目して化学反応の MD データから反応経路図を自動的に抽出する枠組みの構築を目的とする研究である。

研究期間中に、まずはエチレン分子について速度自己相関関数のフーリエスペクトルのピーク位置との比較を行い、ピーク位置に対応するモードを選び、選んだモードを **SpDMD** によって再構成したところ、その運動の対称性が基準運動と一致していることを確認した。次に **MgO** 触媒下でメタン分子の水素原子が乖離する反応に対して、ロバスト主成分分析を適用し、構造に対応する成分を **SpDMD** によって解析することで、分子の反応状態と非反応状態をスペクトルから区別し **SpDMD** のモードの構造から、反応中の分子運動の構造を明らかにした。

今後は数理・情動的な手法の化学への応用だけにとどまらず、数理・情報の分野への化学から新たなフィードバックを与えるような研究も目指してほしい。