

# 化学反応における多元系のシナジー効果の評価と触媒探索への応用

小林 正人(北海道大学・大学院理学研究院・講師)

(H27-H30年度)

## 研究の概要

本研究では、反応に関する電子状態計算の結果と実験結果のデータベースを構築し、データ科学の手法を協働的に利用することで、吸着エネルギーや活性化エネルギーといった反応指標を予測し、その原因の特定を可能とし、さらには化学反応における多元系のシナジー効果の評価する手法を確立することを目指した。これにより、触媒開発のスループットを劇的に向上させるだけでなく、多くの化学現象で生じる多元系のシナジー効果を情報学的視点から説明することを目的とした。

## 研究の成果

金属ナノクラスター触媒をターゲットに、反応経路自動探索プログラムGRRM等を用いて得られた反応経路や遷移状態のデータベースを作成し、インフォマティクスの手法を利用することにより、触媒活性要因の特定(図1)や吸着・活性化エネルギーの予測(図2)を行った。また、不均一触媒反応の解析に資する表面分子吸着系の電子状態データベースを構築した。本データベースの活用例として、文献から得た実験データベースと組み合わせたデータ解析によりメタン水蒸気改質反応の触媒特性の予測を行った。

## 参考文献・リンク

[1] T. Iwasa, T. Sato, M. Takagi, M. Gao, A. Lyalin, M. Kobayashi, K.-i. Shimizu, S. Maeda, and T. Taketsugu, *J. Phys. Chem. A* **123**, 210-217 (2019).

[2] 小林正人, 分子シミュレーション学会誌「アンサンブル」**21**, in press (2019).

[3] 小林正人, 化学と工業 **72**, in press (2019).

研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的  
マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」  
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)

