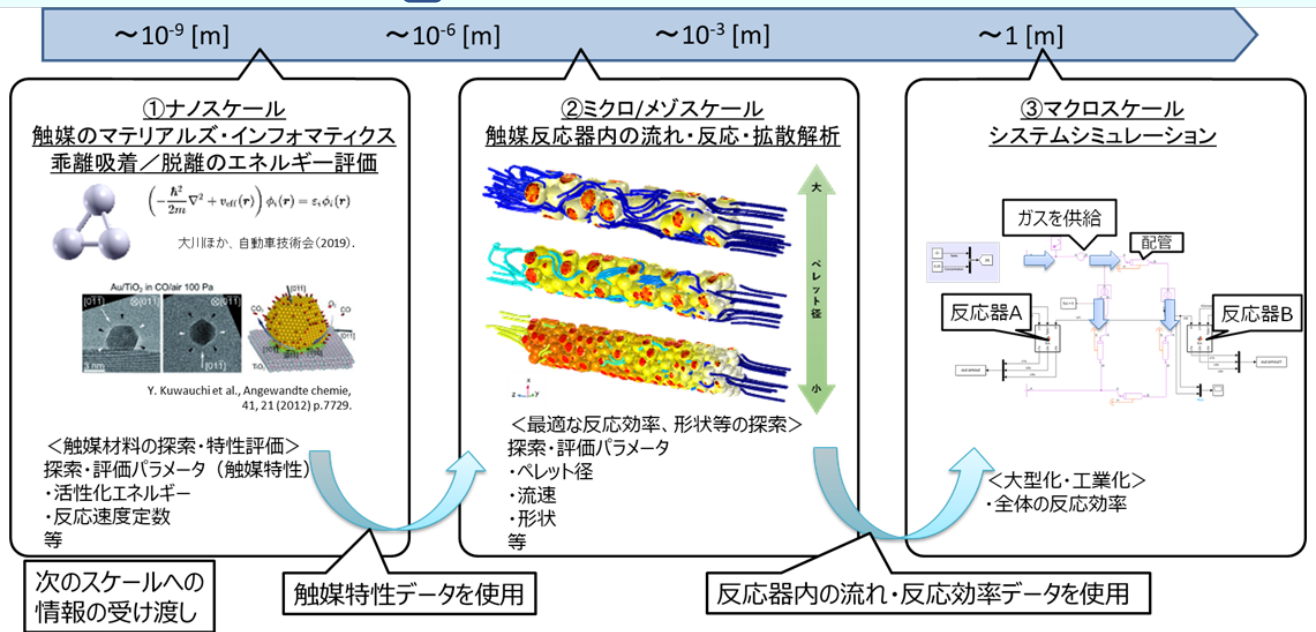


# 触媒のマルチスケールシミュレーションと マテリアルズインフォマティクス

コベルコ科研ではこれまでに種々の反応を考慮したシミュレーション技術に関するシミュレーション技術を構築してまいりました。そこで開発された技術を触媒関連にも適用し、マイクロ領域からマクロ領域までの解析を可能としました。また、触媒に関する機械学習による検討も開始しております。さらに、当社の保有する実験、計測技術との融合により、より精緻な解析モデル開発も可能です。

## マルチスケールシミュレーション例



## 触媒のマテリアルズ・インフォマティクス

第一原理計算の解析結果と機械学習アルゴリズムを活用し、窒素酸化物の還元反応を対象とし、それを還元剤を用いず直接分解できる材料を探索した場合

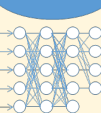
### 説明変数

(単結晶における物性、ハンドブックより)

- 族番号
- 周期番号
- 原子番号
- 原子量
- 電気陰性度
- イオン化ポテンシャル
- 融解エンタルピー
- 密度

参考: Takigawa, J., Shimizu, K.-i, Tsuda, K. & Takakusagi, S. RSC Adv. 6, 52587-52595 (2016).

### 機械学習



### 目的変数・教師データ

(第一原理計算を実行して得る。)

NO分子の  
解離吸着エネルギー-Ea

① NO 吸着

② NO → N + O

① ②

触媒材料表面

43種×43種の説明変数を用いて機械学習モデルにより検討した結果、良いグループは比較的左側、悪いグループは右側の元素が使われる傾向であった。



最高値に近いほど青色、最低値に近いほど赤色にマップ化

この技術資料に関するお問い合わせは、最寄り営業担当に連絡いただくか、もしくは弊社問合せ窓口までお知らせください。  
[mailto:inquiry\\_eigyo@kki.kobelco.com](mailto:inquiry_eigyo@kki.kobelco.com)