

新任教授講演会

情報化学研究室 高橋 啓介 先生

「触媒インフォマティクス」

日時 令和4年12月9日（金）16:30～18:00

場所 北大 理学部5号館 5-203（大講堂）



触媒インフォマティクスは触媒データに対して第4の科学であるデータ科学を用い、人間が処理することが困難な多次元空間から隠れた法則・パターンを導き出し、触媒設計を達成する方法である。本講演では講演者が提唱する触媒インフォマティクスにおける3つの重要概念「データベース構築、データから知識、プラットフォーム」を紹介する。メタン酸化カップリング反応を例として、独自開発したハイスループット実験・計算による触媒ビッグデータの構築、機械学習による触媒提案と実験実証による触媒開発までの道筋を紹介する。また独自開発したインフォマティクス手法「触媒遺伝子」「触媒ネットワーク法」による触媒開発についても紹介する。講演者は触媒インフォマティクスをクリック1つで実践できる触媒インフォマティクス・プラットフォーム「CADS」も開発・運用しており、CADSの機能についても紹介する。最後に触媒インフォマティクスを材料・プロセス・計測インフォマティクスへと展開させた新しい化学を提案する。

主催：理学研究院 化学部門

共催：物質科学フロンティアを開拓するAmbitiousリーダー育成プログラム（ALP）

スマート物質科学を拓くアンビシャスプログラム（SMatS）

フォトエキサイトニクス研究拠点

工学研究院 フロンティア化学教育研究センター

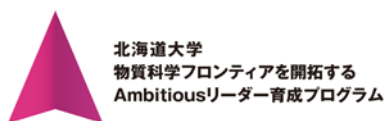


Photo-Excitonix
フォトエキサイトニクス研究拠点



北海道大学 スマート物質科学を拓く
アンビシャスプログラム



連絡先：北海道大学大学院理学研究院化学部門 部門長 上野貢生

ueno@sci.hokudai.ac.jp