

構造および元素由来の記述子による二元ナノ合金の安定性予測

(信州大先材研¹⁾) ○難波 優輔¹・古山 通久¹

Stability Prediction of binary alloy nanoparticles by structure- and element-specific descriptors
(¹Research Initiative for Supra-Materials, Shinshu University)○Yusuke Nanba,¹ Michihisa Koyama,¹

Progress in the field of alloy nanoparticles (NPs) has recently enabled the synthesis of solid solution NPs comprising two elements that are immiscible in bulk state. Possible combinations of constituent elements increase. However, evaluating the stability of various alloy NPs by density functional theory (DFT) calculation requires enormous computational resources. When the quinary alloy NP was considered for 25 transition metal (TM) elements, there are 50,000 possible combinations. Thus, the element-based descriptor is needed to expand various alloy NPs. In this study, the excess energy of binary alloy NPs comprising 10 TM elements were considered, and two-step supervised learning (SL) was performed (Fig. 1), where the first is the SL of structure-specific descriptor and the second is the SL of element-specific descriptor. The element-specific descriptors are based on the physical values of mono-metal in Citration and Matweb. Elastic net and evaluation of variance inflation factor revealed the effective element-descriptor for expressing the excess energy.

Keywords : Alloy Nanoparticle; Density Functional Theory; Supervised Learning

ナノ合金は、バルク状態では固溶しない元素の組み合わせが混ざり合う。¹⁾これにより、構成元素として可能な組み合わせが増加する。しかし、様々なナノ合金に対して、密度汎関数理論に基づく第一原理計算によってその安定性を調べようとする、莫大な計算資源が必要となる。遷移金属 25 元素から五元合金の構成元素を選択すると、50,000 通りの組み合わせが存在する。よって、様々なナノ合金に展開していくには、元素に由来した記述子を明らかにする必要がある。本研究では、遷移金属 10 元素に対して、二元ナノ合金の過剰エネルギーを考慮し、構造由来の記述子の回帰を第一段階、元素由来の記述子の回帰を第二段階とした二段階の教師あり学習を実施した(図 1)。元素由来の記述子は、Citration や Matweb に記載された単体金属の物性値を基に作成した。Elastic net や分散拡大係数の評価から、有効な元素固有記述子を抽出した。

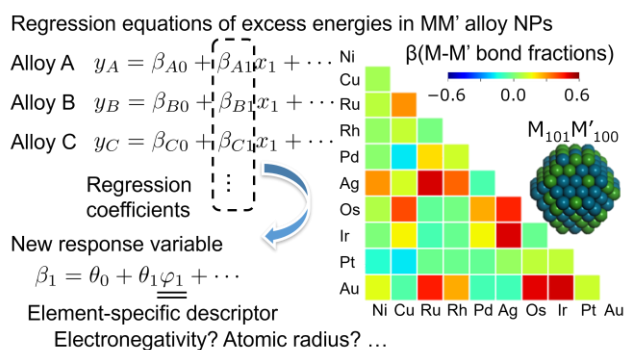


Fig. 1 Two-step supervised learning for excess energies of binary alloy NPs

1) H. Kobayashi, K. Kusada, H. Kitagawa *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 1551.