

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

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の CASTEP プログラムを利用し、水分解用可視光応答型光触媒である Sillén-Aurivillius 型層状酸ハロゲン化物光触媒 ($(\text{Bi}_2\text{O}_2)_2\text{X}(\text{A}_{n-1}\text{M}_n\text{O}_{3n+1})$) のバンド構造を明らかにした。我々はペロブスカイト層数の異なる 3 種類の新規酸ハロゲン化物光触媒 $\text{BaBi}_5\text{Ti}_3\text{O}_{14}\text{Cl}$ ($n = 3$), $\text{Ba}_2\text{Bi}_5\text{Ti}_4\text{O}_{17}\text{Cl}$ ($n = 4$), $\text{Ba}_3\text{Bi}_5\text{Ti}_5\text{O}_{20}\text{Cl}$ ($n = 5$) を合成し、これらが可視光二段階励起型水分解システムの酸素生成用光触媒として機能することを見出した (Figure 1)。さらに、その活性はペロブスカイト層の層数が増加するにつれて向上した。活性向上の要因を検討するために、 $\text{BaBi}_5\text{Ti}_3\text{O}_{14}\text{Cl}$ と $\text{Ba}_3\text{Bi}_5\text{Ti}_5\text{O}_{20}\text{Cl}$ について放射光 X 線回折から得られた結晶構造を基にバンド計算を行った。それぞれの部分状態密度を描写すると、いずれの場合も価電子帯上端付近は主にペロブスカイト層の酸素で占められていた。一方で、伝導帯下端付近はフルオライト層のビスマスがバンド形成に大きく寄与していた。さらに、価電子帯上端付近の酸素の寄与を詳しく見てみると、ペロブスカイト層の中心からフルオライト層に向って寄与率が減少しており、ペロブスカイト層数の増加に伴って空間的に電荷分離が促進されることで光触媒活性が向上する可能性が示唆された。

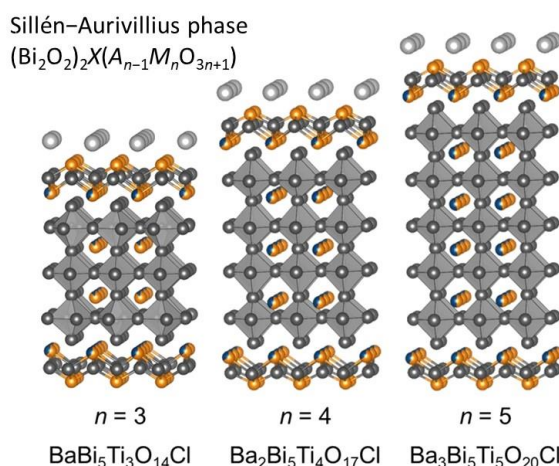


Figure 1 Crystal structures of Sillén-Aurivillius phases with different number of perovskite layers ($n = 3, 4, 5$).

発表論文 (謝辞なし) Ozaki, D.; Suzuki, H.; Ogawa, K.; Sakamoto, R.; Inaguma, Y.; Nakashima, K.; Tomita, O.; Kageyama, H.; Abe, R.: “Synthesis, band structure and photocatalytic property of Sillén-Aurivillius oxychlorides $\text{BaBi}_5\text{Ti}_3\text{O}_{14}\text{Cl}$, $\text{Ba}_2\text{Bi}_5\text{Ti}_4\text{O}_{17}\text{Cl}$ and $\text{Ba}_3\text{Bi}_5\text{Ti}_5\text{O}_{20}\text{Cl}$ with triple-, quadruple- and quintuple-perovskite layers” *J. Mater. Chem. A*, in press