## 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。

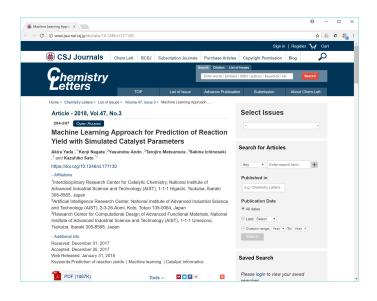
産官学ユニットを中心に、連携センターでは引き続き、キャタリストインフォマティクス研究の 促進に注力して参ります。

(記 長谷川淳也)

Following the previous CCRC news, we will be informed about the achievement from the Unit for Collaborative Industry-Government-Academia 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)



"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