

# 2023年度未踏ターゲット事業（量子コンピューティング技術を活用したソフトウェア開発分野）

## アニーリングマシンを用いた合金触媒の探索・解析支援ツールの開発

### － 高効率な触媒開発に向けた触媒構造の理解 －

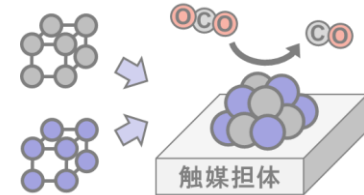
三瓶 大志（早稲田大学大学院）・七種 紘規（早稲田大学大学院）

#### カーボンニュートラルの実現に向けた触媒開発の重要性

- ・ 昨今の環境問題の解決に向けて、**カーボンニュートラルの実現**が不可欠である。
- ・ 石油などの地下資源ではなく、**水や二酸化炭素などの地上資源**からエネルギーや化学品を作る必要がある。  
→ 「**触媒**」という材料は化学反応を促進させる材料であり、**カーボンニュートラルの実現に資する化学**である。

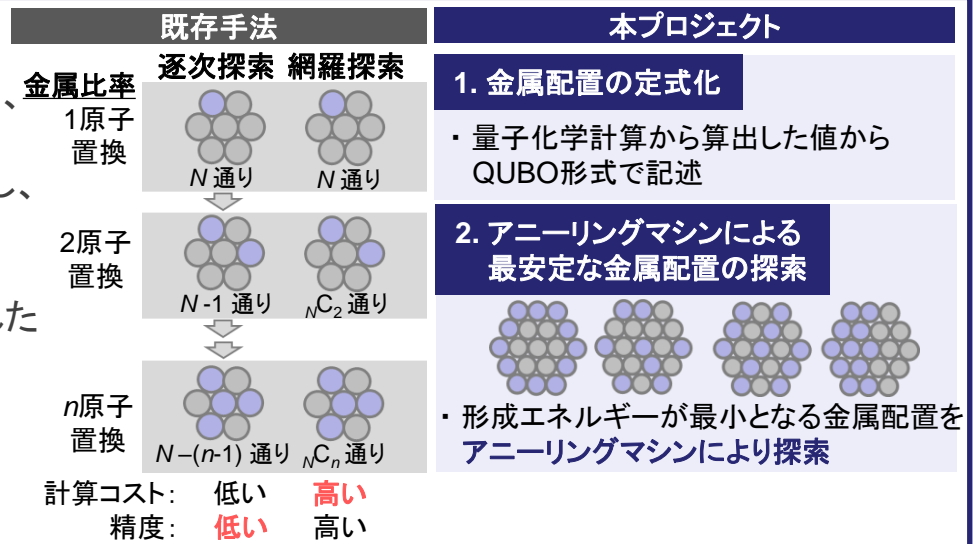
#### 触媒開発に向けた課題

- ・ **金属を混ぜる合金化**により、触媒の電子状態などを自在に制御できるため、地上資源のエネルギーや化学品への**効率的な転換の実現可能性が高まる**。  
→ 一方で、触媒開発に重要な**触媒構造(金属配置)の理解**が困難になる。



#### 実施内容

- ・ **金属配置の探索を組み合わせ最適化問題と捉え、アニーリングマシンで探索した**。  
→ 既存の計算コストと精度のトレードオフを打破し、大域的な金属位置の最適化を図った。
- ・ 触媒探索の効率化に向けて、触媒化学研究者が扱いやすい入出力が実装された最適化プログラムを構築した。



・ 形成エネルギーが最小となる金属配置をアニーリングマシンにより探索

# 開発成果

入力値: 合金の金属種

定式化に必要なクラスターモデルの量子化学計算

金属配置問題の定式化

アニーリングマシン

物理化学情報の出力

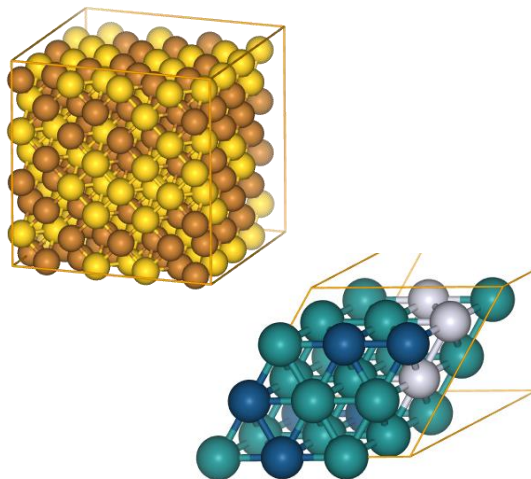
Pt<sub>5</sub>Ru<sub>1</sub>Ir<sub>1</sub>



[[1,1,0,1,1,1,0],  
[0,0,1,0,0,0,0],  
[0,0,0,0,0,0,1]]

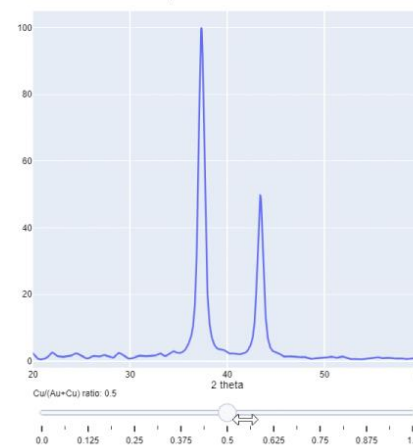
$$H = \sum_{i=1}^N W_{ii}x_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N W_{ij}x_i x_j + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j}^N W_{ijk}x_i x_j x_k$$

合金構造のバイナリ化と  
その形成エネルギーの定式化



各合金比率ごとの最安定構造を探索  
→ 構造ファイルを出力可能

Composition: Au128Cu128



重要な物理化学情報の出力  
→ 実験結果と相補的に利用可能

➤ 合金の金属種の入力と定式化用の教師データの算出を行うことで、

少ない計算コストで各合金比率での構造および物理化学情報を一貫して出力するプログラムを構築

本開発プログラムにより、触媒化学・材料化学研究者に対する多元合金の構造理解を支援

→ 材料と量子の力で持続可能な社会の実現へ