

## NiPtナノ粒子におけるPt拡散特性の分子動力的解析

○長尾 歩<sup>1</sup>、石元 孝佳<sup>2</sup>、古山 通久<sup>2</sup>、宮村 弘<sup>1</sup>、  
ジョン・クヤ<sup>1</sup>、バラチャンドラン・ジャヤデワン<sup>1</sup>

<sup>1</sup>滋賀県立大学工学部材料科学科(〒522-8533 滋賀県彦根市八坂町2500)

<sup>2</sup>九州大学稲盛フロンティア研究センター(〒819-0395 福岡市西区元岡744)

## 【緒言】

Ptは高い触媒活性、耐熱性、耐食性を有するため、触媒材料として広く利用されているが、その埋蔵量は少なく枯渇が心配されており、使用量の抑制が必要である。そこで、本研究では、少量のPt使用量で高い触媒活性を示すNiPtナノ粒子の作製に成功した<sup>[1]</sup>。しかし、少量のPt使用量で、高い触媒活性を示す理由は不明であった。そこで、詳細な分析として、高角散乱環状暗視野走査透過顕微鏡と、それに付属したエネルギー分散型X線分析装置により、詳細な粒子の観察と、粒子の元素マッピングを行った。その結果から、この粒子は、粒子の辺や頂点にPtが偏在したケージ状構造を有しており、Ptのケージ状構造は、PtコアNiシェル構造の粒子が生成した後、粒子内でPtが拡散することにより、形成されることを実験により明らかにした<sup>[2]</sup>。しかし、詳細な拡散のメカニズムはいまだ不明であり、生成過程を応用した粒子の改良や新たな粒子の設計は難しい。そこで、分子動力的シミュレーションを用いて、NiPtナノ粒子におけるPtの拡散特性を解析することを本研究の目的とする。

## 【方法】

実験で得られた知見を参考に、Ptナノ粒子が析出した後、その上にNi原子が吸着する段階があると考え、このときのモデルとして、様々な表面状態(点欠陥、ステップ、キンクなど)を有するPt(100)表面およびPt(111)表面にNi原子あるいはNi原子集合体(ダイマー、トライマー、テトラマー)が吸着した系を作成し、分子動力学計算ソフトLammpsを用いて分子動力学シミュレーションを行った。使用したモデルの一部をFig.1に示す。また、同じ形状、同じ組成を有し、Ptの位置が異なるNiPtナノ粒子モデルを用い、Ptの位置による安定性を評価した。

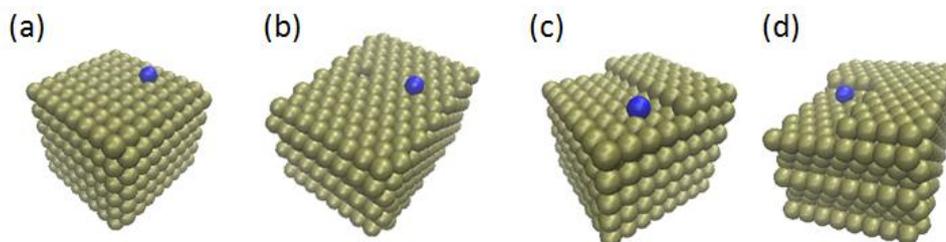


Fig. 1 Models considered; adsorption of Ni atom on (a) Pt(100), (b) Pt(111) surfaces having vacant sites, (c) Pt(100) and (d) Pt(111) surfaces with a step and kink, respectively.

## 【結果】

Pt(100)表面上に吸着したNiはPtの格子の隙間に入り込むことでPt(100)面内に入り込むことが確認された。一方、Pt(111)表面上のNiはPtの格子の隙間に入り込めず、表面を拡散し続けた。これは、原子密度の差による影響であると考えられる。また、Pt(100)表面に存在する空孔は、NiがPtの格子の隙間に入り込んだ際の歪みの緩和に使用されるのに対し、Pt(111)表面に存在する空孔は、表面を拡散するNi原子が近づいた際に侵入できるサイトとして働くことが確認された。また、Pt表面に存在するステップやキンクは、Pt表面を拡散する原子をトラップする働きがあることが確認された。これらのことから、初めに析出するPtの表面構造はその後の粒子の成長に大きな影響を与えることが考えられる。

## 【参考文献】

- [1] J. L. Cuya Huaman, S. Fukao, K. Shinoda, and B. Jeyadevan, *Cryst. Eng. Comm.*, 13 (2011) 3364.  
[2] 長尾 歩、東嶺 孝一、岩本 多加志、ジョン クヤ、前之園 信也、宮村 弘、バラチャンドラン ジャヤデワン、日本化学会春季年会、口頭発表(2015).