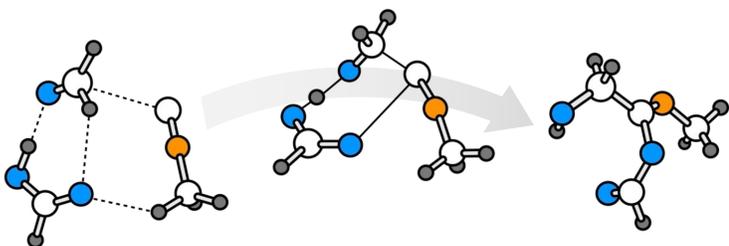
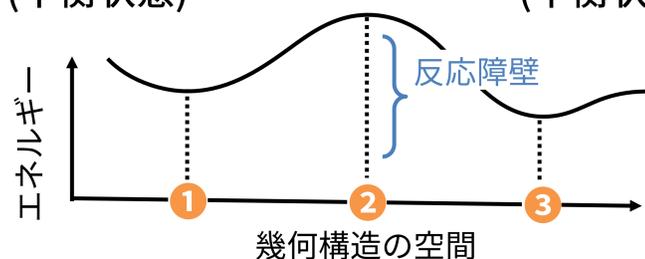


2025年5月に立ち上げの新しい研究チーム

関心：「化学反応」のデザイン/理解/発見のための機械学習・機械発見

① 反応物
(平衡状態)

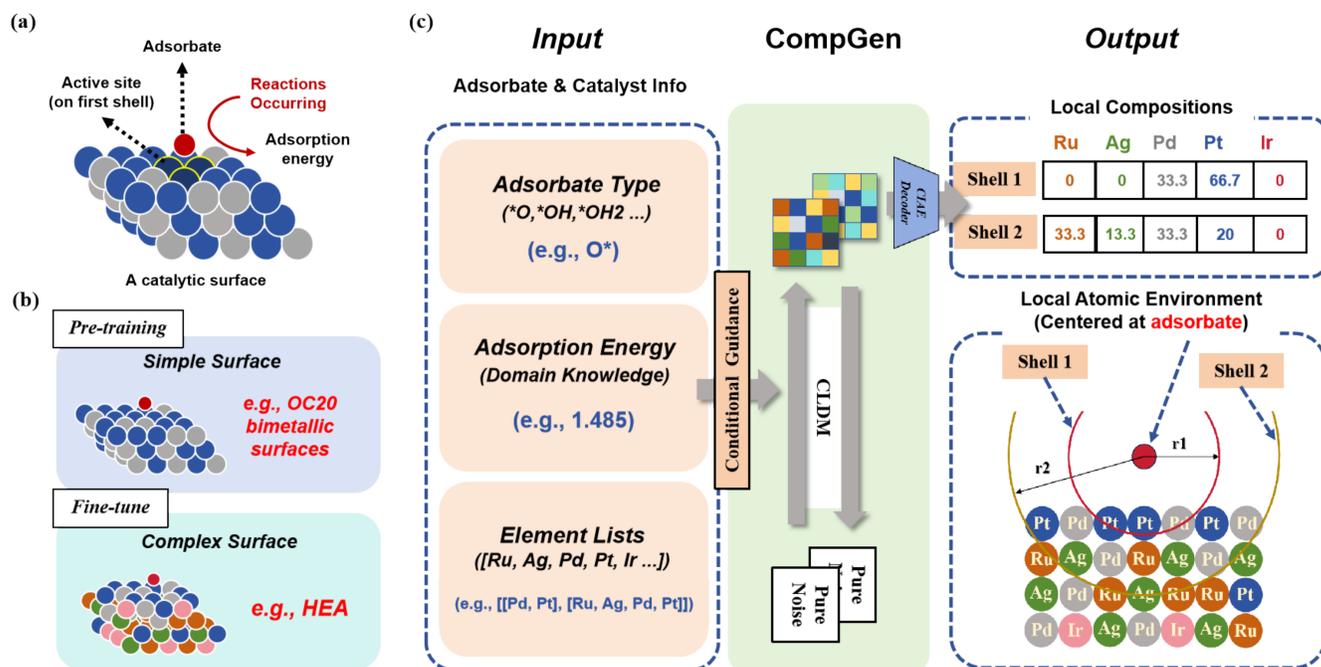
② 遷移状態

③ 生成物
(平衡状態)

- 化学反応 = 物質を別の物質へ変換する非平衡で動的な過程
- 物質変換や分子間相互作用の基盤、生命現象の基礎であるとともに、身近な様々な製品・医薬品からエレクトロニクス・エネルギーまで私たちの生活に欠かせないもの
- エネルギー的に高い不安定な中間状態(遷移状態)を経由するため高次元でのHill Climbingを伴う
⇔ Downhill型の問題：分子動力学計算や構造緩和計算
- 遷移状態の構造、反応障壁の高さ、それらを制御する触媒のデザイン・理解・発見が不可欠
- 分子構造や原子間結合の組み替えが組合せ論的

触媒表面の逆組成設計のための条件付き生成フレームワーク

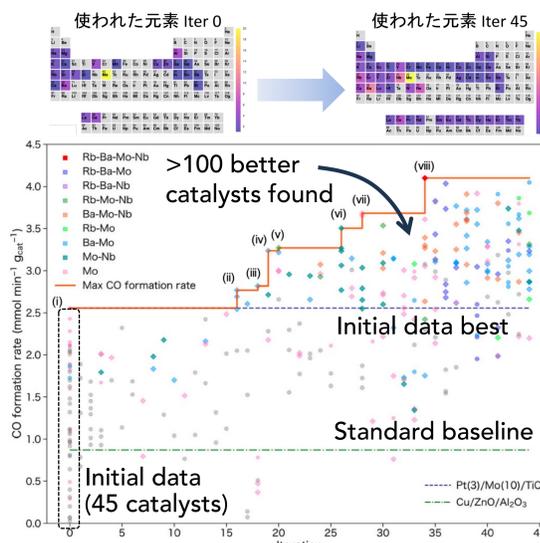
- 固体触媒表面上の気相反応 (不均一触媒)
- 触媒表面の逆設計問題
- 3次元原子座標生成ではなく、吸着サイト周囲の局所環境の元素組成生成で再定式化
- 周期表構造を取り入れた触媒表現を潜在空間に埋め込み Latent Diffusion Transformer (DiT) で条件付き生成
- OC20で事前学習 → 高エントロピー合金(HEA)表面へ適用



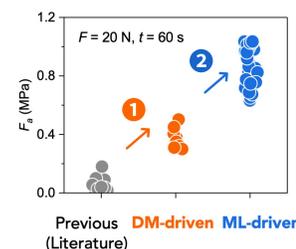
Chen S, Sun C, Liu Z, Han A, Takigawa I, Qian Q, CompGen: A Conditional Generation Framework for Inverse Composition Design of Catalytic Surfaces
NeurIPS 2025 Workshop on AI for Science; NeurIPS 2025 Workshop on AI for Accelerated Materials Design (AI4Mat)

実世界の「化学」を試験台として実践 (※チーム立ち上げ前からの共同研究)

- 機械学習に基づく探索によって様々な化学反応に対して既存の触媒を上回る不均一触媒を開発
- 訓練データの触媒では使用していない元素を含む触媒が最良だった (外挿的)
 - 水素による低温NO還元反応 (ACS Catalysis, 2025)
 - 低温CO₂水素化によるメタノール合成反応 (JACS, 2025)
 - 逆水性ガスシフト反応 (Nature Communications, 2023)



- 機械学習を用いて非常に強力な海中接着剤を開発 (Nature, 2025)



- ① 天然の接着タンパク質をデータマイニング (Bio-inspired初期計画)
- ② 機械学習で最適化

