電子やイオン等の能動的制御と反応
2020 年度採択研究者

2020 年度
年次報告書

中田 彩子

物質・材料研究機構　国際ナノアーキテクトニクス研究拠点
主任研究員

担体の電子状態制御による金属ナノ粒子触媒活性化の機構解明と設計

§1. 研究成果の概要

本課題では、研究者らが開発している大規模第一原理計算を用いて、金属ナノ粒子触媒と担体との接続界面における構造や電子状態を詳細に解析する。担体がナノ粒子に与える影響を解析し、特に担体に欠陥を導入した際に、担体の構造や電子状態が変化することで金属ナノ粒子触媒の活性にどのような影響を与えるか、そのメカニズムの解明を目指す。

2020 年度では、今後の研究計画の基盤となる、金属ナノ粒子および担体の構造作成に取り組んだ。Au ナノ粒子、Ag ナノ粒子、Ru ナノ粒子および Pd ナノ粒子に関して、Oh 構造における安定構造および電子状態の解析を行った。その際、1nm(約 60 原子)、2nm(約 300 原子)、3nm(約 1000 原子)程度の 3 つのサイズのナノ粒子を扱い、安定性、電子状態のサイズ依存性を検討した。その結果、ナノ粒子の種類による構造の柔軟性、電子状態、特に表面での電荷の違いを明らかにした。

担体の表面構造の作成にも取り組んでいる。ここでは、Au ナノ粒子との組み合わせで H_2 生成反応に大きな活性を示すことが知られているヒドロキシアパタイト(HAP)の安定構造を計算した。一方で、活性が低い MgO 担体や TiO_2 担体についても検討している。また、担体の電子状態が活性に影響を与えることが既に報告されているエレクトライド担体に関しても安定構造計算を行っている。次年度では、これらの担体と上記の金属ナノ粒子を用いて、担持されたナノ粒子触媒の接続界面の電子状態の解析に取り組む。

また、同さきがけ領域内の共同研究として、金属酸化物クラスターで修飾した金ナノ粒子触媒に関する研究、また TiO_2 に担持した IrO_2 触媒の構造ひずみと電子状態の解析を開始した。