

企業人材ニーズvs博士人材シーズ マッチングワークショップ2021

東京大学 工学系研究科 化学システム工学専攻
中山研究室 博士課程2年
ようかいちや ともこ
八日市屋 朋子

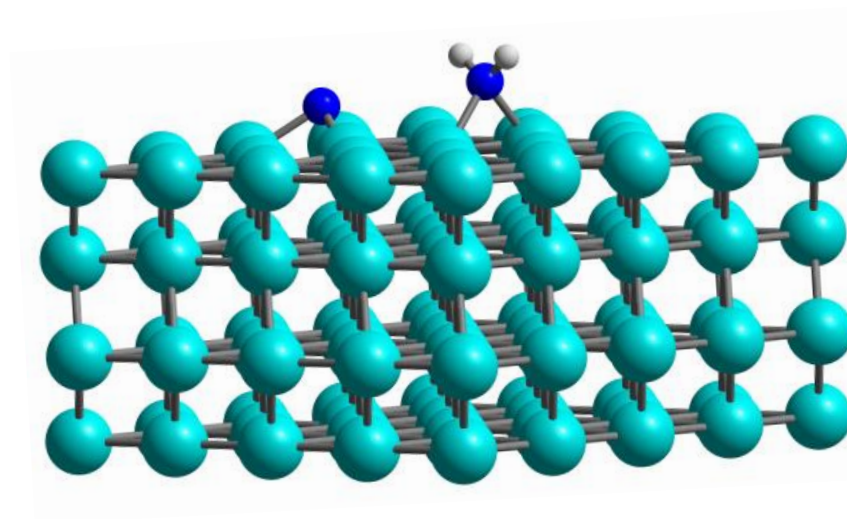
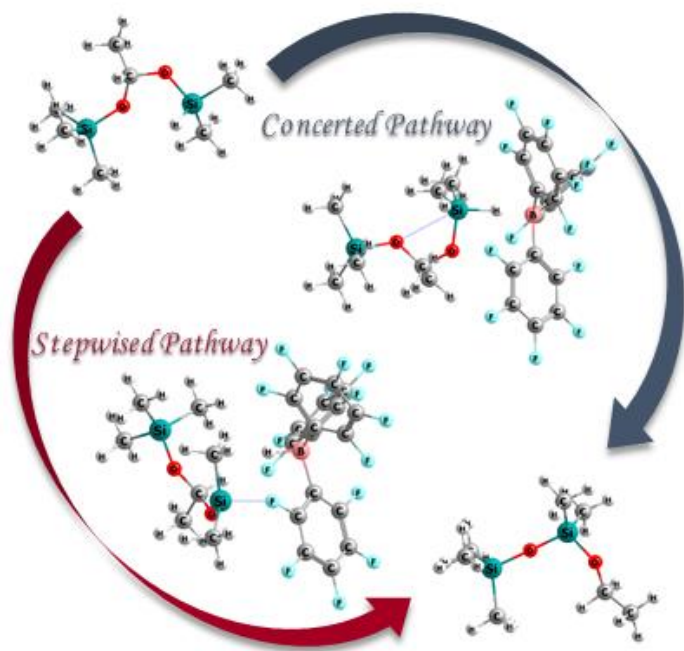
専門分野

理論化学・計算化学

◆第一原理計算に基づく反応機構解析

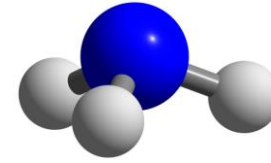
- B4～M2 (お茶の水女子大学理学系研究科)
均一系触媒反応

- D1～現在
不均一系触媒反応



研究テーマ：アンモニア合成反応

□ 水素キャリアとしてのアンモニア



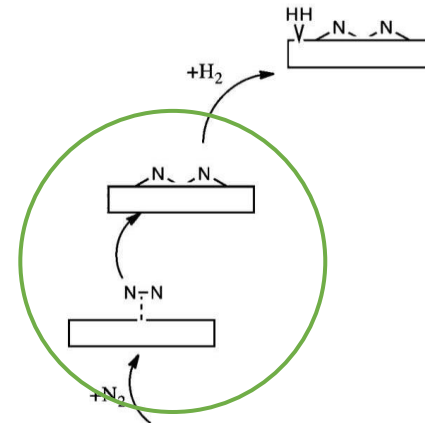
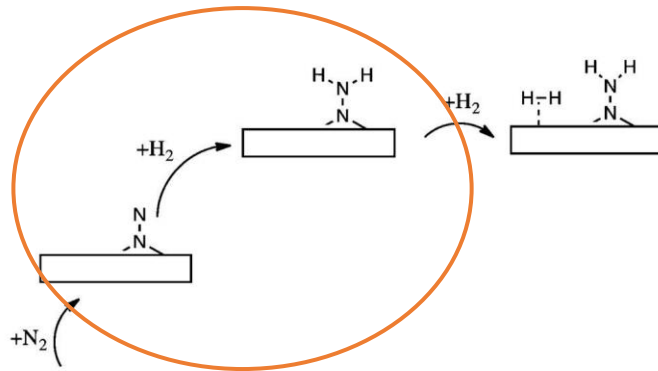
□ アンモニア合成

ハーバー・ボッシュ法：約450°C, 200気圧 Fe系不均一系触媒

➤ 低温・低圧 & オンサイト・オンデマンド

□ 反応機構

Associative mechanism (会合機構) or Dissociative mechanism (解離機構)

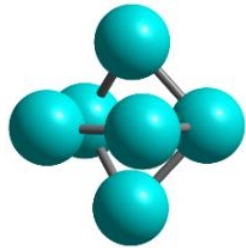


Mo触媒によるアンモニア合成反応の検討・反応機構の解明

反応経路探索

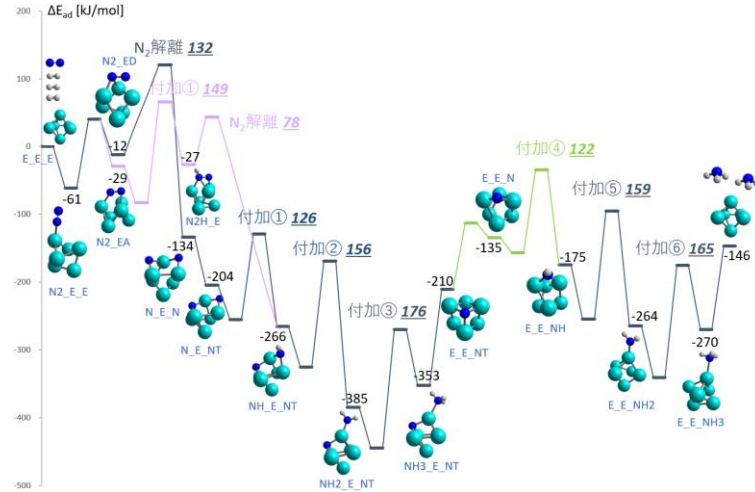
□ 密度汎関数理論 (DFT) による電子状態計算

■ クラスタモデル



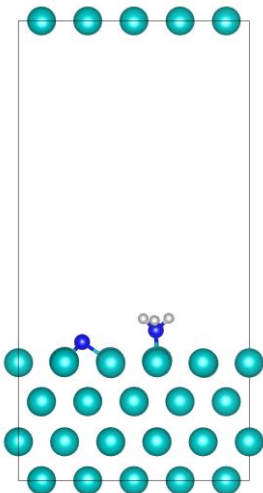
Mo₆ クラスタ

エネルギープロファイル



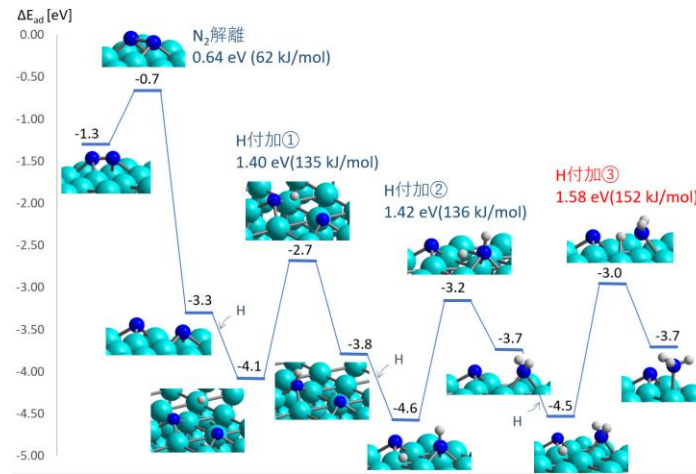
活性化エネルギーより
Dissociative Pathway
が有利

■ 金属表面モデル

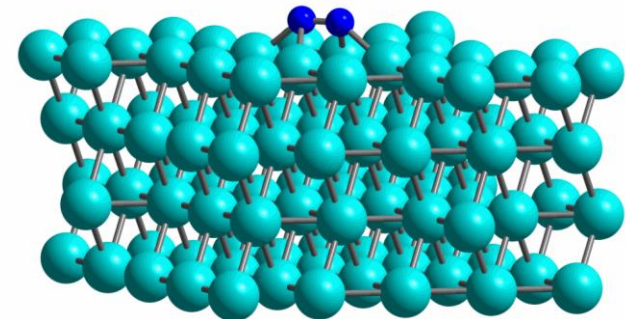


Mo(110) スラブモデル

エネルギープロファイル



N₂結合解離の反応イメージ
(NEB計算)



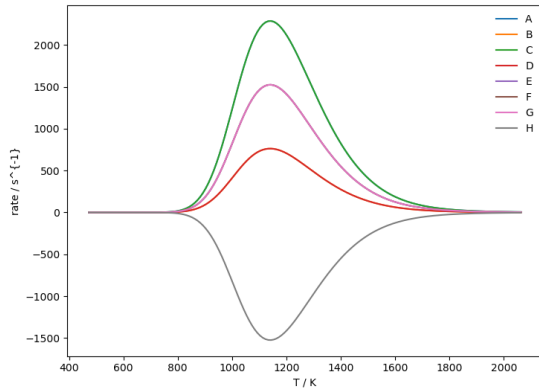
反応速度論による解析

□ Microkinetic Analysis

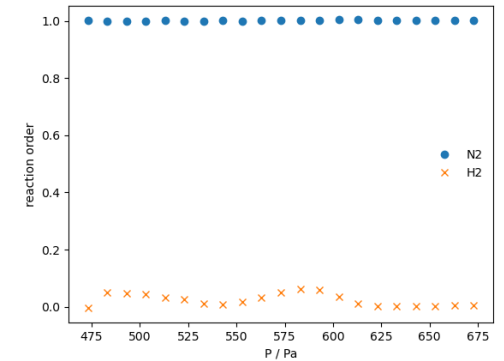
- DFT計算の結果から実験量を求める
- Pythonスクリプトを利用

```
56 def calc_kdes_nh3(T, A, m, sigma, theta_rot, E_des):
57     """
58     Reaction rate constant for desorption
59
60     T         - Temperature in K
61     A         - Surface area in m^2
62     m         - Mass of reactant in kg
63     sigma     - Symmetry number
64     theta_rot - Rotational temperature in K
65     E_des     - Desorption energy in J/mol
66     """
67     return kb*T**(7/2)/h**3*A*(2*np.pi*m*kb)/(sigma*theta_rot)*np.exp(-E_des/(R*T))
68
69 class Species(enum.IntEnum):
70     E_E_E = 0
71     N2_E_E = enum.auto()
72     N2_EA = enum.auto()
73     N2_ED = enum.auto()
74     E     = enum.auto()
75     H     = enum.auto()
```

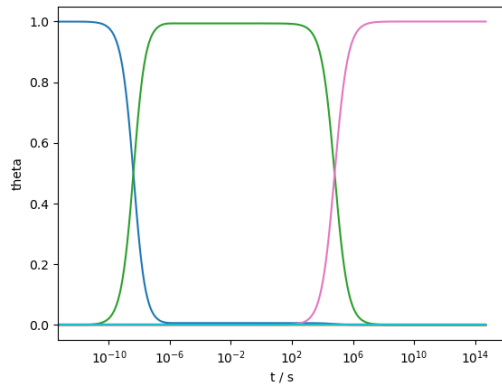
■ 反応速度



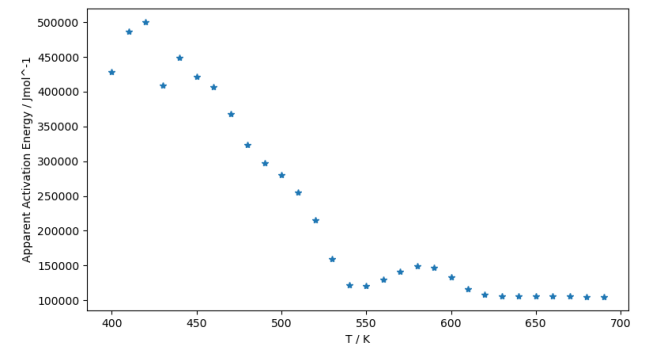
■ 反応次数



■ 表面被覆率



■ 見かけの活性化エネルギー



保有しているスキル

□ 計算プログラム

1. Gaussian (量子化学計算プログラム)
2. VASP (第一原理電子状態計算プログラム)
3. Gamess (量子化学計算プログラム)
4. GRRM (反応経路自動探索プログラム)
5. ASE (Pythonモジュール群)

□ 計算対象

1. 分子
2. 表面
3. バルク
4. 大規模系 (タンパク質など) (FMO法)

□ プログラミング言語

- Python

◆ その他経験

- 国立研究開発法人産業技術総合研究所 テクニカルスタッフ (2020年11月～2021年3月)
(機能材料コンピュータシミュレーションデザイン研究センター 量子化学・分子シミュレーションチーム)
- 留学 Wuppertal University (ドイツ) (2018年10月～2019年2月 (4ヶ月間))

インターンシップへの抱負

□ 今回のプログラムへの応募動機

自分の専門を企業で
どのように活かせるか
知りたい

企業の研究職の
雰囲気を知りたい

□ 挑戦したいこと：新しいこと

新しい計算手法

新しい計算対象