

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 担体の電子状態制御による金属ナノ粒子触媒活性化の機構解明と設計

2. 個人研究者名

中田 彩子（物質・材料研究機構ナノアーキテクニクス材料研究センター 主幹研究員）

3. 事後評価結果

本研究では、中田研究者が開発してきた大規模 DFT 計算に特化したプログラム CONQUEST を用いて、電子密度を最適化してエネルギーや原子に働く力を計算することで、構造探索や各部位の安定性の議論を進めた。高精度且つ高効率な計算手法であるマルチサイト法により、絶縁体・半導体・金属の種類を問わず高精度な大規模第一原理 DFT 計算を行った。ナノ粒子のサイズ・形状や担体への担持だけでなく、担体へ欠陥を導入し構造や電子状態が変化した際に、ナノ粒子との相互作用がどのように変化するかを解析した。実際の実験で用いられているサイズに近い数 nm サイズの金属ナノ粒子を担体上に担持させ、その構造や電子状態のサイズ・サイト依存性や反応エネルギーを計算することで、実在系で担体が金属ナノ粒子触媒に与える影響を詳細に解析した。機械学習手法を導入することにより、複雑な大規模系の中から特異的なサイトを効率的かつ客観的に判別、解析することができるようになったのは、大きな収穫であった。このような解析は構造的特徴に関しては近年広く取り組まれていたが、電子状態の解析に発展させることができたことで、大規模第一原理計算の利点を生かした独特の解析が可能になった。また、数多の構造パターンの取り扱いに関して、アドバイザー等の助言のもと、機械学習力場の利用に取り組めたことは非常に有意義だった。