

可視光応答型光触媒を用いる高効率水分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を利用し、近年水分分解光触媒として注目されている層状酸ハロゲン化物の一種 $\text{SrBi}_3\text{O}_4\text{X}_3$ ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) のバンド計算を行った。本物質は、ハロゲンアニオンを Cl から Br, I に置換することで価電子帯上端 (VBM)、伝導帯下端 (CBM) が共に負側へシフトする。その理由を明らかにするため、 $\text{SrBi}_3\text{O}_4\text{X}_3$ の状態密度を計算した。 $\text{SrBi}_3\text{O}_4\text{X}_3$ はハロゲンによらずいずれの物質も VBM がダブルハロゲン層のハロゲン、CBM がシングルハロゲン層側のビスマスによって構成されていることが明らかとなった。つまり、CBM と VBM がシングルハロゲン層側とダブルハロゲン層側で別々に構成されていることが示された。VBM の負側シフトは、従来の BiOX 系酸ハロゲン化物と同様に、電子親和力の小さなハロゲンに置換されるために生じたと考えられる。一方で、CBM の負側シフトは、COHP 解析などもあわせて行うことによって、シングルハロゲン層を介した Bi-Bi 間相互作用の大きさがハロゲンアニオンのサイズに応じて変化することに起因していることが明らかとなった。これらのバンド構造解析の結果は、今後本材料系のバンド構造制御を行う上で重要な知見である。

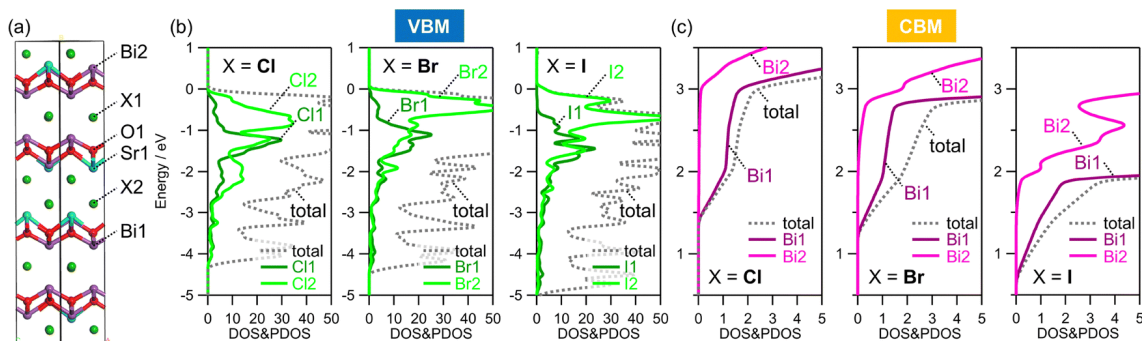


Figure 1. (a) Structural models of $\text{SrBi}_3\text{O}_4\text{X}_3$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) used for the DFT calculations, viewed along the [100] direction of the original structures. DOS and PDOS near the (b) valence band maximum (VBM) and (c) conduction band minimum (CBM) of $\text{SrBi}_3\text{O}_4\text{X}_3$.

発表論文(謝辞あり)

Ishii, Y.; Suzuki, H.; Tomita, O.; Nakada, A.; Abe, R.: “Dual halogen layers diversify band engineering in Sillén oxyhalide photocatalysts: electronic structure control of $\text{SrBi}_3\text{O}_4\text{X}_3$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) via halogen substitution” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2026**, 28, 38-41.