

汎用機械学習ポテンシャルと実験データを組み合わせた合金触媒探索と活性解明

(信州大学¹、京都大学²) ○久間 馨¹、丸田 悠斗²、スーサン メニェス アスペラ¹、ヘラルド ヴァラデスウェルタ¹、難波 優輔¹、草田 康平²、北川 宏²、古山 通久¹
 Exploration and reactivity analysis of alloy catalyst using universal machine learning interatomic potentials (¹*Shinshu University*, ²*Kyoto University*) ○Kaoru Hisama¹, Yuto Maruta², Susan Menez Aspera¹, Gerardo Valadez Huerta¹, Yusuke Nanba¹, Kohei Kusada², Hiroshi Kitagawa², Michihisa Koyama¹

Applying materials informatics to catalysis often faces difficulty in revealing mechanisms behind catalytic reactions. First-principles calculations, on the other hand, is restricted by high computational cost. In this study, we employed a universal neural network potential to accelerate data-curation, with the aim of searching for multi-element alloy catalysts through data-driven approach and simultaneously clarify theoretical origin of reactivity. We explored the RuRhPdIrPt alloys and in combination with Au, Ag, Sn, Ni, and Cu to find catalysts for hydrogen evolution reaction. The adsorption energy distributions calculated for the nanoparticle models that matches the experimental compositions are presented as histograms (Fig. 1a), converted into a two-dimensional feature using t-SNE, and predicted the activity using Gaussian process regression (Fig. 1b). As a result, it showed good accuracy as a two-variable model, and we were able to narrow down the active adsorption sites.

Keywords : *Hydrogen Evolution Reaction; Neural Network Potential; High-entropy alloy*

マテリアルズ・インフォマティクスを触媒化学に応用する場合、活性メカニズムはブラックボックスである。他方、第一原理計算を用いる場合は計算コストの制約が大きい。そこで本研究では汎用ニューラルネットワークポテンシャルを用いて高速にデータを収集、実験の活性を記述・予測し、合金触媒の探索と理論的な活性解明とを同時に実現することを企図する。RuRhPdIrPt 五元系合金と Au, Ag, Sn, Ni, Cu 添加した水素発生反応触媒を対象とした。実験の組成に合わせたナノ粒子モデルの水素吸着エネルギー分布をヒストグラムに変換し(Fig. 1a)、t-SNE を用いて 2 次元に次元削減し、ガウス過程回帰を用いて予測した(Fig. 1b)。その結果、2 変数モデルとしては良好な精度を示し、活性な吸着サイトを絞り込むことができた。

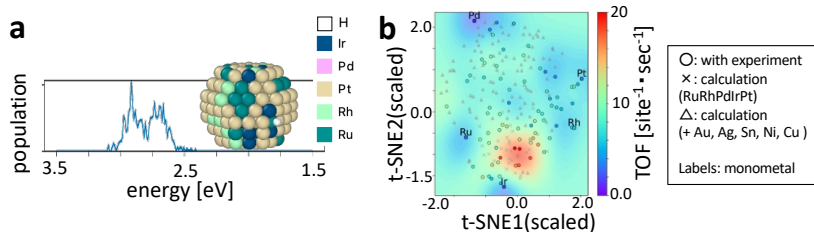


Fig. 1 (a) Example of the histogram of H adsorption energy of Ru₂₈Rh₁₆Pd₁Ir₁₈Pt₁₃₈ alloy. (b) Map of the catalytic reactivity by turn over frequency (TOF) as a function of t-SNE features

謝辞 本研究は環境省の「地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業」の支援を受けた。