

CCRC News #15

February 13, 2018

前回のセンターニュースに引き続きまして、産学官連携触媒研究ユニット（産官学ユニット、西田まゆみ・ユニット長）からの成果発表についてお知らせします。産官学ユニットでは、キャタリストインフォマティクスに関する研究を促進する活動を進めてまいりました。産総研・矢田陽研究員、産学官ユニット・佐藤一彦客員教授（産総研触媒化学融合研究センター長）、永田賢二客員准教授（産総研人工知能センター）らによる、タングステン触媒によるアルケンのエポキシ化に関する反応収率の予測に関する研究が**Chemistry Letters**誌に公表されました。触媒構造から計算機シミュレーションで得た複数のパラメーターと、実際に触媒反応によって得られる実験収率を用いてAIを構築し、反応の収率が予測できることをはじめて示したとのことです。今後触媒開発期間を大幅に短縮させるAI技術の先駆けになる研究成果です。

産官学ユニットを中心に、連携センターでは引き続き、キャタリストインフォマティクス研究の促進に注力して参ります。

(記 長谷川淳也)

Following the previous CCRC news, we will be informed about the achievement from the Unit for Industry-Government-Academia Collaborative Research on Catalysis at CCRC (Mayumi Nishida Unit leader). The unit has been promoting the researches on Catalyst informatics. Recently, mixed experimental and AI study on tungsten-catalyzed epoxidation of alkenes was published in *Chemistry Letters* by Dr. Yada, Prof. Sato and Prof. Nagata (IRC3 at AIST, also members of the unit and guest professors at ICAT). In this study, they constructed AI using DFT calculations and experimental data and successfully predicted the experimental yield of the catalytic reaction. This is a cutting-edge and fundamental achievement to speed up catalyst development.

The Nishida unit and CCRC will continue to promote the research activities on Catalyst Informatics.

(Jun-ya Hasegawa)

The screenshot shows the article page on the Chemistry Letters website. The article title is "Machine Learning Approach for Prediction of Reaction Yield with Simulated Catalyst Parameters" by Akira Yada, Kenji Nagata, Yasunobu Ando, Tarajiro Matsumura, Sakina Ichinoseki, and Kazuhiko Sato. The article is published in Volume 47, Issue 3, pages 284-287. The DOI is 10.1246/cl.171130. The page also includes a search bar, a list of issues, and a search for articles section.

“Machine Learning Approach for Prediction of Reaction Yield with Simulated Catalyst Parameters”, A. Yada, K. Nagata, Y. Ando, T. Matsumura, S. Ichinoseki, and K. Sato, *Chem. Letters.*, 47, 284-287 (2018).

DOI: [10.1246/cl.171130](https://doi.org/10.1246/cl.171130)