

電子やイオン等の能動的制御と反応
2020 年度採択研究者

2021 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。

2021年度では、担持金属ナノ粒子の安定構造、電子状態とサイズ・形状との関係を大規模第一原理計算により解析した。前年度に安定構造を計算した 1nm および 2nm サイズの Au ナノ粒子を様々な形状に切り出し、MgO 担体に吸着させた状態での安定構造、電子状態計算を行った。2nm サイズの Au ナノ粒子を担持するには～約 3000 原子の大規模な計算モデルが必要なため通常の第一原理計算手法では取り扱いが困難であるため、研究者らが開発したマルチサイト法という手法を用いて大規模第一原理計算を実行した。1nm ナノ粒子では、サイズが小さいため、切り出しが大きい場合には担持による形状の崩れが見られた。一方、2nm ナノ粒子では半分まで切り出した場合でもナノ粒子の形状を維持することが示された。また、ナノ粒子の切り出し方と担体表面の構造変化、相互作用の大きさには相関が見られた。次年度では、他のナノ粒子・担体の組み合わせについても調べるとともに、担体に欠陥が導入された際の影響について系統的な解析に取り組む。

また、同さきか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理論計算を行った。様々なクラスター修飾位置における安定構造および電子状態を計算し、大きく負に帯電した金属酸化物クラスターが吸着することによって金ナノ粒子への電子移動が起こること、移動した電子はナノ粒子全体に広がるが、修飾箇所近傍ではやや電子が多くなり電子状態のサイト依存性が生じることを示した。