

Fri. Oct 27, 2023

Room-E

Environmental chemistry

[2E10-2E14] Environmental chemistry

Chair: Akira Oda (Nagoya Univ.)

1:00 PM - 2:15 PM Room-E (7F-room-702)

[2E10] Synthesis of Fe-encapsulated CHA-type zeolites
and its catalytic activity for partial oxidation
of methane

○Shuhei Suwa¹, Ryota Osuga², Kakeru Ninomiya¹,
Maiko Nishibori¹, Kiyoshi Kanie¹, Atsushi Muramatsu¹
(1. TOHOKU University, 2. Hokkaido University)

1:00 PM - 1:15 PM

[2E11] Oxidative reforming of methane over MFI-type
aluminosilicates

○Ryoma Michinobu¹, Ryota Osuga², Kakeru Ninomiya¹,
Mizuho Yabushita¹, Maiko Nishibori¹, Kiyoshi Kanie¹,
Toshiyuki Yokoi³, Atsushi Muramatsu¹ (1. Tohoku
University, 2. Hokkaido University, 3. Tokyo Institute
of Technology)

1:15 PM - 1:30 PM

[2E12] Spectroscopic study of reactive species in
methane conversion reaction with Fe-containing
zeolite catalysts

○Kengo Nakamura¹, Xiao Peipei¹, Junko Nomura¹,
Toshiyuki Yokoi¹ (1. Tokyo Institute of Technology)

1:30 PM - 1:45 PM

[2E13] Uncovering Insights in Machine Learning-driven
Catalyst Design for Oxidative Coupling of
Methane

○Shun Nishimura¹, Xinyue Li¹, Junya Ohyama², Keisuke
Takahashi³ (1. JAIST, 2. Kumamoto University, 3.
Hokkaido University)

1:45 PM - 2:00 PM

[2E14] Investigation of adsorption structures on
catalyst surfaces using quantum inspired
annealing

○Tetsuya Mizuguchi¹, Hiroshi Sampei¹, Koki Saegusa¹,
Kenshin Chishima¹, Takuma Higo¹, Yoshihiro Yayama²,
Makoto Nakamura³, Koichi Kimura³, Shu Tanaka⁴,
Yasushi Sekine¹ (1. Waseda Univ., 2. ENEOS, 3.
Fujitsu, 4. Keio Univ.)

2:00 PM - 2:15 PM

Environmental chemistry

[2E10-2E14] Environmental chemistry

Chair: Akira Oda (Nagoya Univ.)

Fri. Oct 27, 2023 1:00 PM - 2:15 PM Room-E (7F-room-702)

[2E10] Synthesis of Fe-encapsulated CHA-type zeolites and its catalytic activity for partial oxidation of methane

○Shuhei Suwa¹, Ryota Osuga², Kakeru Ninomiya¹, Maiko Nishibori¹, Kiyoshi Kanie¹, Atsushi Muramatsu¹ (1. TOHOKU University, 2. Hokkaido University)

1:00 PM - 1:15 PM

[2E11] Oxidative reforming of methane over MFI-type aluminosilicates

○Ryoma Michinobu¹, Ryota Osuga², Kakeru Ninomiya¹, Mizuho Yabushita¹, Maiko Nishibori¹, Kiyoshi Kanie¹, Toshiyuki Yokoi³, Atsushi Muramatsu¹ (1. Tohoku University, 2. Hokkaido University, 3. Tokyo Institute of Technology)

1:15 PM - 1:30 PM

[2E12] Spectroscopic study of reactive species in methane conversion reaction with Fe-containing zeolite catalysts

○Kengo Nakamura¹, Xiao Peipei¹, Junko Nomura¹, Toshiyuki Yokoi¹ (1. Tokyo Institute of Technology)

1:30 PM - 1:45 PM

[2E13] Uncovering Insights in Machine Learning-driven Catalyst Design for Oxidative Coupling of Methane

○Shun Nishimura¹, Xinyue Li¹, Junya Ohyama², Keisuke Takahashi³ (1. JAIST, 2. Kumamoto University, 3. Hokkaido University)

1:45 PM - 2:00 PM

[2E14] Investigation of adsorption structures on catalyst surfaces using quantum inspired annealing

○Tetsuya Mizuguchi¹, Hiroshi Sampei¹, Koki Saegusa¹, Kenshin Chishima¹, Takuma Higo¹, Yoshihiro Yayama², Makoto Nakamura³, Koichi Kimura³, Shu Tanaka⁴, Yasushi Sekine¹ (1. Waseda Univ., 2. ENEOS, 3. Fujitsu, 4. Keio Univ.)

2:00 PM - 2:15 PM

Fe 内包 CHA 型ゼオライトの合成と メタン部分酸化反応への応用

(東北大*・北海道大**) ○諏訪 修平*・大須賀 遼太**・二宮 翔*・
西堀 麻衣子*・蟹江 澄志*・村松 淳司*

1. 緒言

金属内包ゼオライトは、内包された金属種が活性種となり、不均一触媒として様々な用途で用いられている。先行研究において、クラスター状の貴金属元素 (Pt、Pd など) をゼオライト細孔内に内包させたことが報告されている¹⁾。一方で、金属クラスターを内包したゼオライトの合成は複雑な手法が必要となるため、簡便な合成手法の開発が課題となる。そこで、本研究では、骨格から脱離した金属種が細孔から抜けることを防ぐため、酸素 8 員環の小さな細孔と大きなケージから成る CHA 型ゼオライトに着目した。Fe 置換 CHA 型ゼオライトに対して酸処理を施し、生成した Fe 種を細孔内に内包させる手法を試みた。また、ゼオライト細孔内の Fe が CH₄ 酸化反応に対して有効であることが知られているため²⁾、本手法で合成した Fe 内包 CHA 型ゼオライト (Fe-CHA) の触媒特性評価を行った。

2. 実験

Fe-CHA の合成は以下の手順で行った。N,N,N-trimethyl-1-adamantylammonium hydroxide (TMAdaOH) と NaOH の水溶液中に SiO₂ (Cab-o-sil M5) と α-FeOOH を混合、攪拌することで合成ゲルを調製した (合成ゲルのモル比: 1.0 Si: 0.10 Fe: 0.20 TMAdaOH: 0.20 NaOH: 40 H₂O)。調製したゲルを室温で 2 時間攪拌後、オートクレーブに移し、170 °C で 7 日間の水熱処理を行った。水熱処理後、吸引ろ過・洗浄により試料を回収し、一晚乾燥後、600 °C で 6 時間焼成を行った。その後、焼成後試料を 6 M HCl 水溶液に加え 80 °C で 24 時間酸処理を行った。合成した試料のキャラクタリゼーションは XRD、UV-vis、ICP、NH₃-TPD、XAFS などを行った。

活性試験は、30 mL の耐圧容器に触媒 50 mg とスルホラン 2.95 mL、30 % H₂O₂ 0.046 mL を加え、CH₄ 3 MPa、50 °C、1 時間の条件で実施した。生成物の定量は、¹H-NMR により行った。

3. 結果と考察

合成した酸処理前の Fe-CHA の XRD パターンを確認したところ、CHA 型構造に帰属されるピーク以外に、CHA 骨格内に充分に入れることができなかった Fe 由来と考えられるヘマタイトに帰属されるピークが観測された。一方、酸処理を行うことでヘマタイトを主とする骨格外 Fe が除去され、CHA 型ゼオライトのみが得られた。また、酸処理前後の Fe-

CHA について NH₃-TPD 測定を行った結果、骨格内 Fe 種に由来する酸点が酸処理後に減少が確認されたため、酸処理により骨格から Fe 種が除去されたことが示唆された。仕込みの Si/Fe 比が 10 で合成した試料の場合には、酸処理の時間を延ばしても Si/Fe が約 40 程度で頭打ちとなった。この結果は、酸処理により生成した Fe 種が CHA 型構造の小細孔を通過できず、ケージ内に閉じ込められたことを示唆している。内包した Fe について XAFS による局所構造解析を行った結果、酸処理前後試料で pre-edge ピークの上昇が確認された。また、XRF 測定により酸処理由来の Cl は検出されなかったため、細孔内に Fe のオキサイドクラスターが内包されたと推測された。得られた Fe-CHA の MTM 反応への触媒活性について、異なる Si/Fe 比の CHA 型ゼオライト及び Fe-MFI と比較を行った (Fig. 1)。Fe を多く含有する試料は、比較的高いメタノール生成量を示した。また、同程度の Si/Fe 比の Fe-MFI と比較したところ、Fe-CHA がより高いメタノール生成量を示した。発表では、本触媒の詳細なキャラクタリゼーションや触媒活性比較について報告する。

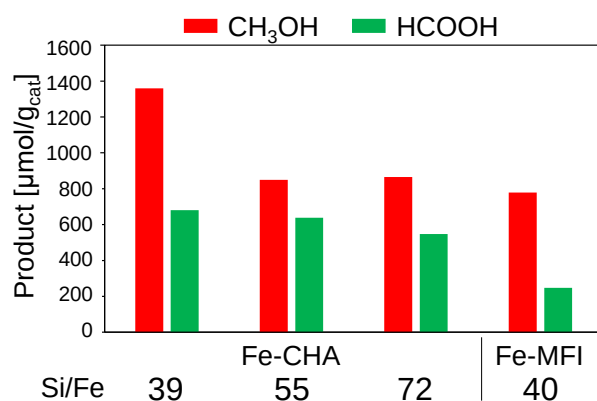


Fig. 1. Catalytic activity for methane oxidation reaction using H₂O₂ as oxidant.

1) L. Liu, U. Diaz, R. Arenal, G. Agostini, P. Concepcion, A. Corma, *Nature Materials*, **16**, 132-138 (2016).

2) M. Dusselier, M. E. Davis, *Chem. Soc. Rev.*, **44**, 7371 (2015).

MFI 型アルミノシリケートを用いた酸化的メタン改質反応

(東北大^{*1}・北海道大^{**}・東工大^{***}) ○道信 亮真^{*}・大須賀 遼太^{**}・二宮 翔^{*1}・
 やぶした みずほ^{*}・にしぼり まい^{*}・かにえ きよし^{*}・蟹江 澄志^{*1}・横井 俊之^{***}・むらまつ あつし^{*1}・村松 淳司^{*1}

1. 緒言

天然ガスの主成分であるメタンを基幹化学品原料である合成ガス(CO, H₂)に改質する触媒の開発は、古くから盛んに研究されている¹⁾。現在、合成ガスの製造には、金属担持触媒が主に用いられている一方で、近年ではゼオライト触媒も本反応系に有効であることが見出されている²⁾。我々は、Ga 含有 MFI 型ゼオライト ([Ga]-MFI) がメタン改質反応において高い CO 選択性を示すことを報告した³⁾。一般的に、ゼオライトの触媒活性は、結晶中の金属種や酸点に起因する。そこで本研究では、本反応系に対する活性点としてブレンステッド酸性質に着目し、代表的な固体酸触媒であるアルミノシリケートの触媒応用を検討した。酸化的メタン改質反応に対する種々のアルミノシリケートの触媒活性を比較し、各種構造解析を行うことで、触媒活性点および反応経路について考察した。

2. 実験

アルミノシリケートは、MFI 型 (東ソー製: [Al]-MFI-12)、MOR 型 (東ソー製: [Al]-MOR-7.5)、FAU 型 (東ソー製: [Al]-FAU-7.5) を用いた。また、比較として、Al を含まない MFI 型ゼオライトである Silicalite-1 (S-1) を合成した。サンプル名の数字は Si/Al 比を示している。[Al]-MFI-12 を Na イオン交換することで、Na 体の試料 (Na IE) を調製した。得られた試料のキャラクタリゼーションには、XRD, NH₃-TPD などを用いた。

メタン改質反応活性評価は、固定床流通式反応装置を用いて実施した。石英製の反応管に触媒 50 mg を充填し、500℃, Ar 流通下で 30 分前処理を行った。その後、500–700℃で 50℃ずつ昇温させ、各温度で 1 分間 CH₄, O₂, Ar の混合ガスを流通させた。反応後ガスは GC-TCD と、メタナイザーを接続した GC-FID を用いて分析した。

3. 結果および考察

各触媒のメタン改質反応に対する触媒活性を比較した結果を図 1 に示す。まず、骨格構造の違いに着目すると、いずれの構造でも CH₄ 転換が確認された。MFI 型は 9% のメタン転換率と 86% の CO 選択率を示した一方で、MOR 型および FAU 型の触媒活性は MFI 型と比較して有意に低い値であった。同じ MFI 型構造を有しているが Al を含まない S-1 は、触媒活

性を示さなかったことから、触媒活性の発現には Al 種が必要であることがわかった。さらに、Na イオン交換によりブレンステッド酸点を減少させた試料では、CH₄ 転換率が 5% 程度まで減少したことから、ブレンステッド酸点が活性に寄与していることが示唆された。

一般的な酸化的メタン改質反応では、CH₄ の燃焼に次いで、CH₄ の水蒸気改質および逆シフト反応が進行することで合成ガスが得られる。本研究では、いずれの試料を用いた反応においても、80–90% 程度の CO 選択性を示したにもかかわらず H₂ 生成は僅かであったため、逆シフト反応の寄与が大きいことが示唆された。

発表では、各種触媒の構造解析結果や、ブレンステッド酸点量や反応条件の違いが触媒活性に及ぼす影響についても議論する。

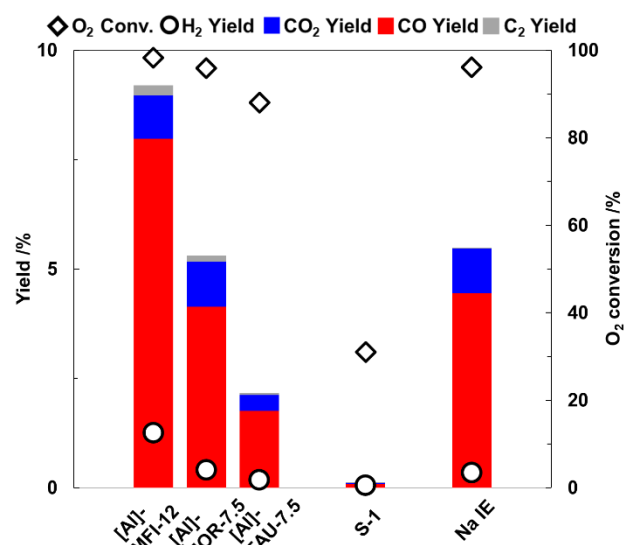


図 1. 700℃におけるメタン改質反応に対する触媒活性評価。触媒量 = 50 mg, Ar = 7.5 mL/min, CH₄ = 4 mL/min, O₂ = 1 mL/min.

1) Andrew P. E. Y.; Tiancun X.; Malcom L. H. G., *Top Catal*, **2003**, 22, 345-358

2) Y. Hou, S. Ogasawara, A. Fukuoka, H. Kobayashi, *Catal. Sci. Technol.*, **2017**, 7, 6132

3) Yabushita M.; Yoshida M.; Muto F.; Horie M.; Kunitake Y.; Nishitoba T.; Maki S.; Kanie K.; Yokoi T.; Muramatsu A., *Mol. Catal.* **2019**, 478, 110579.

Fe 含有ゼオライト触媒を用いたメタン転換反応における 反応活性種の分光学的解析

(東京工業大) ○中村 研吾・Xiao Peipei・野村 淳子・横井 俊之

1. 緒言

メタンは安定的に供給される炭素資源であり、幅広い使用用途が模索されている。我々の研究室ではメタンからメタノールを経由した低級オレフィン生成反応プロセスを報告している。このプロセスでは高 Al 含有量の Cu イオン交換 CHA 型ゼオライトを触媒として用い、Cu 種によって生成されたメタノールが酸点により低級オレフィンへと転換している。本研究では金属種として Fe を用いた場合の検討を行った。さらに in-situ FT-IR 測定により反応活性種及び反応機構を検討した。

2. 実験

CHA 型ゼオライトは FAU 型ゼオライト (Si/Al = 15) を原料として有機構造規定剤を用いずに合成された。その後、イオン交換法によって金属カチオンを導入し、触媒として反応に用いた (Fe/CHA, Cu/CHA)。

CH₄ の部分酸化反応は、固定床流通式反応装置を用いて行った。触媒を反応管に 100 mg 詰め、Ar 流通下 500°C で 1 時間前処理を行った後、反応温度 350 °C にて CH₄, N₂O, H₂O 混合ガス (P_{CH4}= 0.08 atm, P_{N2O}= 0.08 atm, P_{H2O}= 0.08 atm, P_{Ar}= balance) を 25 ml min⁻¹ で供給し、反応を行った。

反応活性種解析のため、メタンをプローブとして用いた in-situ FT-IR 測定を行った。真空中 500 °C で 1 時間前処理を行った後、温度を -120 °C まで落として 500Pa のメタンを導入し、少しずつ温度を上げながら連続してスペクトル測定を行った。次に反応と同じ 350 °C まで昇温し、N₂O を 500Pa で導入して 30 分間サンプルを活性化させた。その後、再度 -120 °C まで降温し、同様の IR 測定を行った。

3. 結果と考察

X 線回折パターンより、得られた試料は単相で CHA 型構造を有していた。元素分析の結果から調製された CHA の Si/Al 比は 4.6 であった。また、金属含有量は Fe/CHA が Fe/Al = 0.007, Cu/CHA は Cu/Al = 0.032 と非常に少量であることが確認された。

Fig.1 には得られた Fe/CHA 及び Cu/CHA をそれぞれ触媒として用いたメタン転換反応結果を示す。Fe/CHA ではメタン初期転換率約 5% を示し、Cu/CHA を用いた場合 (約 2%) よりも大幅に向上した。また、流通時間 70 分以降の生成物分布が金属種によらずほぼ同じことから、金属種は MTM 反応に大きな影響を与えていると考察された。

メタン吸着 FT-IR 測定を行った結果、吸着したメタンの C-H 結合に由来するピークが確認でき、さらにその強度が温度の上昇に伴い減少した。また、測定した触媒および N₂O 処理の有無によってピークが消える温度に違いがみられた。そこでピークの強度と温度の関係を Fig.2 に示す。Fe/CHA は Cu/CHA よりも高い温度でメタンを吸着している。反応結果においてメタン転化率に大きな差がみられたのはこのメタン吸着能に由来していると考えられた。また、N₂O による活性化によってグラフが高温側にシフトすることが確認された。これは N₂O によって金属種が活性酸素を持ち、メタンとより強く吸着できるようになったからと考えられる。

発表ではメタン以外のプローブを用いた FT-IR の結果も示し、より多角的な視点で本反応の活性種や反応機構について議論する。

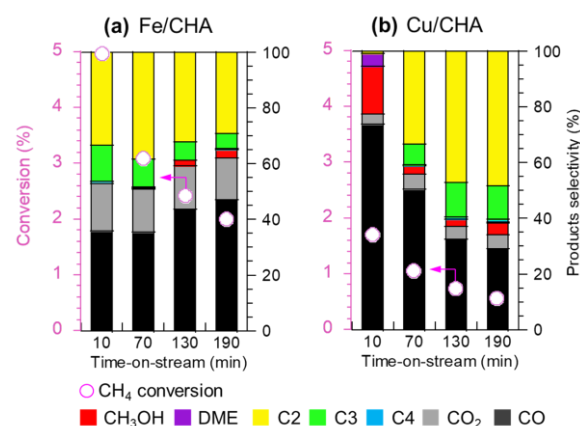


Fig. 1 Catalytic conversion of CH₄ with N₂O over (a) Fe/CHA and (b) Cu/CHA

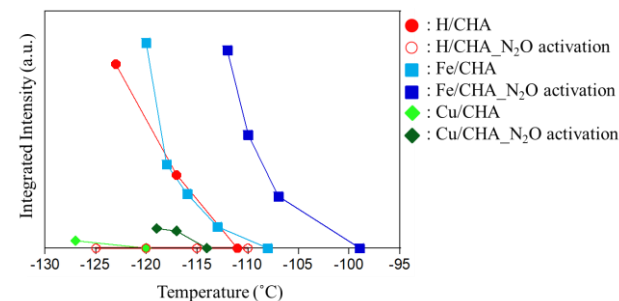


Fig.2 Changes in the peak areas of C-H bond in CH₄ adsorbed FT-IR spectra of various zeolite catalysts before and after N₂O activation

1) K. Nakamura, T. Yokoi et al., *Catal. Sci. & Tech.*, 13, 2648 (2023).

データ駆動型メタン酸化カップリング触媒開発の実験検証に基づく洞察

(北陸先端大*・熊大**・北大***) ○西村 俊*・LI Xinyue*・大山 順也**・
高橋 啓介***

1. 緒言

データ駆動による新たな触媒開発：触媒インフォマティクス的手法開拓に大きな関心が寄せられている¹⁾。特に人知では捉えきれない高次元の相関関係から、従来の研究スタイルでは発見できなかった未探索空間での機能性材料を開拓することが期待されている。本研究では、その発見から40年を経ても経済性を担保した工業プロセスの実現に至っていない「メタンの酸化カップリング(OCM)」をターゲットとした。公知の実験データに基づき機械学習を展開し、データ駆動型OCM触媒探索の実践から現状と課題を検証した。

2. 実験

ハイスループット実験 (HTS) により同一の触媒調製法・反応器・反応評価プロトコルにより取得された高温OCMデータ (359触媒)²⁾、および2020年以前の論文/特許から収集された文献データ (4759点)³⁾を、OCM触媒探索のための基礎データとして用いた。データ前処理として、i) HTSデータでは各触媒の最大C₂値のみを抽出し、ii) データ点の中で反応条件・触媒組成および反応結果に不明瞭な点があるデータを除外することで、2842点の実験データを得た。触媒情報の記述には one-hot encoding を適用し、触媒の元素種と反応条件および対応するC₂収率に基づき回帰モデルを作成した。なお、実験はCH₄+O₂ガス濃度80%以上の条件を検証条件とし、塩の入手が難しいThは除外した。サポートベクター回帰 (SVR) および獲得関数 (EI) を軸としたベイズ最適化による予測について、実験検証し結果を比較した。プロセス検証の視点として、従来型の研究者の予測検証・探索精錬のスタンスと同様に実験実証で得られたデータを再学習に適用し、予測触媒の性能がどのように変化するかを検証した。

触媒は各金属成分 (0.2 mmol) を1.0 gの担体中含浸・蒸発乾固後、900°Cで焼成し調製した。活性評価は常圧固定相流通式反応装置を使用し、触媒50 mgを酸素酸化後、CH₄/O₂/N₂=21.0/7.0/3.0 mL min⁻¹流通下で昇温しOCM反応活性を評価した。

3. 結果および考察

SVR (交差検証精度: R²=0.54) に基づき高C₂収率触媒を予測し、C₂収率18.00%以上が期待される高スコア36触媒のOCM性能を評価した。その結果、実際のC₂収率で15.0%以上を示す触媒が8

触媒 (LiMnW/SiO₂, MnRbW/SiO₂, KMnW/SiO₂, NaMnW/SiO₂, LiBa/La₂O₃, SrLa/La₂O₃, NaCeW/SiO₂, LiSr/La₂O₃) 確認できた。次いで、実験結果を追加したデータセットからSVRにより再度C₂収率を予測した (交差検証精度: R²=0.54)。その結果、C₂収率18.00%以上の予測スコアを示す3触媒 (NaCeW/TiO₂, NaMnW/SiO₂, LiMn/MgO) が提案されたが、いずれも1回目の検証で確認した触媒であり、SVRによる実験検証・予測の繰り返しでは予測空間が委縮し触媒予測の改善は認められないことが分かった。⁴⁾

精査された2842点の実験データ、SVRの1回目の検証結果、さらに未発表の当該装置で収集された264点の実験データを追加し、3335点からなる新たなデータセットを作成した。EIを指標としたベイズ最適化に基づく予測と実験検証を3回繰り返した結果をFig. 1に示す。興味深いことに、SVRとは異なり予測と検証を繰り返すことで徐々に最大C₂収率が改善される傾向が認められた。しかし、元素の偏り (特にLa₂O₃担体) が顕著であり、元素の許容性能 (C₂収率としての閾値、現条件で16-17%付近と推定される) 以上の高活性触媒は提案できなかった。⁴⁾

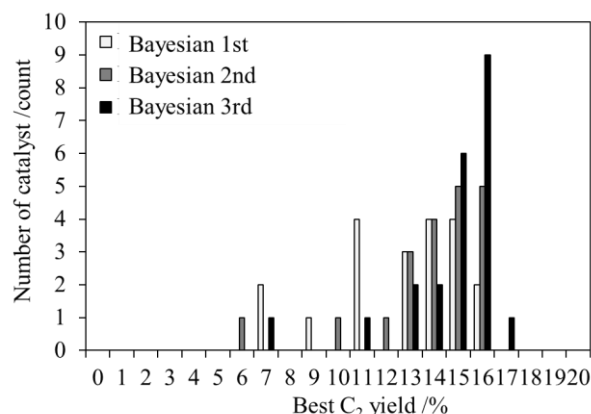


図1 ベイズ最適化に基づく予測・実証の繰り返し実験において確認された最大C₂収率の分布変化

4. 謝辞

JST-CREST (17H04966) の支援に謝意を表す。

- 1) K. Takahashi *et al.*, *ChemCatChem* **11**, 1146 (2019); *Chem. Commun.* **59**, 2222 (2023).
- 2) T. Taniike *et al.*, *ACS Catal.* **10**, 921 (2020); *ibid.* **11**, 1797 (2021).
- 3) K. Shimizu *et al.*, *ChemCatChem* **13**, 3636 (2021).
- 4) S. Nishimura *et al.*, *Catal. Sci. Technol.* **13**, 4646 (2023).

量子インスパイアードアニーリングを用いた 触媒表面における吸着構造の検討

（早稲田大学^{*}・ENEOS^{**}・富士通^{***}・慶應義塾大学^{****}）

○水口 哲也^{*}・三瓶 大志^{*}・七種 紘規^{*}・千島 健伸^{*}・比護 拓馬^{*}・
矢山 由洋^{**}・中村 誠^{***}・木村 浩一^{***}・田中 宗^{****}・関根 泰^{*}

1. 緒言

固体表面における分子吸着は不均一触媒反応¹⁾やガス分離・精製²⁾などの様々な分野において重要である。吸着分子の配置は表面状態の解明や材料設計に活用できるが、より現実的な系を考慮するために分子が吸着するサイトや吸着する分子の数を増加させると、指数関数的にその候補が増えていく。しかし、従来の古典コンピュータでの配置探索は、吸着分子の配置の候補が膨大に存在するものに対しては計算コストと精度の間にトレードオフの関係が存在する。量子コンピュータの一種である量子アニーリングは組合せ最適化問題に対して正確かつ低コストに解を得ることができる³⁾。そこで、分子の吸着配置の決定を組合せ最適化問題と捉え、量子アニーリングを用いることを着想した。

本研究では、モデル系として PdZn 上での CO 吸着を考えた。PdZn 上の CO は H₂ と反応して水素キャリアの 1 つであるメタノールを生成するため、水素を貯蔵、輸送するための反応でも現れる系である。このような系に対して、分子の吸着構造をアニーリングに適する式で表現した。この式に対してアニーリングを行い、そのコストと精度を従来手法と比較した。結果として、アニーリング型の量子コンピュータを用いた方法により従来の手法に比べて安定な分子の吸着構造を、低いコストで探索できる可能性が示された。

2. シミュレーション

吸着エネルギーの算出は以下の式により量子化学計算シミュレータである Matlantis を用いて算出した。

$$E_{ad} = E(\text{CO/PdZn}) - \{M \times E(\text{CO}) + E(\text{PdZn})\} \quad (1)$$

ここで、 E_{ad} , $E(\text{CO/PdZn})$, $E(\text{CO})$, $E(\text{PdZn})$ は順に吸着エネルギー、PdZn スラブに CO 分子を吸着させた際の系のエネルギー、CO 分子のエネルギー、PdZn スラブのエネルギーであり、 M は吸着した CO 分子の数である。構造最適化後にエネルギーを算出した。構造最適化時に CO は PdZn(111) 表面に対して垂直にのみ移動する事とし、表面緩和は考慮しなかった。

組合せ最適化問題として固体表面における吸着分子の配置の予測を行うために、量子アニーリングのシミュレータであるデジタルアニーラを用いた。アニーリングの際に吸着する最大の CO の分子数について制約条件を以下のように課すことで、吸着分子数を変化させた際の分子配置をシミュレートした。

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i \leq m \quad (2)$$

ここで、 σ_i は吸着サイト i に分子が吸着するか否かを表す変数、 m は吸着分子の最大数、 N は吸着サイトの数である。

3. 結果及び考察

分子配置の予測精度の検討のため、アニーリングと従来手法において各吸着分子数で予測された配置の吸着エネルギーを計算した。その結果、アニーリングは従来の手法よりも安定な分子吸着の配置を求められた。これは、アニーリングは従来手法よりも広い探索空間を持つためである。

また、分子配置の予測コストの検討のため、アニーリングと従来手法で必要な計算回数を測定した (Fig. 1)。Fig. 1 よりアニーリングによる計算は中程度以上の被覆率においてすべての計算方法の中で最小の計算回数であった。これは、3 分子以上ではアニーリングの試行回数が一定になるためである。

これより、分子の傾きや表面緩和を無視した系において量子アニーリングを用いることで、従来の手法よりも低いコストかつ高い精度で分子吸着の配置を予測できる可能性が示された⁴⁾。

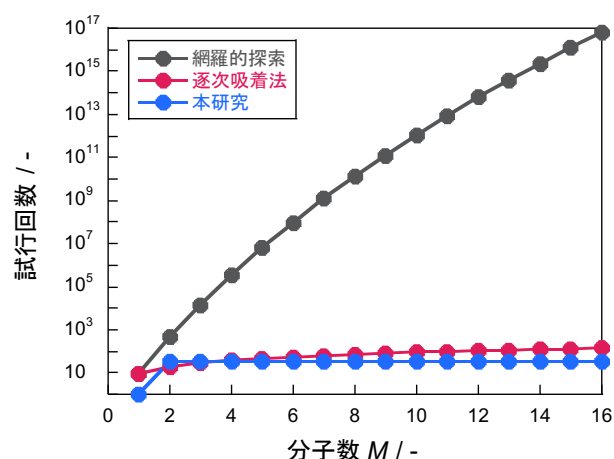


Fig. 1 様々な手法の計算試行回数

Reference

- 1) Yang, Z. Z. *et al.*, *Coord. Chem. Rev.*, **154**, 386 (2019).
- 2) Lin, R. B. *et al.*, *Chem*, **6**, 337 (2020).
- 3) Arute, F. *et al.*, *Nature*, **574**, 505 (2019).
- 4) Sampei, H., Saegusa, K. *et al.*, *JACS Au*, **3**, 991 (2023).