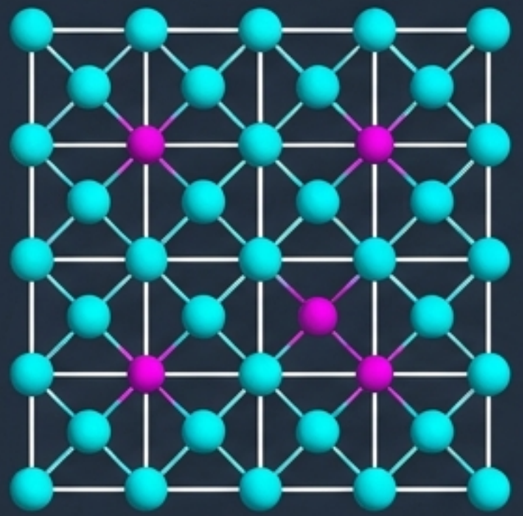
Mn-Ce 나노결정 조성별 형성 메커니즘: 조성비가 결정 구조를 지배한다

Low Mn (x ≤ 0.25)



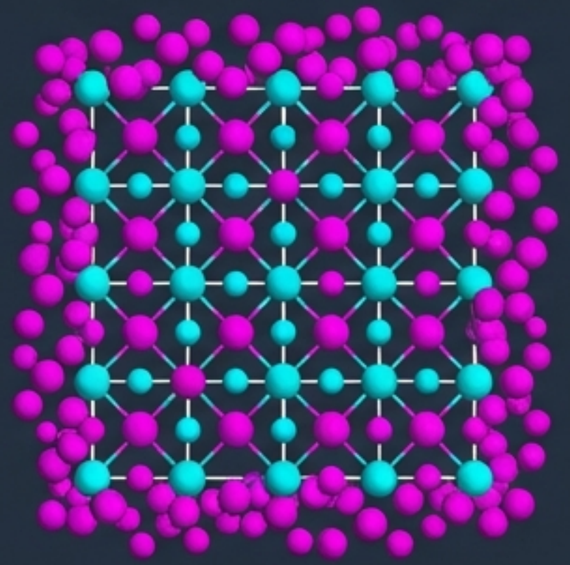
단일상 (Solid Solution)

불화물(Fluorite) 격자 형성. Mn 치환으로 인한 격자 변형 및 산소 결함 극대화.



결정 크기 20-30nm 유지. 산소 수송 능력 우수.

Equimolar (Ce:Mn = 1:1)



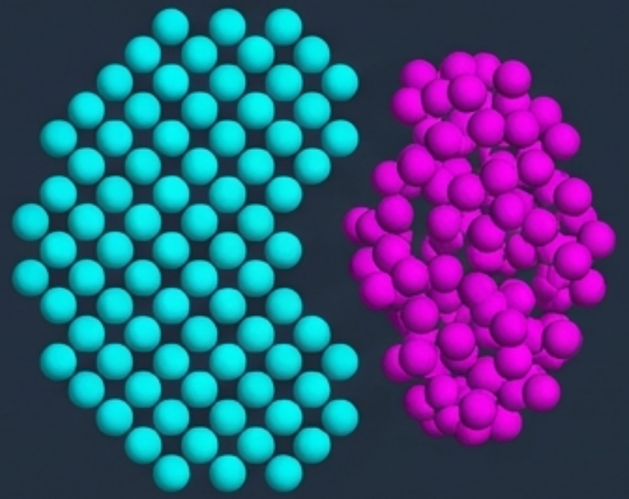
이중 구조 (Dual-State)

Mn 용해도 한계 도달. 표면 비정질 MnO_x 층과 CeO_2의 상호작용으로 격자 결함 최대화.



초미세 크기 (2-4nm) 달성. 비표면적 및 저온 활성도 최상.

High Mn (x > 0.5)



상분리 (Phase Separation)

과잉 Mn이 표면에 덩어리 형태로 응집. 촉매의 활성 부위가 물리적으로 차단됨.



평균 입자 크기 17nm 이상으로 급증. 촉매 활성도 급감.

Gemini Notebook

NanoLatticAI 아키텍처: 습식 화학(Wet-lab) 직관의 디지털 데이터화

입력 변수 그룹 (Input Parameters)

열역학 제어 (Thermodynamic)

Temp_Target (550.0°C)	550.0
Temp_Final	300.0
Pressure_atm	0.05

물리화학적 조건 (Physicochemical)

Mn_Fraction (핵심 변수)	0.3
O_Metal_Ratio	1.8
pH_Charge_Scale	8.5

유체/혼합 역학 (Fluid & Mixing)

Sonic_Amp	200.0
Shear_Rate	1.5
Injection_Drip_Rate	3000

블랙박스 엔진 (The Digital Crucible)



딥러닝 기반 다차원 상호작용 분석

Y-Target 출력 지표 (Output Indicators)

형상 (Morphology)

Y2_Size_Rg	18.7247
Y3_Num_Clusters	6342.4912
Y4_Compactness	-800.9659

구조화 (Architecture)

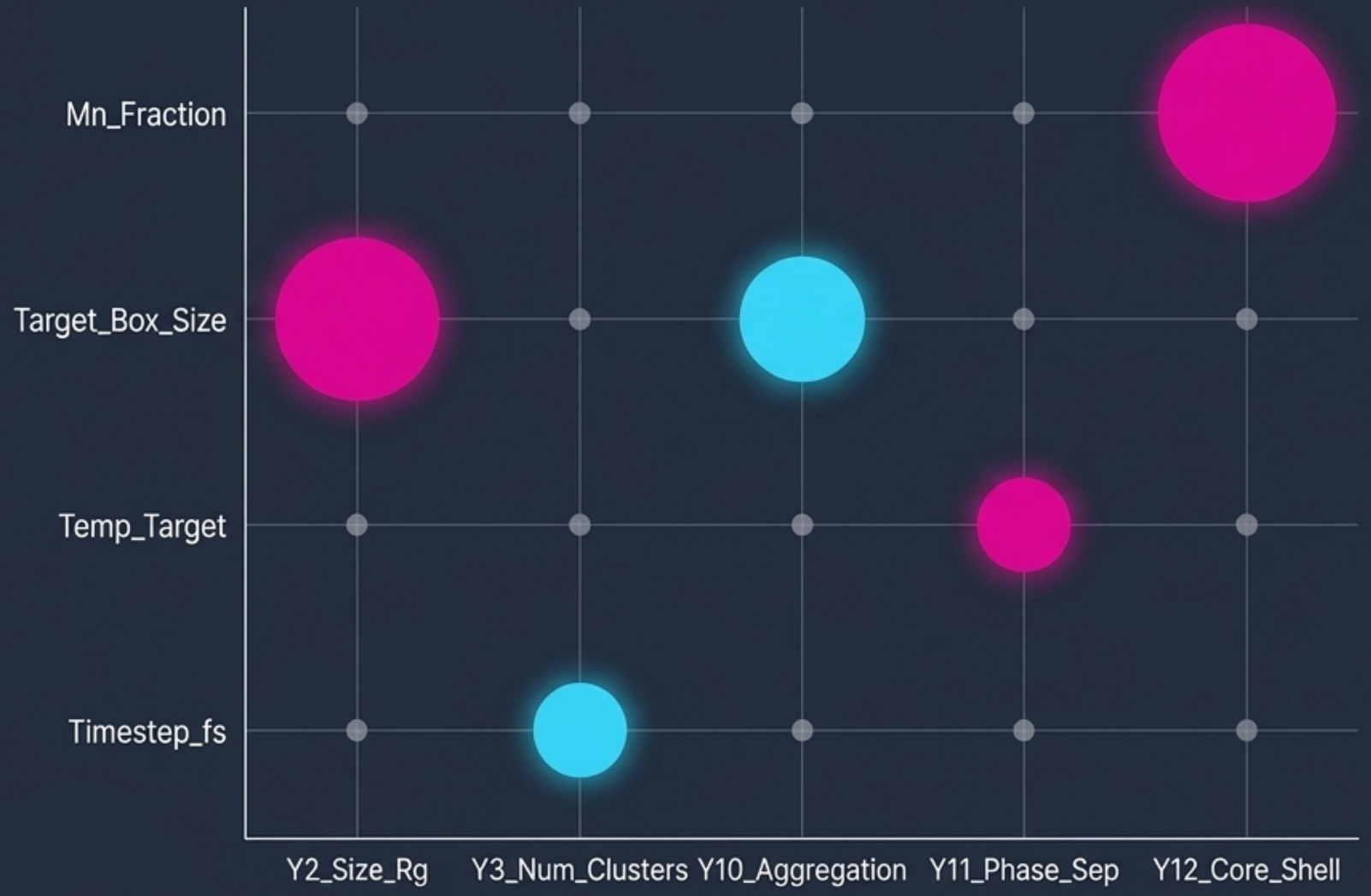
Y10_Aggregation_Ratio	24.5783
Y11_Phase_Sep_Dist	7.8154
Y12_Core_Shell_Ratio	-3.3212

에너지/결함 (Energy & Defect)

Y1_Energy	-234.4672
Y6_Internal_Stress	9603473.1906
Y8_Worst_Defect	-0.1838

Gemini Notebook

AI의 통찰: SHAP 영향도 히트맵 (Target vs Parameters)



1. 코어-쉘 구조의 지배자

Mn_Fraction이 절대적인 영향을 미침. 변수값이 코어-쉘 형성(Y12)에 극단적인 통제력을 가짐.

2. 크기와 응집의 통제

Target_Box_Size가 입자 크기(Y2) 및 응집도(Y10)에 가장 큰 영향력을 행사하여 분산도를 결정함.

3. 상분리 및 클러스터링

Temp_Target과 Timestep_fs가 반응의 물리적 거등을 결정하여 상분리(Y11)에 주요한 영향을 줌.

Gemini Notebook

타겟 구조별 AI 최적화 파라미터 세트 (Recipe Cards)



단일상 (Solid Solution)

목적: 격자 산소 교환 극대화

- Mn_Fraction ≤ 0.25
- Temp 350-500°C
- pH 9.0-10.5

합성 방식: 공침법(Co-precipitation) 기반.
결과: 60-110 m^2/g 비표면적, 격자 변형 및 산소 결함 극대화.



초미세 (Ultrafine < 5nm)

목적: 저온 산소 저장 능력 및 비표면적 극대화

- Mn_Fraction ≈ 0.5
- Pressure 23 MPa
- Temp 300-400°C

합성 방식: 초임계 유체 연속 흐름 + 급속 퀀칭 제어.
결과: 입자 크기 < 5nm, 비표면적 최대 290 m^2/g, 비평형 준안정 상태 달성.



코어-쉘 (Core-Shell)

목적: 내황성 확보 및 활성 부위 열화 방지

- Mn_Fraction 정밀 제어
- 램프 속도 10°C/min (단일)
- 램프 속도 2°C/min (다중)

합성 방식: 희생 하드 템플릿 또는 열적 질량 전달 제어.
결과: 특정 하소 램프 속도 제어를 통한 MnOx@CeO2 아키텍처 유도.

Gemini Notebook

실전 R&D 가이드라인: NanoLatticAI 의사결정 트리

Q1. 귀하의 촉매는 황(Sulfur)이 포함된 가스 환경에 노출됩니까?

- **YES** → 안정성 최우선 → Core-Shell 아키텍처 선택
  - **Action:** NanoLatticAI에서 Mn_Fraction 정밀 타겟팅 및 가열 램프 속도 (Heat_Steps) 10℃/min 시뮬레이션 실행.
- **NO** → **Q2. 반응이 저온(Low-Temperature)에서 집중적으로 일어납니까?**
  - **YES** → 반응성 최우선 → Ultrafine (<5nm) 아키텍처 선택
    - **Action:** Ce:Mn=1:1 입력, 초임계 조건(Pressure 23MPa) 설정 후 Y2_Size_Rg 최소화 실행.
  - **NO** → 격자 산소 교환 핵심 → Solid Solution 구조 선택
    - **Action:** Mn_Fraction ≤ 0.25 입력, 공침 조건(pH 9.0-10.5) 최적화로 Y8_Worst_Defect_Energy 조율.

NanoLatticAI는 단순한 관찰 도구가 아닙니다. 재료 설계의 맹목적인 시행착오(Trial & Error)를 데이터 기반의 '목표 지향적 레시피(Target-Oriented Recipe)'로 대체하는 디지털 도가니입니다.

Gemini Notebook