

原子・分子の自在配列と特性・機能
2020 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

草田 康平

京都大学 白眉センター
特定准教授

金属ナノ粒子における原子の三次元自在配列技術の構築

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、これまで人類が未踏である、金属原子の三次元配列を自在に制御し、金属ナノ粒子において選択的な結晶相の制御（『相制御 (Phase control)』）を達成することで、自然界には存在しない新規ナノ物質を開発することを目的とする。具体的には、金属元素及び合金組成を変えることなく、金属の三大基本構造である「面心立方格子 (fcc)」、「六方最密格子 (hcp)」、「体心立方格子 (bcc)」を化学的合成手法により選択的に作り分ける技術の構築とそのメカニズムの解明を行い、「相制御」という新たな金属ナノ粒子の設計指針を基に触媒特性を中心に、単金属および固溶体における新規ナノ物質開発を行う。また、金属原子半径の大きく異なる合金系では原子配列の自在制御により固溶体と金属間化合物の作り分けとその物性制御を行う。

第二年次は第一年次に引き続き単金属ナノ粒子の bcc-hcp-fcc 自在制御を達成するため、単金属ナノ粒子の合成を検討し、目的物質の合成を目指すとともに、他の元素へ展開した。また、計画に沿って、固溶体合金ナノ粒子における物質開発を開始した。二元系および三元系固溶ナノ合金における fcc-hcp 構造制御による物性の変化をまとめ論文として発表した。多元系における三大結晶構造制御の検討も開始したが、まだまとまった成果は得られていない。加えて、計画では第三年次から開始する予定であった金属原子半径の大きく異なる合金系での固溶体と金属間化合物の作り分けにも昨年次後半から着手しており、バルクの相図では存在しない固溶体ナノ合金の合成に成功し、同じ組成でその構造を金属間化合物に変化するメカニズム解明に着手した。第三年次も引き続き上記の研究を進め、単金属、固溶体、金属間化合物において結晶構造の作り分けを目指し、合成に成功した場合、その物性開拓を行っていく。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Phase Control of Solid-solution Nanoparticles Beyond the Phase Diagram for Enhanced Catalytic Property”, *ACS Materials Au*, 2, 110–116 (2021).
- 2) “Continuous-Flow Syntheses of Alloy Nanoparticles”, *Mat. Horiz.*, 9, 547–558 (2021).
- 3) “Noble-Metal High-Entropy-Alloy Nanoparticles: Atomic-Level In-sight into the Electronic Structure”, *J. Am. Chem. Soc.*, 144, 3365–3369 (2022).
- 4) “Crystal Structure Control of Binary and Ternary Solid-Solution Alloy Nanoparticles with a Face-Centered Cubic or Hexagonal Close-Packed Phase”, *J. Am. Chem. Soc.*, 144, 4224–4232 (2022).