

2024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表面モデリングツール・ 利用支援ドキュメントの開発

### — SurfQit(サーフキット)の開発と高速表面モデリング —

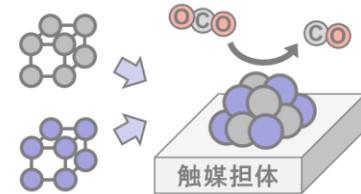
三瓶 大志 (早稲田大学大学院)・七種 紘規(早稲田大学大学院)

#### 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**が望まれている。
- 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。

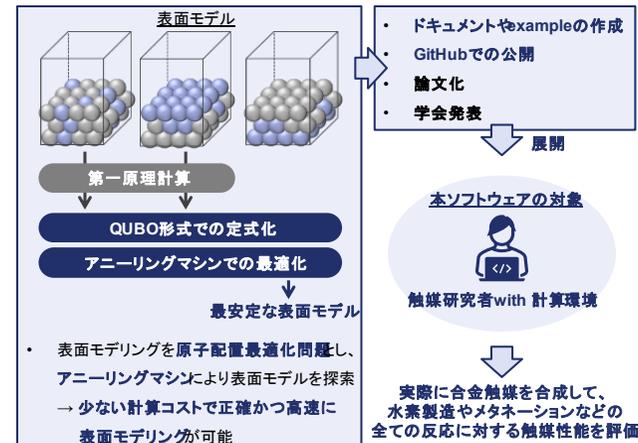
#### 触媒開発に向けた課題

- **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(表面の金属配置)の理解**が困難になる。



#### 実施内容

- **表面の金属配置の探索を組合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。
- 作成したコードをモジュール”SurfQit”として公開を目指した。
- SurfQitのユーザーの利用を支援するためにチュートリアル, example, API referencesを日本語と英語で作成した。



# 開発成果

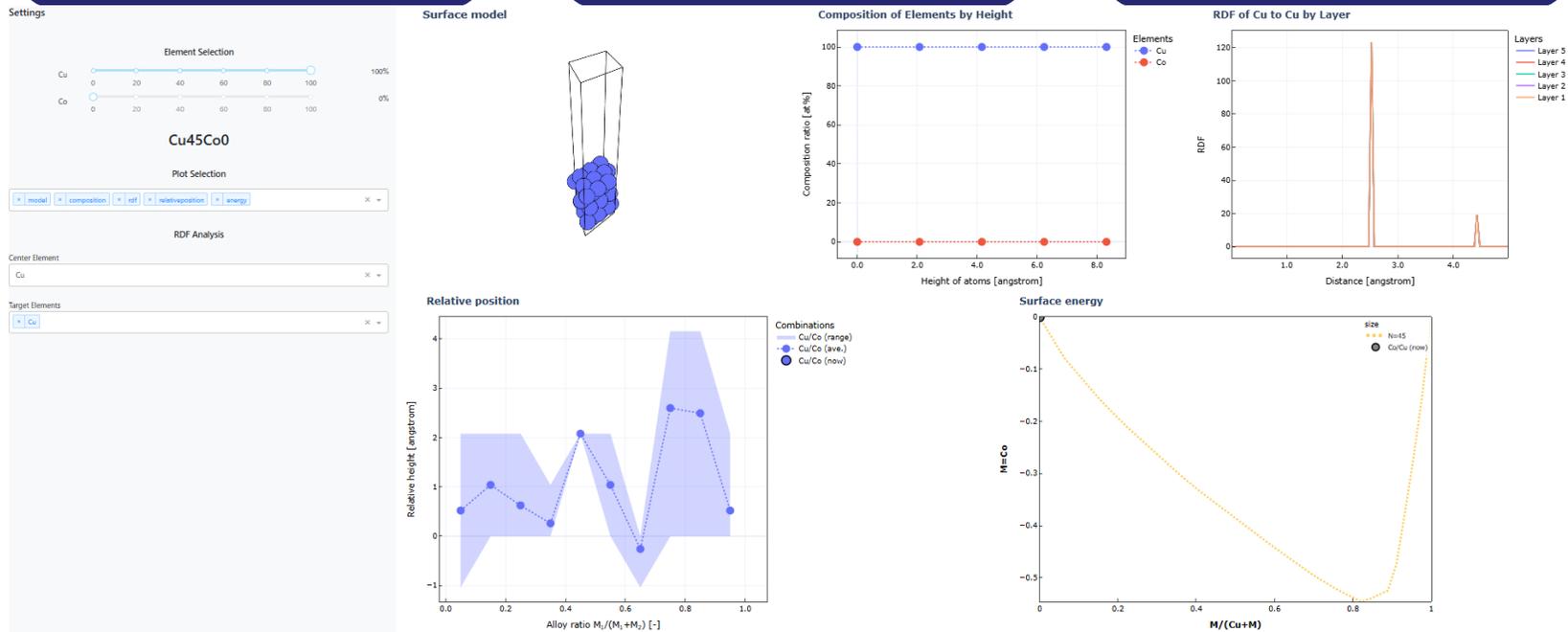
入力値: 合金の金属種

定式化に必要な教師データの第一原理計算(従来手法の数10分の1程度の回数)

金属配置問題の定式化

アニーリング

結果の可視化



➤ 合金の金属種の入力と定式化用の教師データの算出のみを行うことで、

少ない計算コストで表面構造を出力するプログラム”SurfQit”を作成、利用支援ドキュメントを日本語/英語で公開

本開発プログラムにより、触媒化学研究者に対する合金表面の構造理解を支援

→ 材料と量子の力で持続可能な社会の実現へ