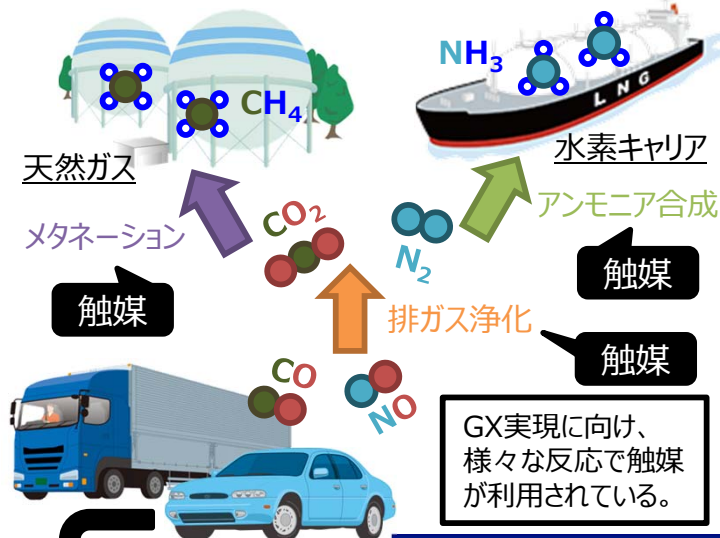


グリーントランスフォーメーション実現に向けた 触媒開発を支援する反応経路探索シミュレーション

高性能な触媒開発における設計指針を得るには、触媒と分子の反応メカニズムを原子スケールで解明する事が必須である。第一原理計算に基づく反応経路探索を用いる事で、実験では直接的に観測困難な、触媒の極表面と分子の反応を解析する事が出来る。

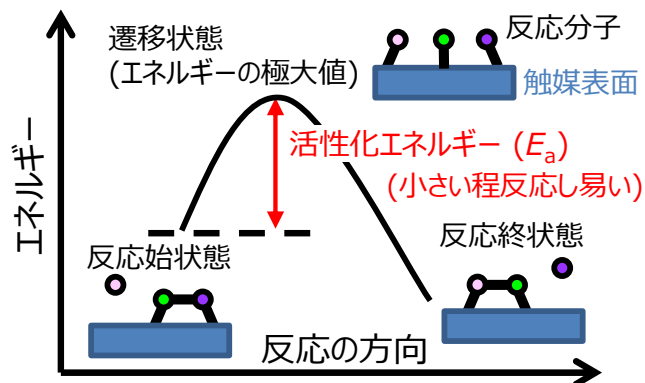
1. グリーントランスフォーメーション(GX)と触媒

高性能な触媒開発には、**原子スケールでの反応解析**が重要。



2. 第一原理計算に基づく反応経路探索

- 第一原理計算を用いて、反応の起こりやすさを検証。
- 反応時の原子・分子の挙動を直接予測する事が可能。

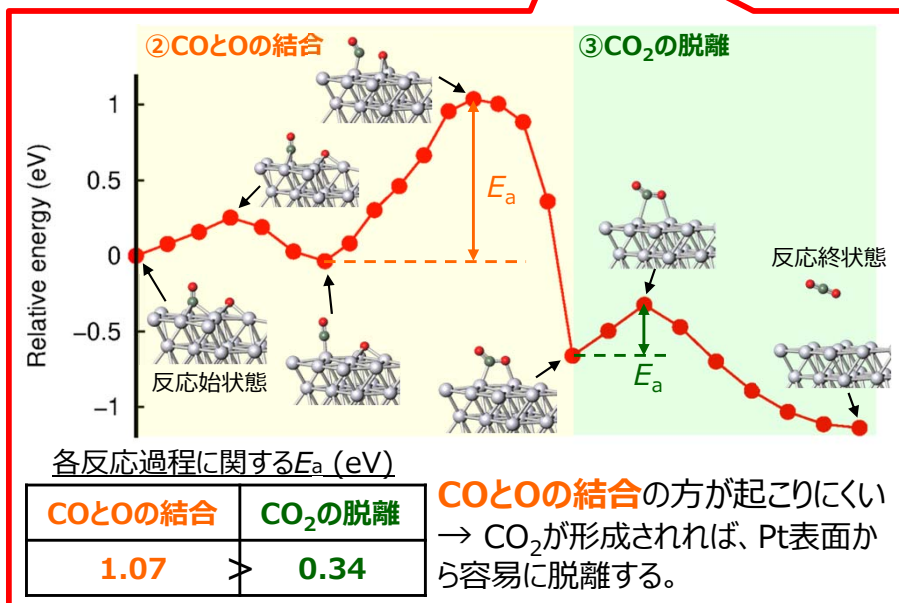
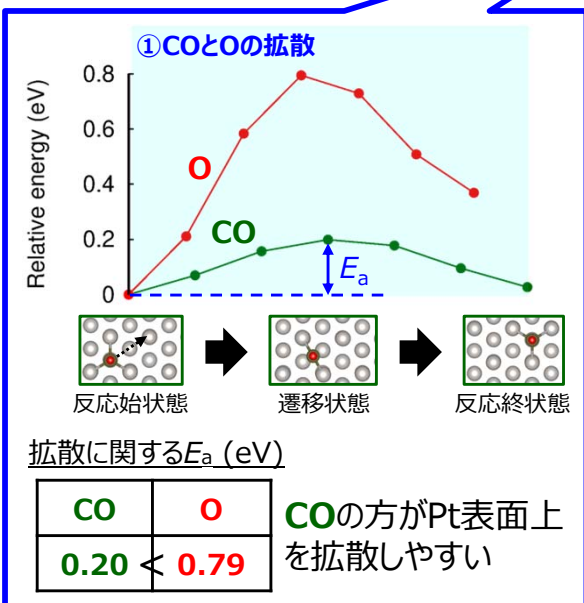
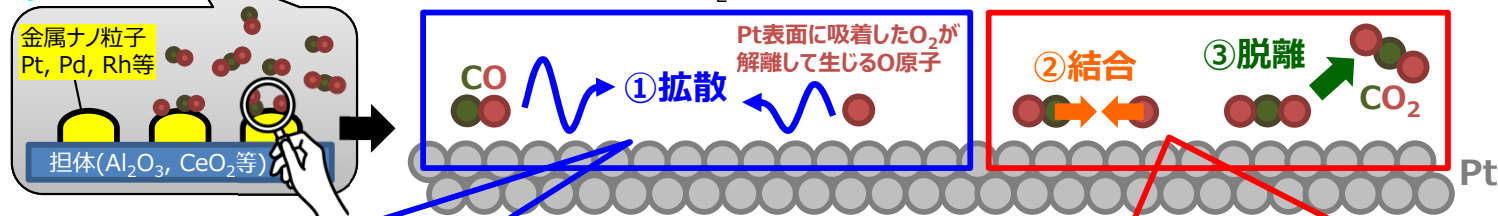


反応経路探索の豊富な経験と第一原理計算の高度な専門知識が必要!!

3. 自動車排ガス浄化触媒Pt(111)表面上のCO酸化の反応経路探索

自動車の排気ガスに含まれる有害なCOを、Pt触媒を用いて無害なCO₂に変換する過程を解析。

※Nudged Elastic Band法による反応経路探索



触媒の極表面における分子の反応過程を、原子スケールで観察・定量化!!

触媒種及び分子種を変えたシミュレーションも可能

反応経路探索により新規触媒開発を支援します!!