

可視光応答型光触媒を用いる高効率水分解システムの開発

Development of Efficient Water Splitting System by Using Visible Light Responsive Photocatalyst

京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻 鈴木 肇

研究成果概要

当研究室では、これまでにビスマスや鉛を含む様々な層状酸ハロゲン化物 ($\text{Bi}_4\text{NbO}_8\text{Cl}$ や PbBiO_2Cl 等) が、約 500 nm までの可視光を利用して水分解用 (特に酸素生成用) 光触媒として機能することを報告してきた。一方で、実用的な水素製造効率を実現するためには、より広域の可視光の利用が必須である。そこで本研究では、正側の伝導帯下端形成 (それによるバンドギャップの狭窄化・長波長応答化) が期待できるイオン化エネルギーの大きな元素としてバナジウムに着目し、Pb-V 系酸ハロゲン化物群を探索した。特に、 $\text{Pb}_{14}(\text{VO}_4)_2\text{O}_9\text{Cl}_4$ 、 $\text{Pb}_5(\text{VO}_4)_3\text{Cl}$ 、 PbVO_3Cl (Fig. 1a-c) の3種に注目し、そのバンド構造解析と光触媒能の評価を行った。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、これらのバンド計算を行ったところ、伝導帯下端付近はいずれの物質でも主に V の軌道が構成しており (Fig. 1d-f)、これにより従来の酸ハロゲン化物よりも正側に伝導帯下端位置を有することが明らかとなった。なかでも PbVO_3Cl は、約 550 nm までの可視光吸収が可能であり、V 系酸ハロゲン化物として初めて酸素生成光触媒として機能することを見出した。

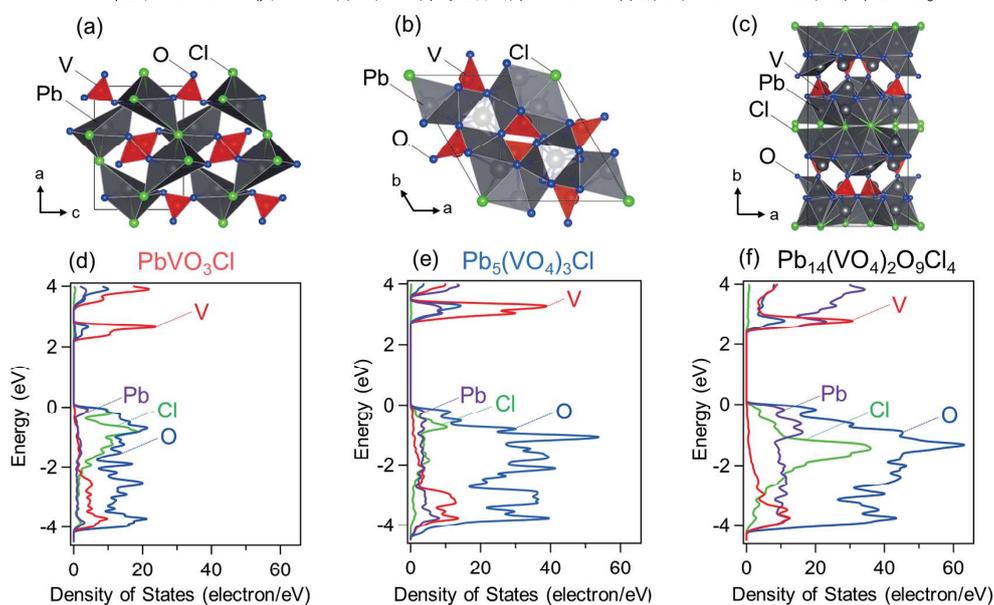


Fig. 1 (a-c) Crystal structures and (d-f) partial density of states of Pb-V-based oxyhalides.

発表論文 (謝辞あり)

Suzuki, H.; Tomita, R.; Ishii, Y.; Tomita, O.; Nakada, A.; Saeki, A.; Abe, R. *J. Chem. Mater.* A, submitted.