

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 (2019), 2018: 58-58
Issue Date	2019-03
URL	http://hdl.handle.net/2433/241185
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・力学特性など、バルクの金属にはない性質が現れる。最近、ナノポーラス金が平滑金に比べ高い抗菌活性を示すという実験結果が得られた。ナノポーラス金はその特異な表面効果によって抗菌性を発現していると考えられる。最近の実験により、種々のナノポーラス金属(ナノポーラス金及び金-白金合金)の抗菌性が金属表面の仕事関数と正の相関を示すことが分かった。そこで本研究では、第一原理計算を用いてナノポーラス金属の仕事関数を計算し、実験結果と比較することを試みた。また、ナノポーラス金属の仕事関数値を金属表面の電子密度を用いて考察した。

本研究では第一原理計算(ソフトウェア: Materials Studio) を使用し、平滑金、ナノポーラス金及び金-白金合金をモデル化し安定化計算を行った。先行研究からナノポーラス金属表面には格子定数の乱れが存在することが知られている。そこで本研究では金(111)面を 4 層積層させた平滑金モデルに対し-5%の圧縮ひずみを加えたモデルをナノポーラス金モデルとして作製した。また、ナノポーラス金モデルの表面の 3 つの金原子を白金原子と置換し、ナノポーラス金-白金合金モデルを作製した。

第一原理計算の結果、仕事関数値は平滑金<ナノポーラス金-白金合金<ナノポーラス金の順であった。これは先述の実験結果と合致した値である。先行研究から、仕事関数値の大小は金属表面における電子の染み出しによって形成される表面電気二重層の大小によって決まることが分かっている。特に圧縮ひずみを加えると、表面の電気二重層の密度が増加するため仕事関数が増加することが報告されている。従ってナノポーラス金の仕事関数の増加は圧縮ひずみに起因すると考えられる。一方ナノポーラス金-白金合金モデルでは、電気陰性度に従って表面の原子が内部の原子に電子を奪われていることが分かった。実際金属表面に垂直な面の電子密度分布をプロットしたところ、ナノポーラス金-白金合金モデルではナノポーラス金モデルに比べ表面の電子密度が低下しており、電子の染み出しが抑制されていることが分かった。ナノポーラス金属の高い仕事関数は細菌の表層構造の分極状態を変化させると考えられ、このことにより高い抗菌性を発現させると考えられる。

発表論文(謝辞なし): Electronic origin of antimicrobial activity owing to surface effect, N. Miyazawa, S. Sakakibara, M. Hakamada and M. Mabuchi, Sci. Rep. (2019) 9, 1091.