

半導体光触媒を用いた高効率水分解システムの開発
Development of efficient photocatalysts for water splitting

京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻
東 正信

研究成果概要

エネルギー資源枯渇の問題から、近年、水素をエネルギーキャリアとして用いる水素社会実現に向けた研究開発・実用化が進められている。光を用いて水を水素と酸素に分解する技術は、二酸化炭素を排出しないクリーンなプロセスであり、太陽光エネルギーの大部分を占める可視光照射下で働く光触媒の開発が行われている。複数のアニオンからなる混合アニオン化合物は、バンドギャップが小さいため、光触媒の候補として注目されているが、安定性に問題があった。

本研究では、酸素 (O_2^-) と塩素 (Cl^-) の二種のアニオンからなる層状の酸塩化物 $\text{Bi}_4\text{NbO}_8\text{Cl}$ が、可視光を吸収して、安定して水を酸化する能力があり、これを用いた定常的な可視光水分解を実証した。また、理論計算から(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)、価電子帯における O-2p 軌道の幅は広く、そのため Cl-3p 軌道は価電子帯の内部に位置することが明らかになった (Fig. 1a)。この結果は、異種アニオンのバンドが価電子帯の上部を占める一般の混合アニオン化合物のバンド構造 (Fig. 1b) とは対照的であった。光吸収により正孔は価電子帯の上端に生じやすいと考え、 $\text{Bi}_4\text{NbO}_8\text{Cl}$ においては、正孔に対して安定な O-2p 軌道が価電子帯の上部を占めていることが、光触媒材料としての安定性を導いた理由であると考えられる。本研究で得られた知見は、安定性と高活性を両立する光触媒の設計指針を与えるものであり、将来の高効率太陽光水素製造の実現に向けたブレークスルーにつながることが期待される。

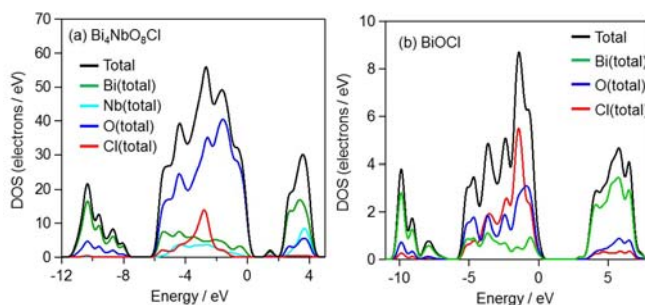


Fig. 1 各半導体化合物の状態密度(Density of state)

発表論文(謝辞あり)

Hironori Fujito, Hironobu Kunioku, Daichi Kato, Hajime Suzuki, Masanobu Higashi, Hiroshi Kageyama, and Ryu Abe, “Layered Perovskite Oxychloride $\text{Bi}_4\text{NbO}_8\text{Cl}$: A Stable Visible Light Responsive Photocatalyst for Water Splitting”, *J. Am. Chem. Soc.*, 2016, 138, 2082–2085.