

新規ナノ物質の設計に向けた第一原理計算研究
First-Principles Study for Designing Novel Nanomaterials

北海道大学触媒科学研究所 飯田健二

研究成果概要

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を利用してナノ物質の第一原理計算を行う。電子構造や光学特性を原子レベルで明らかにして、得られた知見に基づき光や電圧を利用する不均一系触媒の設計指針を提案することを目的としている。

[目的] 自然界の限られた資源を有効活用するためには、様々な元素を組み合わせる高性能な物質・材料を創造していくことが求められる。可視域に局在表面プラズモン共鳴(LSPR)吸収を示す材料の場合、周期表 11 族の単金属(Cu, Ag, Au)のみが使われてきた。しかし近年、B2(塩化セシウム)型PdInナノ粒子が可視域にLSPR吸収を示すことが発見された。類似の候補材料は多く存在し、化学的安定性が高いことから光触媒への応用が期待される。

我々は、合金ナノ粒子の第一原理計算を行い、プラズモニック光触媒に適した合金ナノ粒子の設計に資する知見を得るべく研究を進めてきた。これまで、B2型合金の比較的疎な構造によってLSPRが発現することを明らかにしてきた。そこで本年度は、PdInと同様に比較的疎なC1型構造を持つPtIn₂に着目して、光学特性を解析した。

[計算手法] 本研究では、直径数 nm のナノ粒子の光電子物性を原子・電子のレベルで明らかにすることが求められる。そのため、高い並列化効率を有する第一原理計算プログラム SALMON を用いた大規模計算によって、光励起電子ダイナミクスのシミュレーションを行った。対象としたのは、図1に示したC1型構造を持つPdIn₂のナノ粒子である。結晶構造から直径約 3 nm の粒径のPt₂₄₉In₄₃₂を切り出して計算した。比較のために、同程度の大きさのAu₅₆₁についても計算を行った。

[結果と考察] 光吸収スペクトルを計算したところ、Pt₂₄₉In₄₃₂は2.8 eV付近にAu₅₆₁のLSPRと類似のピークが見いだされた。そこでPt₂₄₉In₄₃₂について、2.8 eVの光によって誘起される電子ダイナミクスを解析した結果、電子の集団振動が励起されることが見いだされた。Pt₂₄₉In₄₃₂でも可視光でLSPRが励起されることが明らかになった。

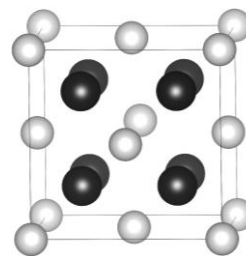


図 1. 対象としたPt₂₄₉In₄₃₂ナノ粒子の結晶構造。黒がInで灰色がPt。

発表論文(謝辞なし)

飯田健二, 「ナノ物質からなる不均一系の外場応答機構」, Frontier, Journal of the Japan Society of Theoretical Chemistry, 3, 59-65 (2021).