

触媒開発に向けた理論開拓

電極触媒の効率化に向けて、**Sabatier 則**は重要な設計指針である。吸着エネルギーと活性の関係を示したヴォルケーノ・プロットや、量子化学計算・機械学習による **in silico** 触媒開発など、実に多方面で活用されている。一方で、触媒反応の熱力学的側面に焦点を宛てた法則であるため、**Sabatier 則**だけでは、速度論的な効果から生まれる触媒特性を予測することは困難である。本稿では、このような従来の触媒理論の課題に触れたのち、数理・実験・機械学習の融合による筆者の取り組みについて概説する。・・・