

# 高速な触媒開発に向けた 古典/量子ハイブリッド化による表面状態解析

三瓶大志・七種紘規  
(早稲田大学)

## 1. 導入

- 触媒化学とは
- 触媒開発の流れと課題
- 量子コンピューティング技術の導入

## 2. 触媒開発に向けた量子コンピューティング技術の適用

- 1) 合金触媒の構造解析に向けた手法開発
- 2) 触媒表面の吸着構造の理解に向けた手法開発

## 3. まとめと将来展望

## 1. 導入

- 触媒化学とは
- 触媒開発の流れと課題
- 量子コンピューティング技術の導入

## 2. 触媒開発に向けた量子コンピューティング技術の適用

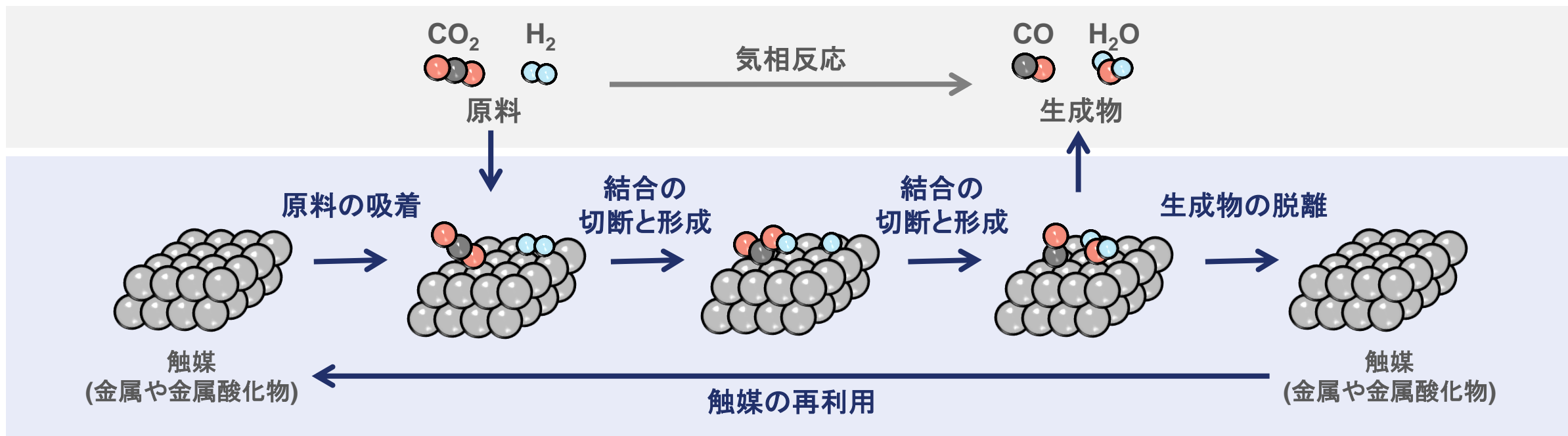
- 1) 合金触媒の構造解析に向けた手法開発
- 2) 触媒表面の吸着構造の理解に向けた手法開発

## 3. まとめと将来展望

# 1. 導入: 触媒化学とは

## □ 触媒とは

- 化学反応を促進する材料
- 原料(気体)と触媒(固体)の境界で、原料の吸着→結合の切断と形成→生成物の脱離を介して反応が進行



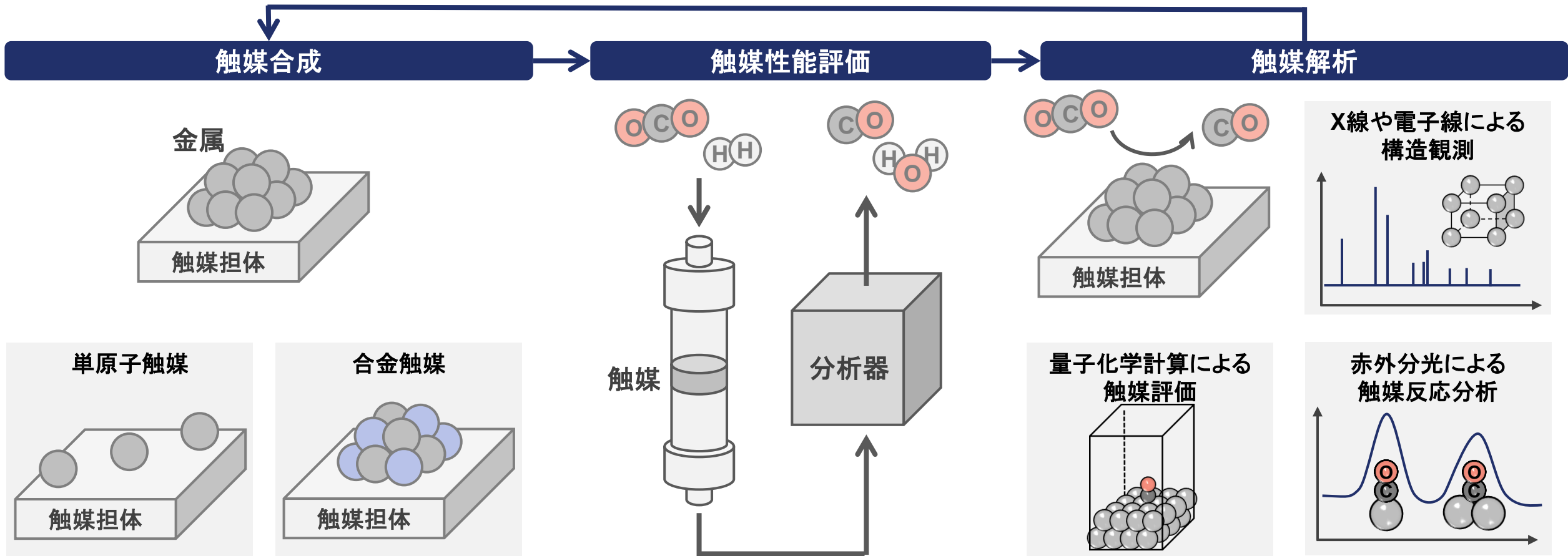
## □ 私たちが行っていること

- 有害物質の転換 ( $\text{CO}_2$ などの温室効果ガス、排気ガス)
- 有用物質の合成 (基礎化学品)
- エネルギーキャリアの転換 (メチルシクロヘキサン、アンモニア)

▶ 様々な化学反応の高効率な進行に向けて、  
高性能な触媒や触媒プロセスを開発

# 1. 導入: 触媒開発の流れ

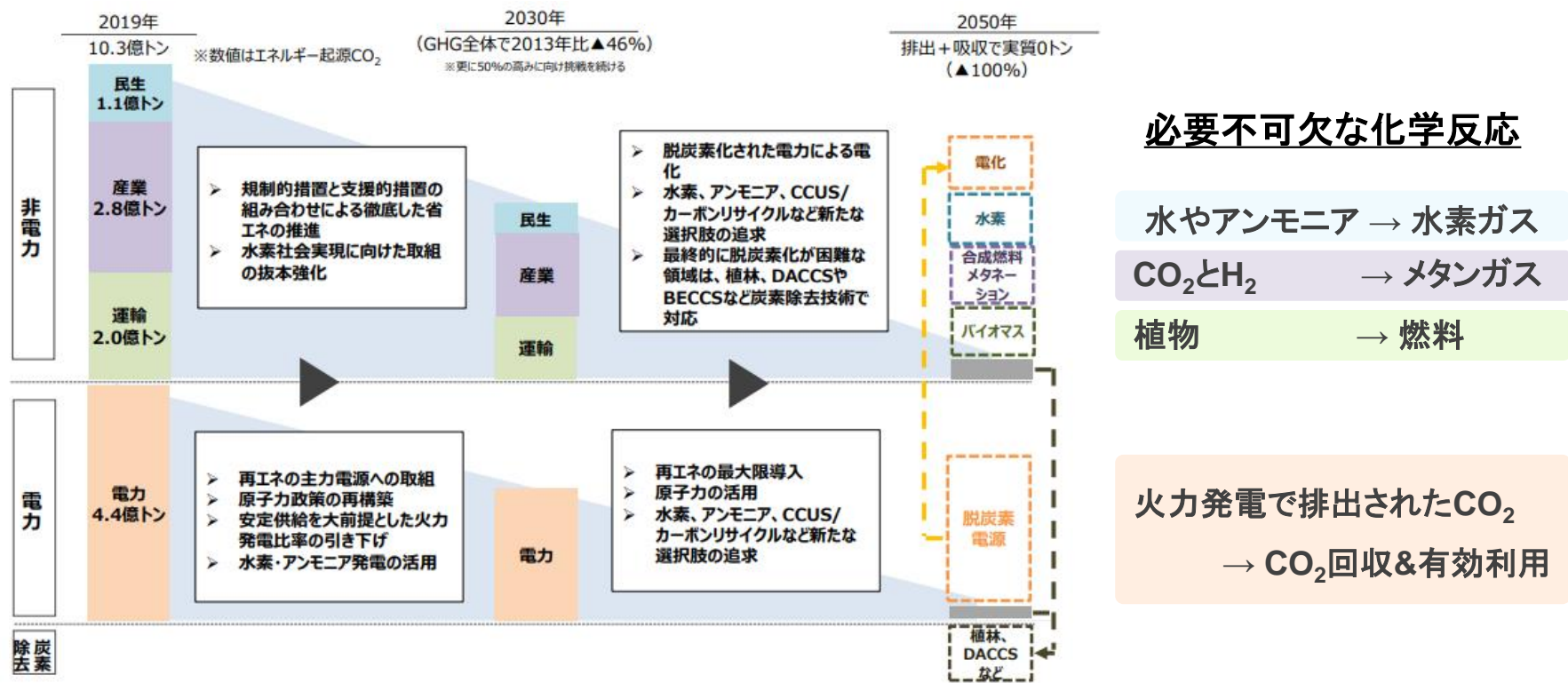
## □ 一般的な触媒開発



➤ 触媒合成・触媒性能評価・触媒解析を繰り返すことで、より良い触媒を開発

# 1. 導入: 2050年カーボンニュートラルの実現に向けた触媒開発

## □ 触媒開発とカーボンニュートラル社会の関係<sup>1)</sup>



- カーボンニュートラルの実現に向けて、化石資源の使用ではなく、**地上資源 (水・二酸化炭素・太陽光・植物)**からエネルギーや化学品を作る必要あり  
→ これに向けて、**様々な化学反応が必要不可欠**であり、**触媒**による化学反応の促進が重要
- 原料が安定な物質なため、**現状の触媒技術では不十分**

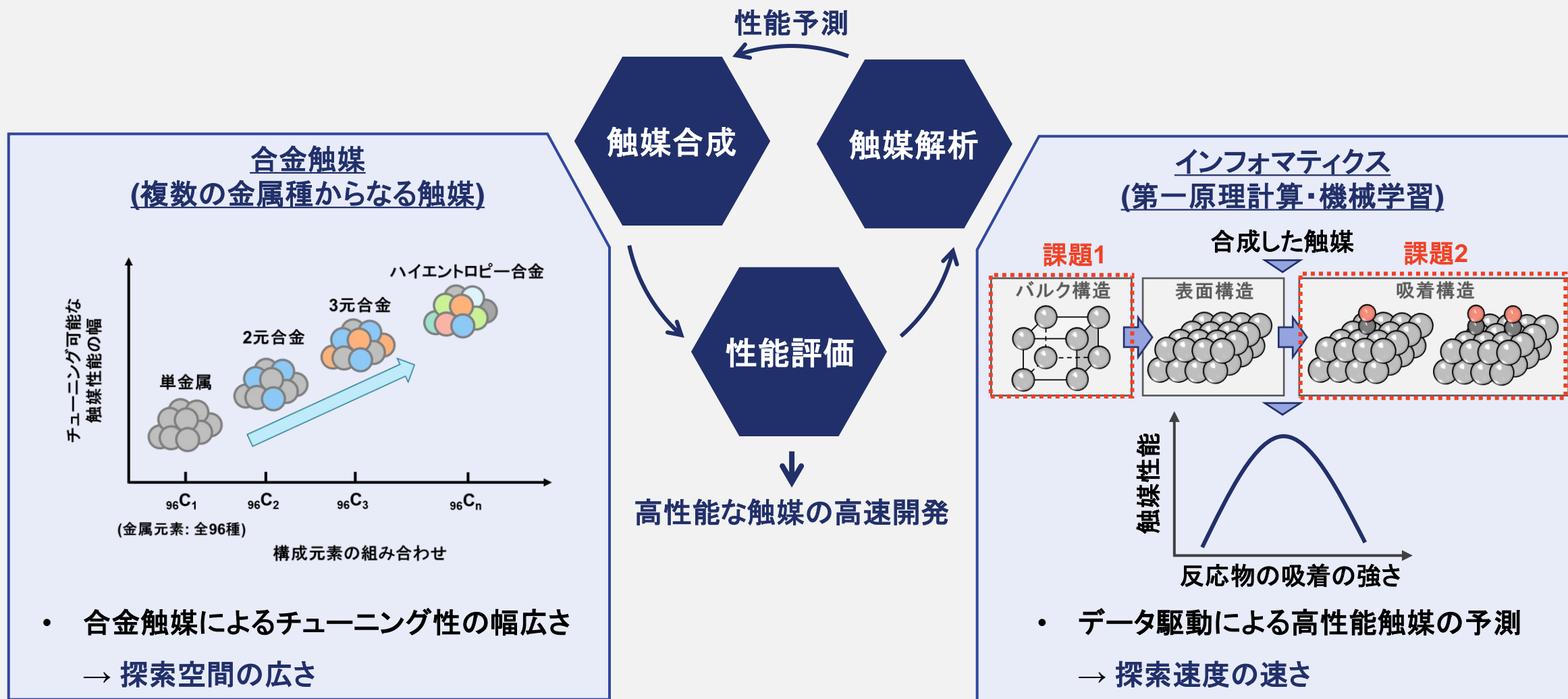
➤ **カーボンニュートラルの実現に向けて、さらに高性能な触媒の開発が重要**

1) 経済産業省, “2050年カーボンニュートラルに伴うグリーン成長戦略”, 2023/11/08閲覧.

# 1. 導入: ハイスループットな触媒開発の流れと課題

## □ ハイスループットな触媒開発

- 高性能な触媒の迅速な開発に向けて、ハイスループットな触媒開発が注目

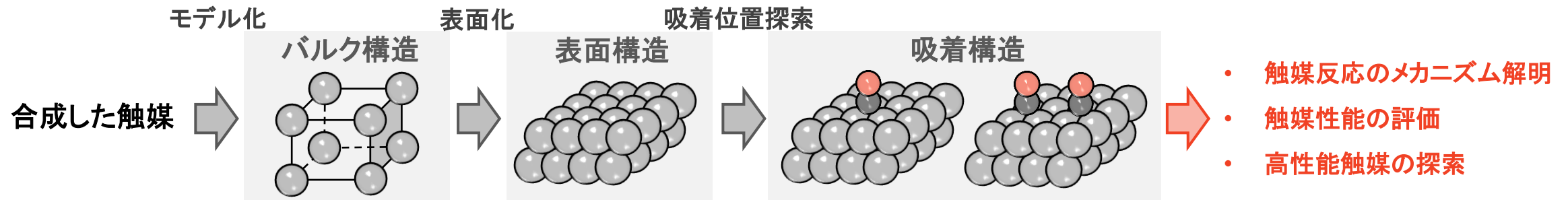


➤ データ駆動による高速な触媒予測に向けて、第一原理計算における課題の解決が重要

# 1. 導入: 高速な触媒開発に向けた量子コンピューティングの適用

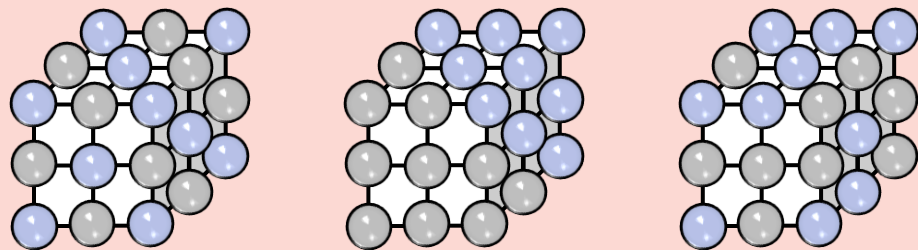
## □ 第一原理計算における課題と量子コンピューティングの適用

- 第一原理計算では、触媒のモデル化と原料や反応中間体などの吸着性能の評価を介して、触媒反応のメカニズム解明や触媒性能の評価、高性能触媒の探索が可能



### 課題1. 触媒のモデル化における課題

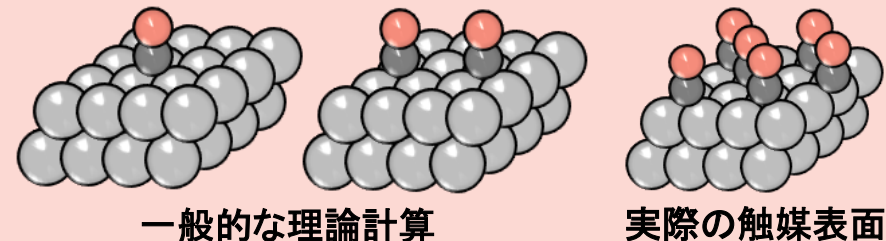
- 合金触媒では**金属配置の組み合わせが多い**  
⇒ **モデル化が困難**



金属配置の組み合わせ最適化に注目

### 課題2. 吸着性能の評価における課題

- 表面構造に対して1, 2分子吸着させた構造を検討  
→ 実際の触媒反応では**より多数の分子が吸着**  
⇒ **多分子の吸着位置の探索が困難**



吸着位置の組み合わせ最適化に注目

➤ 量子アニーリング技術による最適化を適用することで、触媒開発の高効率化を図る



## 1. 導入

- 触媒化学とは
- 触媒開発の流れと課題
- 量子コンピューティング技術の導入

## 2. 触媒開発に向けた量子コンピューティング技術の適用

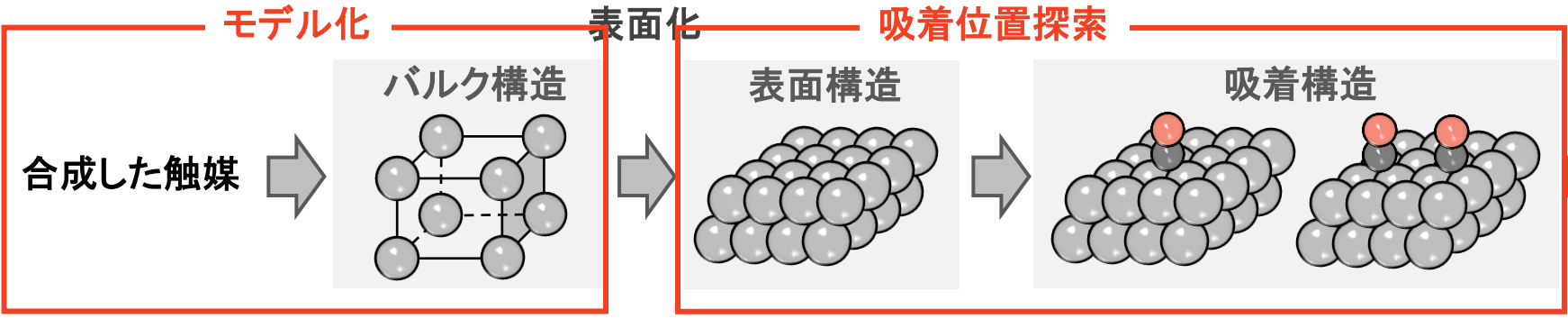
- 1) 合金触媒の構造解析に向けた手法開発
- 2) 触媒表面の吸着構造の理解に向けた手法開発

## 3. まとめと将来展望

# 2. 触媒開発に向けた量子コンピューティングの適用

2) H. Sampei, K. Saegusa et al., JACS Au, 3(4), 991-996 (2023).

## □ 適用事例



- 触媒反応のメカニズム解明
- 触媒性能の評価
- 高性能触媒の探索

### 2-1. 合金触媒の構造解析に向けた手法開発 (2023年度未踏ターゲット事業)

入力値: 合金の金属種

定式化に必要なクラスターモデルの量子化学計算

金属配置問題の定式化 → アニーリングマシン → 物理化学情報の出力

$Pt_5Ru_1Ir_1$   $[[1,1,0,1,1,1,0], [0,0,1,0,0,0,0], [0,0,0,0,0,0,1]]$

$$H = \sum_{i=1}^N w_{ii}x_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N w_{ij}x_i x_j + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j}^N w_{ijk}x_i x_j x_k$$

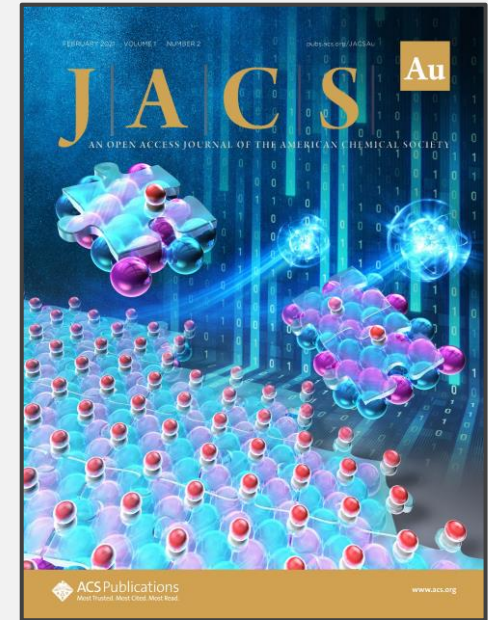
合金構造のバイナリ化とその形成エネルギーの定式化

各合金比率ごとの最安定構造を探索 → 構造ファイルを出力可能

重要な物理化学情報の出力 → 実験結果と相補的に利用可能

➤ 合金の金属種の入力と定式化用の教師データの算出を行うことで、少ない計算コストで各合金比率での構造および物理化学情報を一貫して出力するプログラムを構築

### 2-2. 触媒表面の吸着構造の理解に向けた手法開発 (アメリカ化学会誌に掲載<sup>2)</sup>)



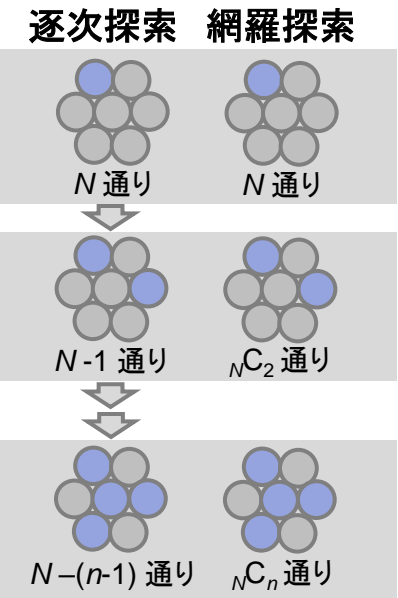
# 2-1. 合金触媒の構造解析に向けた手法開発

## 合金触媒モデリングにおける課題とアプローチ

既存手法

量子アニーリング技術によるアプローチ

例) 原子サイズ:  $N$ 個  
金属比率



- 金属比率の増加
- 対象とする原子サイズの拡大
- 合金化させる金属種の増加 に伴い、

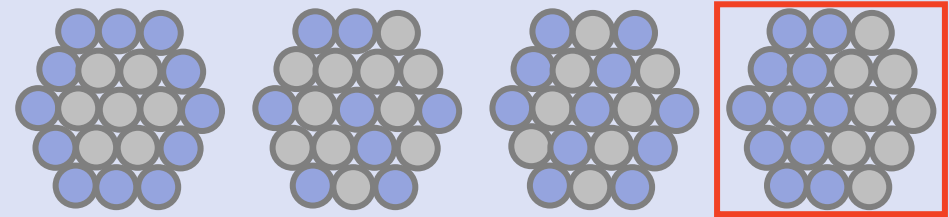
検討すべき**金属配置の組み合わせが爆発**

金属配置の定式化

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N 2W_{ij}x_i x_j + \sum_{i=1}^N W_{ii}x_i + c$$

- 量子化学計算から算出した値からQUBO形式で記述

アニーリングマシンによる最安定な金属配置の探索



- 入力値として、金属比率と原子サイズを設定  
→ 形成エネルギーが最小となる金属配置をアニーリングマシンにより探索

- 金属配置の定式化とアニーリングによる探索により、合金触媒の最安定な金属配置を探索

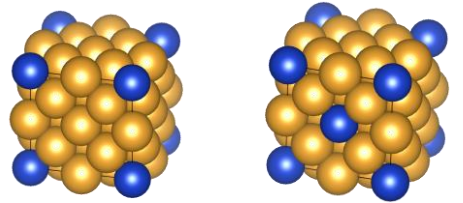
# 2-1. 合金触媒の構造解析に向けた手法開発: 2元合金触媒のモデリング

## □ 2元合金の金属配置の最適化手法の確立

### 対象とする合金構造

**Au-Cu合金 (AuにCuを置換)**



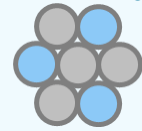
- 1原子置換 -      - 2原子置換 -



### 合金構造のバイナリ化

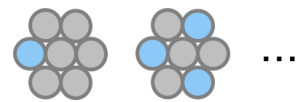
- **ビット $x$**  : 金属配置 (どの位置にどの金属が存在するか)
- **目的関数 $E$**  : 形成エネルギー  
(ある金属配置での触媒構造の安定性、値が小さいほど安定に存在)

例)

















		<b>Au<sub>7</sub></b>		<b>Au<sub>6</sub>Cu<sub>1</sub></b>		<b>Au<sub>4</sub>Cu<sub>3</sub></b>
ビット	: Au=0, Cu=1	[0,0,0,0,0,0,0]	[0,0, <b>1</b> ,0,0,0,0]	[0, <b>1</b> , <b>1</b> ,0,0,0,1]		
目的関数:		$E_1$ [eV]	$E_2$ [eV]	$E_3$ [eV]		

### QUBOの構築

1. 様々な原子数のクラスターの形成エネルギーを算出 (→スーパーコンピュータ「富岳」を利用 (73000ノード時間)、Quantum Espressoでエネルギーを算出)



2. それぞれを1,2原子クラスターに分解し、各1,2原子クラスターの相互作用を回帰 (→Cleasで回帰)


 $H_1 =$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$ 

 $+$

# 2-1. 合金触媒の構造解析に向けた手法開発: 2元合金触媒のモデリング

## □ QUBO行列の次数とクラスターサイズの最適化

### クラスターのサイズ



直径8.4 Åのクラスター  
(1~14原子)

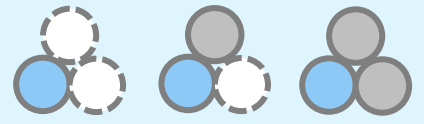
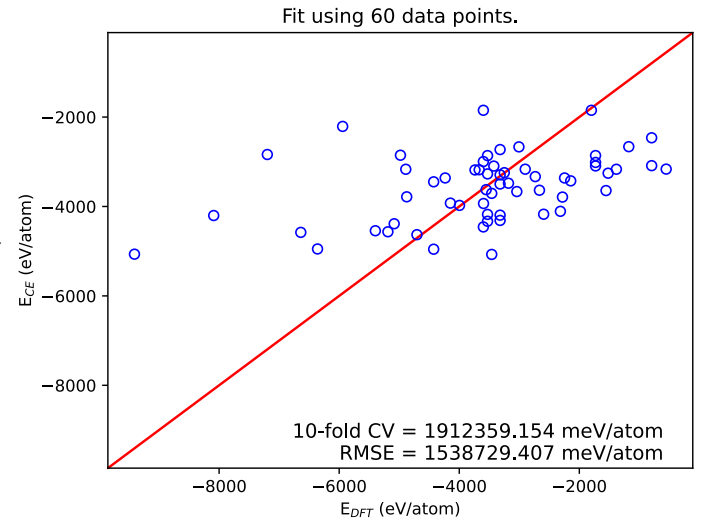
- 正確に定式化できていないことを確認
- **3次項の考慮**により定式化の正確性向上を検討

### 回帰する次数

$$H = \sum_{i=1}^N W_{ii}x_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N W_{ij}x_i x_j + c$$

2次項まで回帰

### <教師データとQUBO行列の関係>

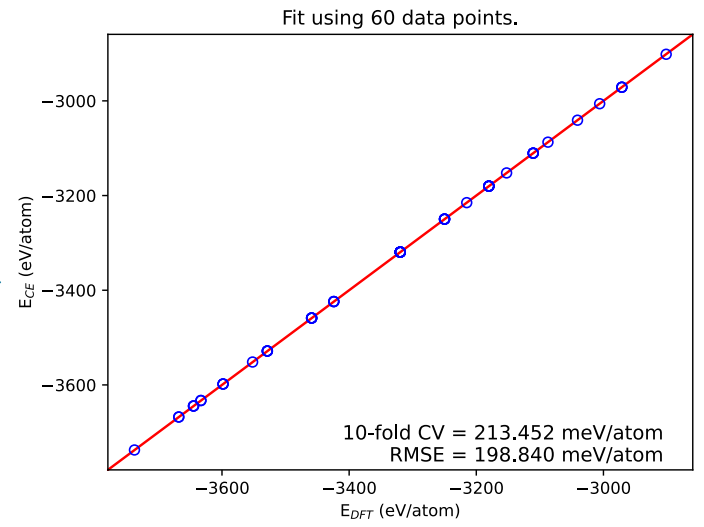


直径8.4 Åのクラスター  
(1~14原子)

- 3次項まで考慮した回帰により、線形関係を観測
- **3次項まで考慮する必要があることを確認**

$$H = \sum_{i=1}^N W_{ii}x_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N W_{ij}x_i x_j + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j}^N W_{ijk}x_i x_j x_k + c$$

3次項以上での回帰



# 2-1. 合金触媒の構造解析に向けた手法開発: 2元合金触媒のモデリング

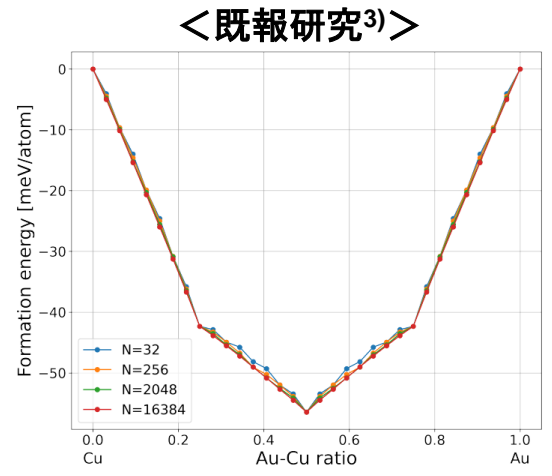
## □ アニーリングによる金属配置の最適化

### アニーリングによる最適化

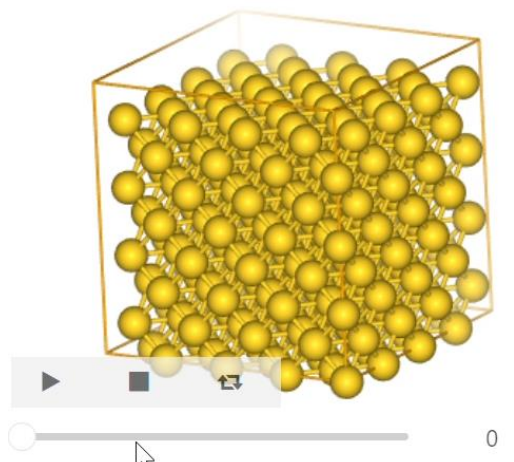
- パッケージ : Fixstars Amplify
- bit数 : 32, 64, 128, 256 (検討する合金サイズと対応)
- アニーリング時間 : 7000 ms
- 制約関数 : 全原子(N個)のうち何原子(M個)をCuに置換させるか?

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i = M$$

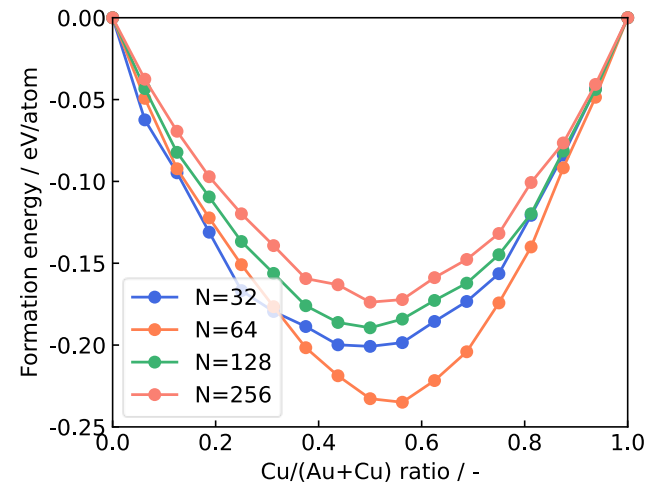
重み係数は0.02~0.1の中から最適化  
→ 0.02で実施



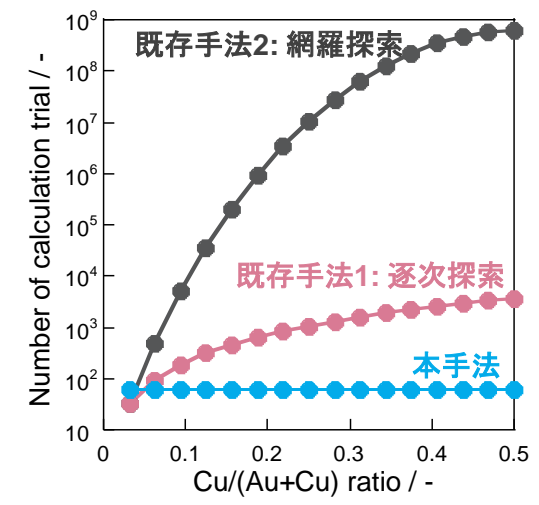
<各置換率での最安定構造 (N=256)>



<各置換率での形成エネルギー>



<探索に要する計算コスト (N=32)>



- 各合金比率での金属配列を探索できる手法を構築
- 既報研究で報告されている形成エネルギーの挙動とも対応(制約条件の係数の精査が必要)
- 既存手法と比較して大幅な計算回数の削減 & 計算回数合金サイズNと置換率に依存しない探索手法を確立

3) K. Ichikawa et al., arXiv:2305.19625v1

# 2-1. 合金触媒の構造解析に向けた手法開発: 多元合金触媒のモデリング

## □ 3種以上の多元合金への応用

4) A. Tamura et al., *J. Comput. Chem. Jpn.*, **21(4)** (2022) 129–133.  
 5) D. Wu et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **144** (2022) 3365–3369.

### 対象とする金属種

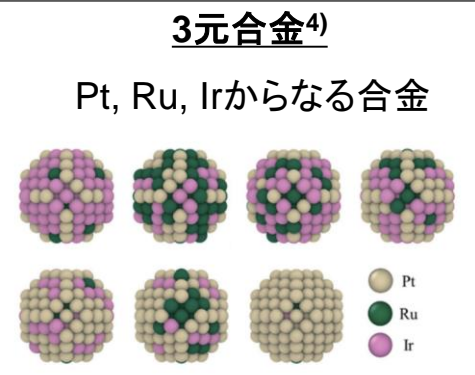


Figure 1. Structures of the PtRuIr 201-atom nanoparticles with stable configuration at 1,000 K obtained by the multi-canonical Monte Carlo simulation.

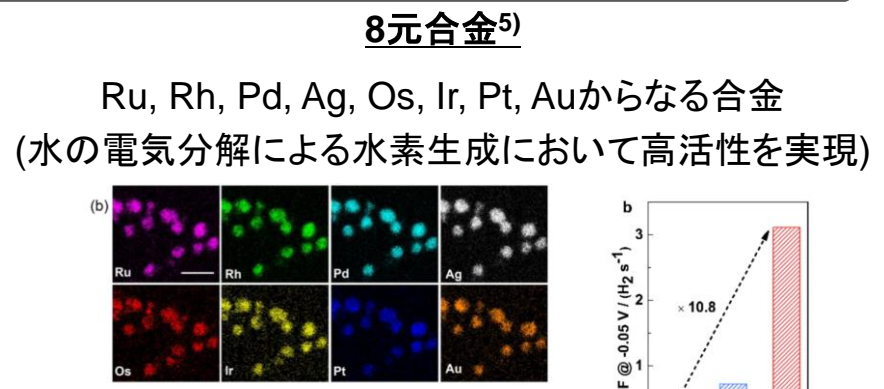
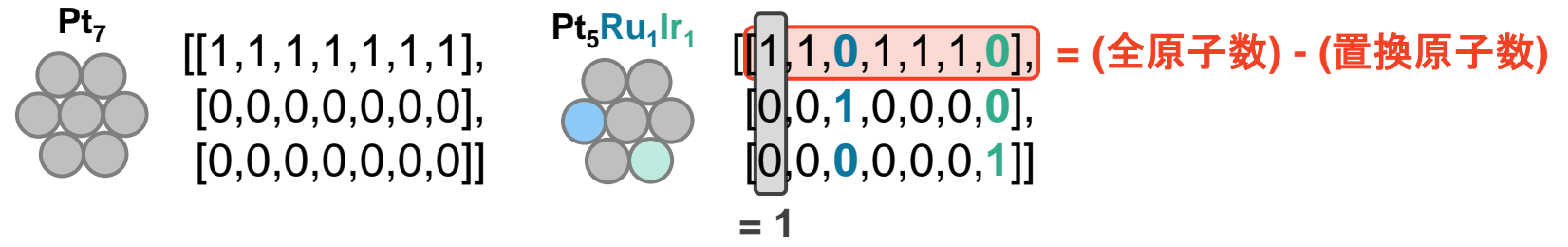


Figure 1. (a) Synchrotron XRD of NM-HEA NPs and Rietveld refinement result. The radiation wavelength is 0.63003(7) Å. The black circles and red, blue, and gray lines are experimental data, fitting data, background line, and residual data, respectively. (b) EDX maps using the L-line characteristic X-ray from each element. The scale bar is 10 nm.

### 2元合金の最適化方法からの変更点 (バイナリ化手法の変更)



- 検討する合金の金属種の数だけbitを設定  
 → バイナリ行列の縦方向にワンホット制約、横方向に元素置換に関する制約を設定
- QUBO構築手法は2元合金と同様に、3原子クラスターの教師データから3次項を含むQUBOを構築  
 ⇒ これらの検討により、2元合金での最適化手法の多元合金への拡張を実施

# 2-1. 合金触媒の構造解析に向けた手法開発: 多元合金触媒のモデリング

## □ 多元合金の金属配置最適化のアニーリング結果

N個の原子サイズからなる合金の  
配置探索に要する計算数

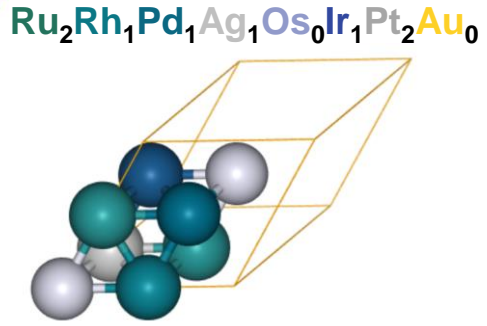
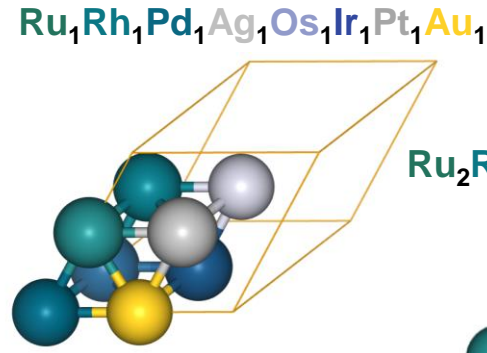
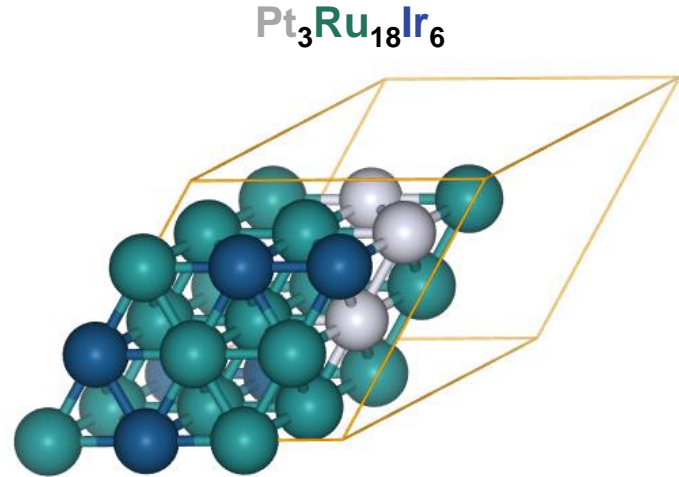
3元合金触媒のモデリング

8元合金触媒のモデリング

既存手法	$3^N$ 回	$8^N$ 回
------	---------	---------

本手法	数100回	数100回
-----	-------	-------

最適化された金属配置



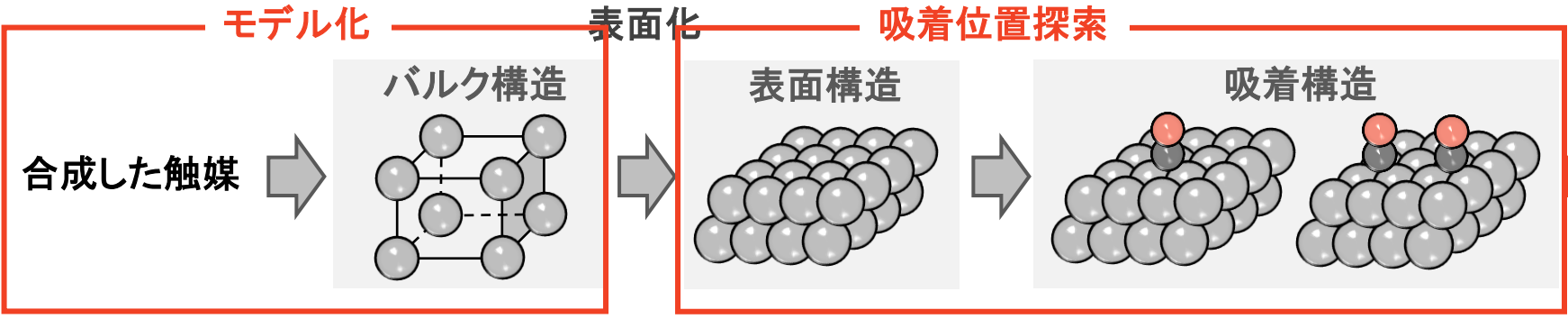
- 原子数Nや置換率に依存せず、数百回の計算+アニーリングマシンによる求解だけで探索でき、大幅な計算コスト削減を達成
- **より大きな原子サイズでの検討**(十分なbit数とQUBO再検討が必要)とその正確性評価は今後の課題

➤ 多元合金触媒の金属配置に関しても高速に探索可能な手法を確立



# 2. 触媒開発に向けた量子コンピューティングの適用

## □ 適用事例



- 触媒反応のメカニズム解明
- 触媒性能の評価
- 高性能触媒の探索

### 2-1. 合金触媒の構造解析に向けた手法開発 (2023年度未踏ターゲット事業)

入力値: 合金の金属種

定式化に必要なクラスターモデルの量子化学計算

金属配置問題の定式化 → アニーリングマシン → 物理化学情報の出力

$Pt_5Ru_1Ir_1$   $[[1,1,0,1,1,1,0], [0,0,1,0,0,0,0], [0,0,0,0,0,0,1]]$

$$H = \sum_{i=1}^N w_{ii}x_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N w_{ij}x_i x_j + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j}^N w_{ijk}x_i x_j x_k$$

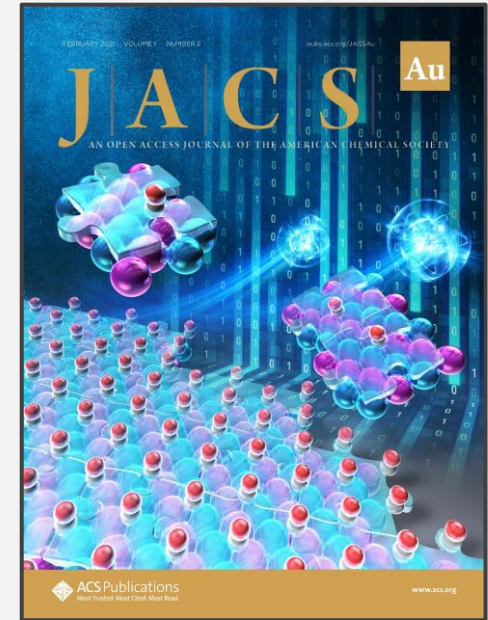
合金構造のバイナリ化とその形成エネルギーの定式化

各合金比率ごとの最安定構造を探索 → 構造ファイルを出力可能

重要な物理化学情報の出力 → 実験結果と相補的に利用可能

➤ 合金の金属種の入力と定式化用の教師データの算出を行うことで、少ない計算コストで各合金比率での構造および物理化学情報を一貫して出力するプログラムを構築

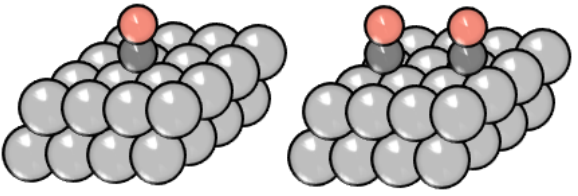
### 2-2. 触媒表面の吸着構造の理解に向けた手法開発 (アメリカ化学会誌に掲載<sup>2)</sup>)



# 2-2. 触媒表面の吸着構造の理解に向けた手法開発

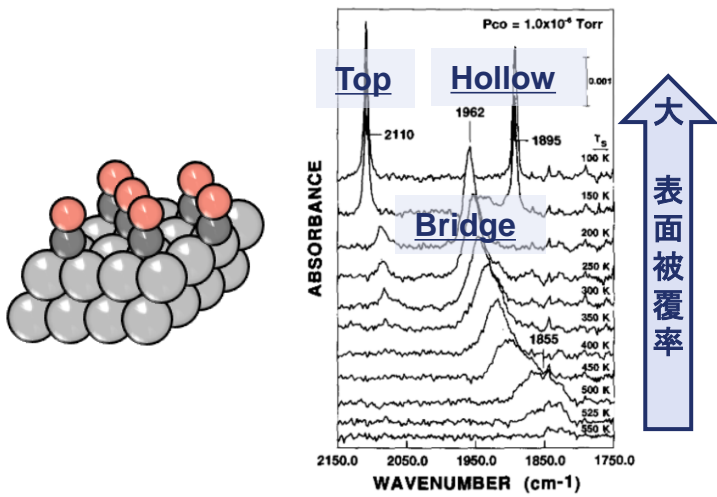
## □ 吸着構造の理解における課題とアプローチ

### 一般的なアプローチ



- 1分子 or 2分子吸着を検討

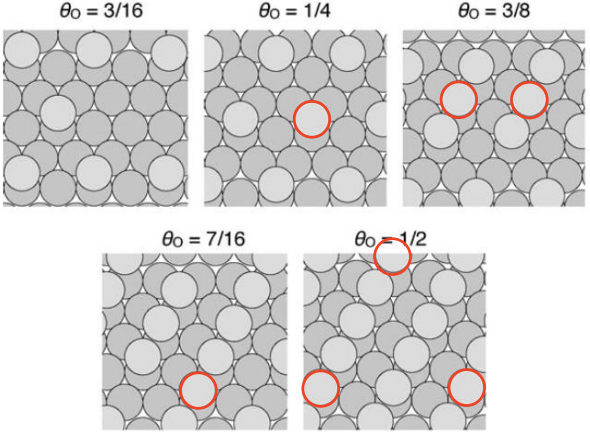
### 実際の触媒表面



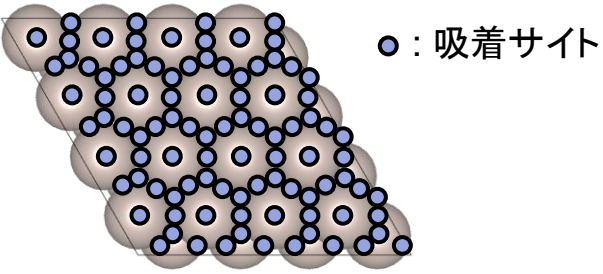
- より多くの分子が吸着
- 被覆率変化に伴い吸着位置も変化<sup>6)</sup>

### 既存手法

#### 逐次的探索<sup>7)</sup>



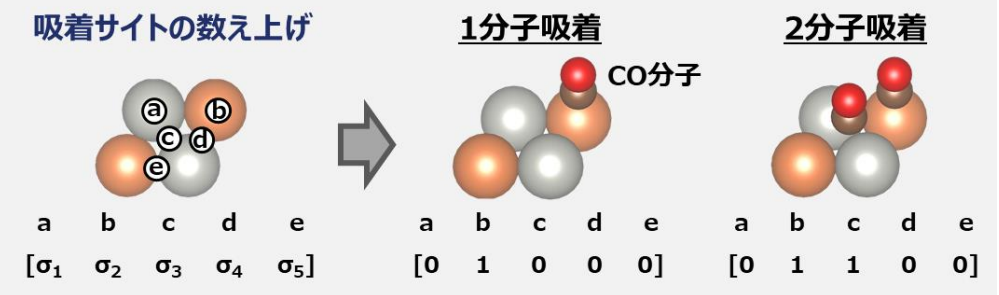
#### 網羅的探索



- 複数分子の吸着位置探索では精度と計算コストの両立が困難

### 量子アニーリング技術によるアプローチ

#### 吸着サイトの数え上げ・バイナリ化



#### 吸着挙動のQUBO化

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N 2W_{ij}\sigma_i\sigma_j + \sum_{i=1}^N W_{ii}\sigma_i + c$$

- 第1項( $W_{ii}$ ) = (1分子吸着エネルギー)  
⇒ 吸着位置自身の吸着性能
  - 第2項( $W_{ij}$ ) = {(2分子吸着エネルギー) -  $W_{ii}$  -  $W_{jj}$ }/2  
⇒ 2分子間の相互作用の影響
- ※吸着エンタルピーは古典スパコンで算出

- アニーリングにより各被覆率での吸着位置を探索 17

6) W.K. Kuhn et al., Surf. Sci. Lett., 274 (1992) 611-618.  
7) R. B. Getman and W. F. Schneider, ChemCatChem, 2 (2010) 1450-1460.

# 2-2. 触媒表面の吸着構造の理解に向けた手法開発

## □ アニール実行前の準備

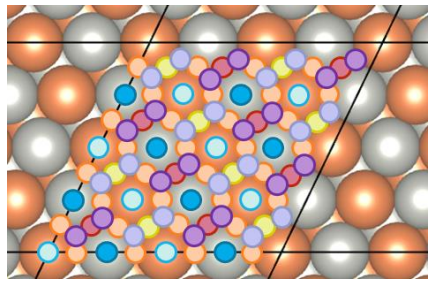
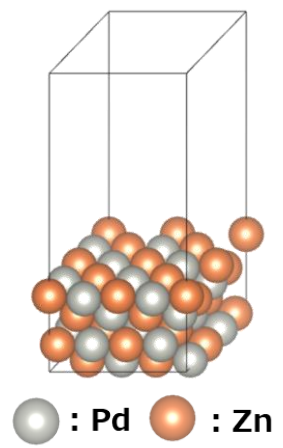
### 吸着サイトの数え上げ

- Pythonライブラリ: CatKit (一部拡張)

### CO 1分子/2分子吸着エネルギーの算出

- パッケージ : Matlantis
- 汎関数 : GGA-PBE
- Cut-off energy : 400 eV
- k-points : 11 × 11 × 11 (bulk)  
5 × 5 × 1 (slab)

### 検討した吸着モデル (PdZn上のCO多分子吸着)



- Pd (on-top) : 8 sites
- Zn (on-top) : 8 sites
- Pd-Pd (bridge) : 8 sites
- Pd-Zn (bridge) : 32 sites
- Zn-Zn (bridge) : 8 sites
- Pd-Pd-Zn (hollow) : 16 sites
- Pd-Zn-Zn (hollow) : 16 sites

## □ アニール実行条件

### アニール実行条件

- パッケージ : デジタルアニーラ DA3
- アニール時間 : 30 sec
- 1回の探索数 : 25
- 大域探索レベル : 5

### 制約条件

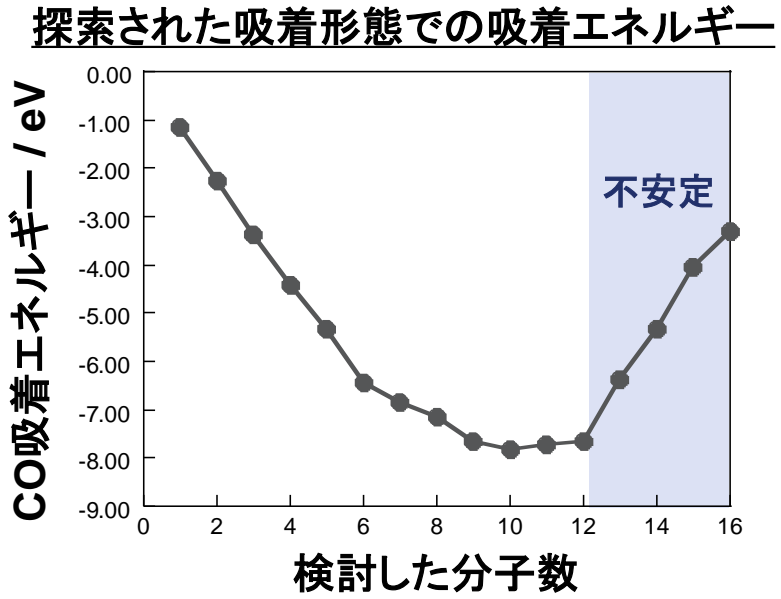
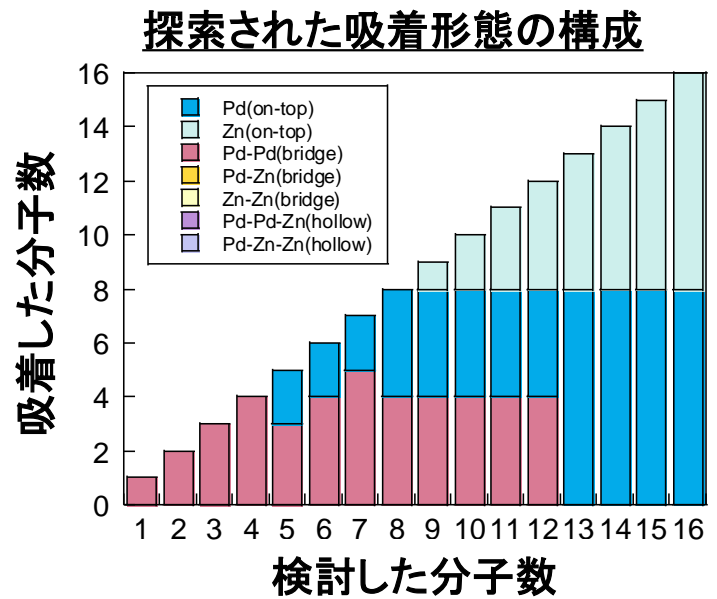
分子数の制御: 不等式制約により制約  
(初期の重み係数=1)

$$\left( \sum_{i=0}^{95} \sigma_i \right) - a \leq 0 \quad \dots \quad a \text{ 分子以下吸着}$$

→ 吸着するよりも脱離した方が安定  
といった現象を考慮可能

# 2-2. 触媒表面の吸着構造の理解に向けた手法開発

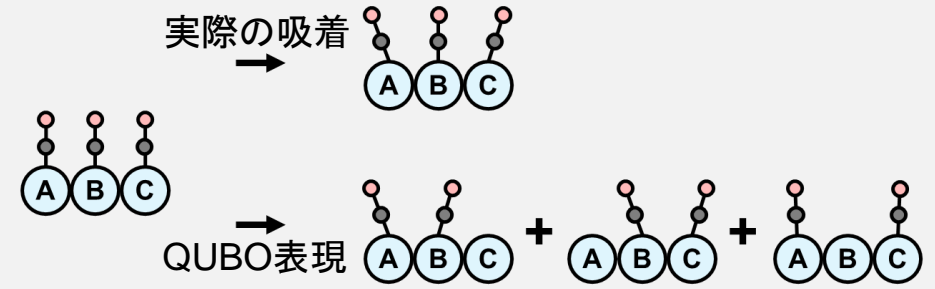
## □ アニーリングによる吸着位置探索結果



- 高被覆率になるにつれて、1分子吸着では見られない吸着形態が観測  
→ しかし、この結果は不安定な吸着形態であり、不正確な探索

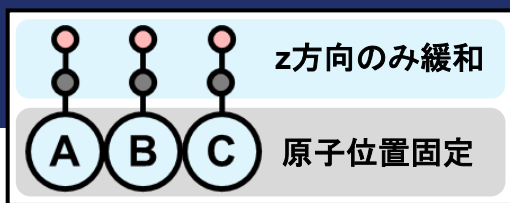
### 不正確な探索となった要因

- 最適な吸着位置探索のQUBO形式への不正確な落とし込み  
→ 吸着CO分子間の反発の影響を記述できていないと考察  
(互いの打ち消し合いがあり、線形和での記述ではエネルギーの安定化を過大評価)



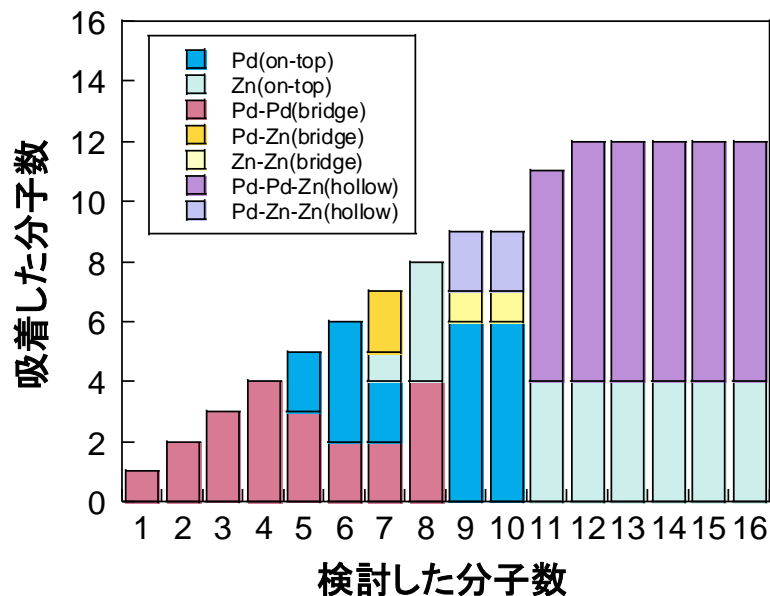
➤ 吸着CO分子間の反発を無視することで、本手法の確立を図る

# 2-2. 触媒表面の吸着構造の理解に向けた手法開発

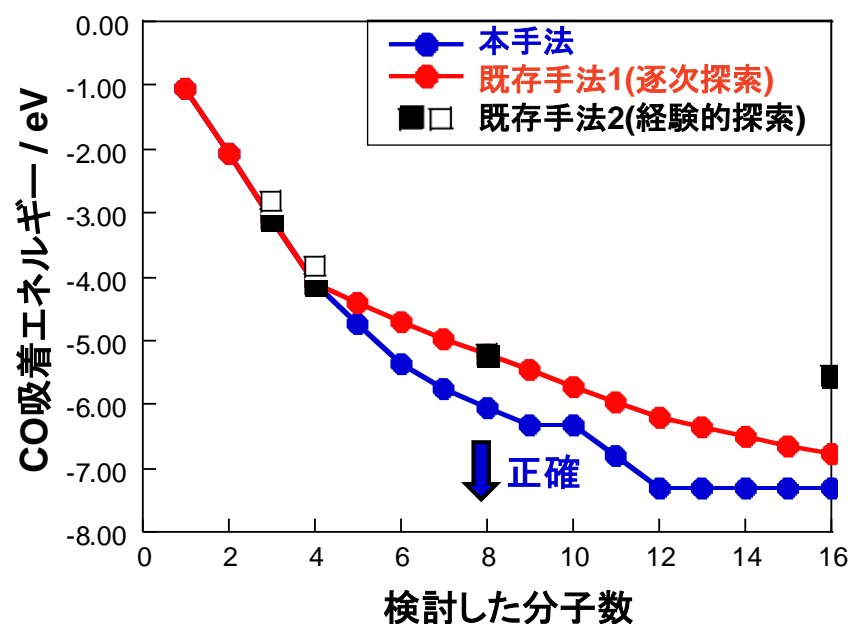


## □ 分子間反発を無視した際の吸着位置探索結果

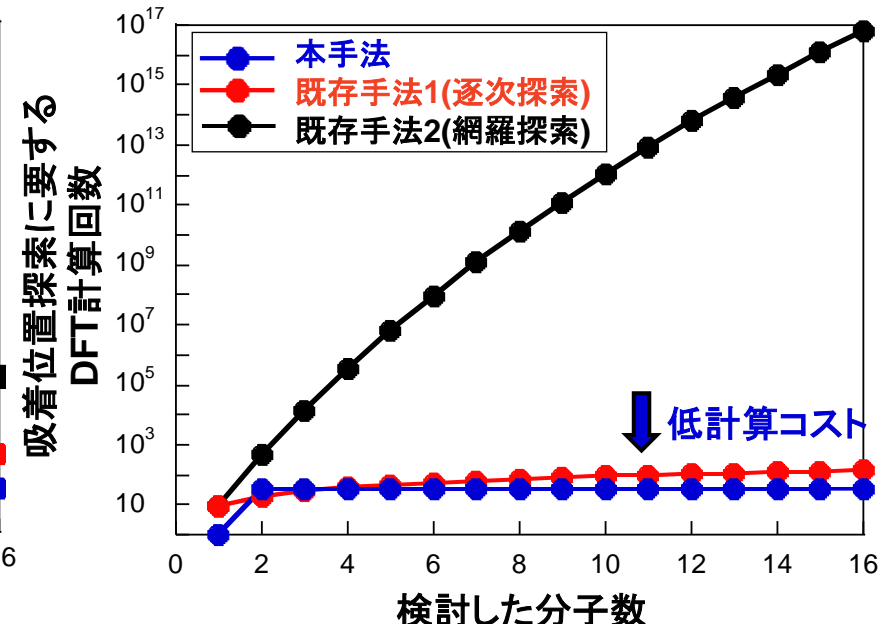
探索された吸着形態の構成



最安定な吸着位置の探索における正確性



最安定な吸着位置の探索に要する計算回数



- 容易には予測できない吸着形態を探索
- 一部のCO分子が脱離する現象も再現可能

逐次探索や帰納的な予測よりも正確に  
複数分子吸着時の安定な配置を予測

網羅探索や逐次探索よりも少ない計算回数で  
複数分子吸着時の安定な配置を予測

• 1、2分子吸着エンタルピーの結果のみから複数分子吸着の吸着挙動を記述可能  
⇒ 量子アニーリング技術を適用することで、被覆率の影響を正確かつ低計算コストで探索可能

## 1. 導入

- 触媒化学とは
- 触媒開発の流れと課題
- 量子コンピューティング技術の導入

## 2. 触媒開発に向けた量子コンピューティング技術の適用

- 1) 合金触媒の構造解析に向けた手法開発
- 2) 触媒表面の吸着構造の理解に向けた手法開発

## 3. まとめと将来展望

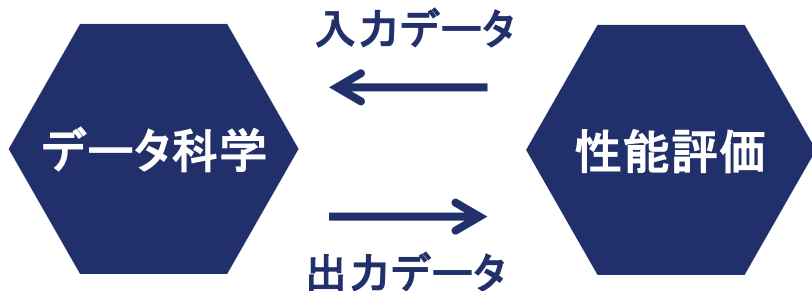
# 3. まとめと将来展望: いま注目していること

8) G. T. K. K. Gunasooriya and M. Saeys, *ACS Catal.*, **8**, 10225 (2018).

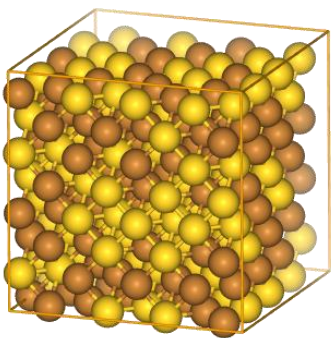
## □ 高性能な触媒の開発に向けたデータ科学に必要なこと

### データ科学と実験結果の架け橋

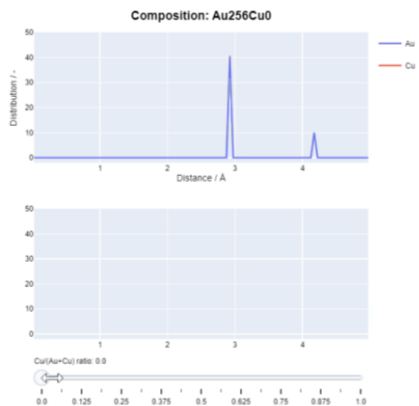
金属種      金属比率



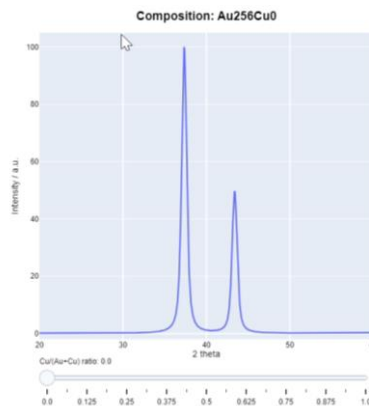
触媒モデル



動径分布関数



X線回折パターン

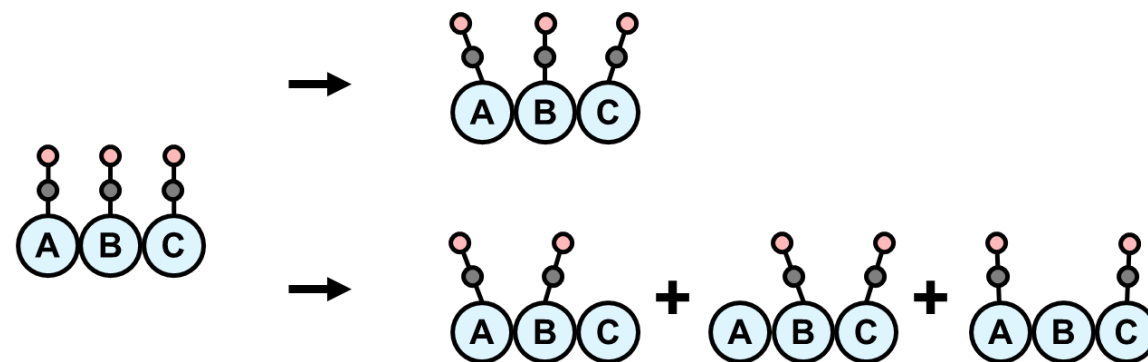


触媒研究者が気軽に利用でき、

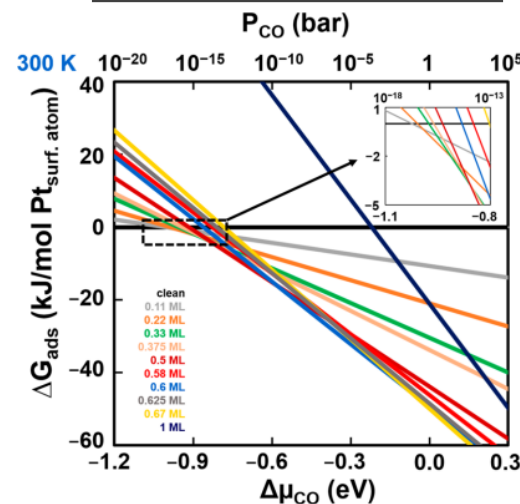
理論研究や実験研究に直接繋がる結果を出力可能なツールの作成

### 実際に生じている現象の再現

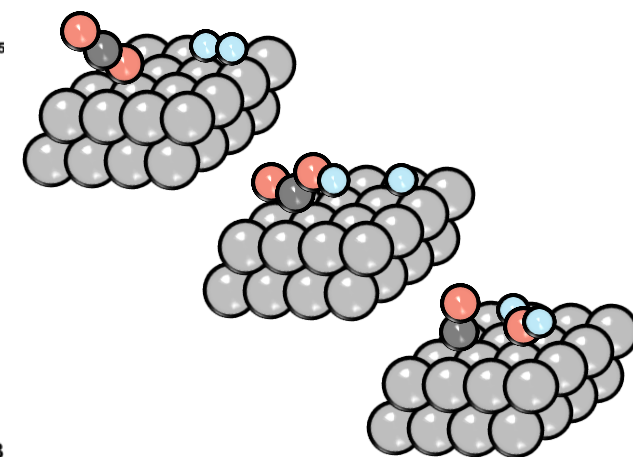
分子間反発の考慮



温度や圧力の依存性<sup>8)</sup>



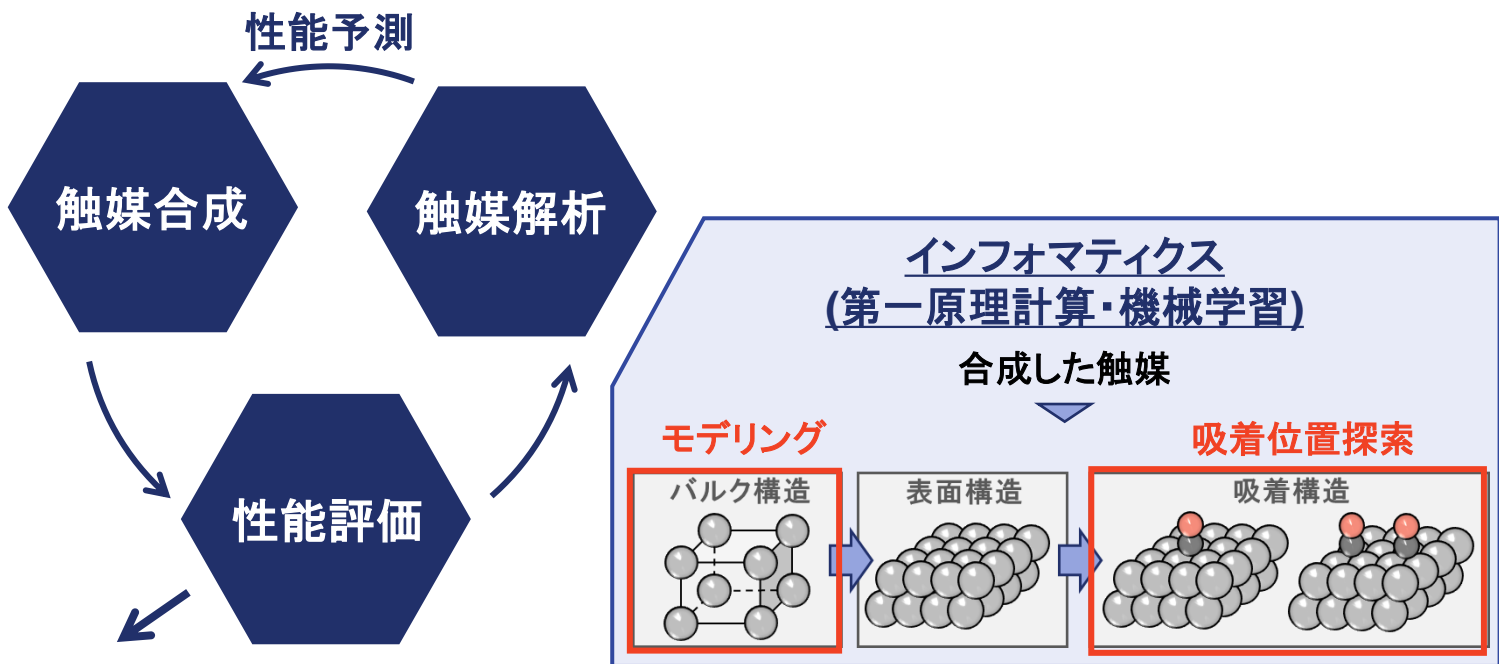
触媒反応の反応機構解析



# 3. まとめと将来展望

## □ まとめと将来展望

2050年カーボンニュートラルの実現に向けた  
ハイスループットな触媒開発



古典・量子ハイブリッド化による表面状態解析を利用した触媒インフォマティクスと  
ハイスループットな触媒性能評価および触媒解析による  
それぞれの化学反応に適した触媒の開発

⇒ 持続可能な社会の実現

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N 2W_{ij}\sigma_i\sigma_j + \sum_{i=1}^N W_{ii}\sigma_i + c$$