

多元素ナノ粒子の安定性評価
Stability evaluation of multi-element nanoalloy

京都大学大学院 理学研究科 化学専攻 固体物性化学研究室 難波優輔

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、ナノ粒子モデルに対する第一原理計算データセットを構築した。

ナノ粒子はバルク材料とは異なる性質を示し、サイズや形状の違いによりその特性が大きく変化する。これはサイズ・形状依存的な表面構造の変化に起因するものである。従来の研究では理想的な幾何形状を前提とした安定性や反応に関する解析が行われてきたが、電子顕微鏡で観察される実在形状は、これらの理想形状と大きく異なる。本研究では、第一原理計算・機械学習・モンテカルロシミュレーションを融合した手法により、多元素ナノ粒子の熱力学安定性を評価する。モンテカルロシミュレーションを現実的な計算時間で実施するには、結晶構造パラメータでエネルギーを予測する回帰式が必要である。本年度は、エネルギー回帰モデル構築のために、単体ナノ粒子の第一原理計算データセットを取得した。

遷移金属 Rh、Pd、Ag、Pt に対して、サイズの異なる立方八面体、切頂八面体、切頂六面体のナノ粒子モデル(図1)を作成し、第一原理計算ソフト VASP を用いて構造最適化を行った。理想形状に加えて、同一元素を1～9個吸着させたモデルも考慮した。構造最適後に形状を大きく崩れたケースを除くと、各元素に対して約 90 個のサンプルを含むデータセットが得られた(表1)。

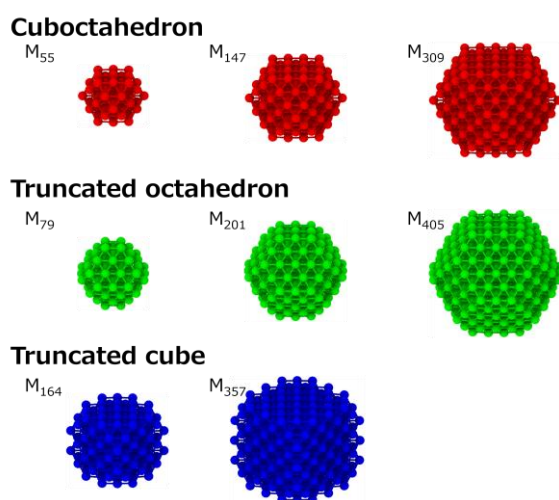


Table 1 Number of acquisitions for mono-metal nanoparticle.

Rh	95
Pd	94
Ag	95
Pt	89

Fig 1. Models of cuboctahedrons, truncated octahedrons, and truncated cubes.