

Title	多孔質金属の表面特性
Author(s)	袴田, 昌高
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究 成果報告書 (2017), 2016: 52-52
Issue Date	2017-03
URL	http://hdl.handle.net/2433/227984
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

多孔質金属の表面特性
Surface properties of porous metals

京都大学大学院 エネルギー科学研究科 袴田 昌高

研究成果概要

ナノポーラス金属は、ナノメートルオーダーにまで微細化された孔径・リガメント径の多孔質構造を有する金属であり、比表面積の大きさ・触媒特性・力学特性においてなど、バルクの金属にはない性質が現れる。ナノポーラス金に SAM(6-メルカプト 1-ヘキサノール)を修飾し硬さ試験を行ったところ、SAM 修飾ナノポーラス金の硬さが SAM を修飾しないナノポーラス金に比べ減少するという結果が得られた。硬さ減少のメカニズムは、SAM に含まれる硫黄原子によってナノポーラス金表面の金原子の結合状態が変化したこと起因すると考えられるが、その詳細は分かっていない。本研究では京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにおいて第一原理計算(ソフトウェア:CASTEP)を利用し、ナノポーラス金の硬さ減少のメカニズム解明に取り組んだ。

金(111)面を 12 層積層させた金原子 96 個からなるセル(純 Au モデル)を作成し、またすべり面の金原子一個を硫黄原子一個と置換したモデル (Au-S) モデルを用意した。これらのモデルに対して安定化計算を行った。カットオフエネルギーは 320 eV、k 点は $3 \times 5 \times 1$ に設定して計算を行った。各モデルに対して第一原理せん断試験を行い、転位がすべり面上をバーガスベクトル分移動するのに必要なエネルギー (γ_{us} ; USFE) を計算した。また、USFE のうちひずみに起因するエネルギー $\gamma_{us, strain}$ 及び化学結合に起因するエネルギー $\gamma_{us, chemical}$ をそれぞれ計算した。

USFE を計算した結果、Au-S モデルの USFE は純 Au モデルの USFE よりも低かった。このことから、第一原理計算においても SAM 修飾によってナノポーラス金の硬さが低下することが確認された。また、Au-S モデルの $\gamma_{us, strain}$ は Au-S モデルの γ_{us} よりも大きく、 $\gamma_{us, chemical}$ は γ_{us} よりも小さかった。S 原子は Au 原子よりも電気陰性度が大きく、S 原子は周囲の Au 原子から電子を奪う。このため S 原子の周囲の Au-Au 結合は弱められ、 $\gamma_{us, chemical}$ が低下したと考えられる。以上から、SAM 修飾によってナノポーラス金表面の Au-Au 結合が弱められ、転位の移動が促進された結果、ナノポーラス金の強度低下につながったことが第一原理計算によって明らかになった。

発表論文(謝辞なし):Mechanical characterization of nanoporous Au modified with self-assembled monolayers, N.Miyazawa, J. Ishimoto, M. Hakamada and M. Mabuchi, Applied Physics Letters (2016) 109, 261905.