

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を利用し、近年光触媒水分解用助触媒として注目されている 2 次元有機金属構造体(2D MOF)の水の還元(水素生成)に対する触媒能を評価した。二次元 MOF の一種である Nickelladithiolene (NiBHT)の小粒子化を目的として、キャップ配位子を添加して本材料を合成すると、水素生成活性が向上することが明らかとなった。各種 DFT 計算から、この高活性化は微細化効果のみならず、本材料の電子状態や触媒能自体が変化することでもたらされていることが明らかとなった。

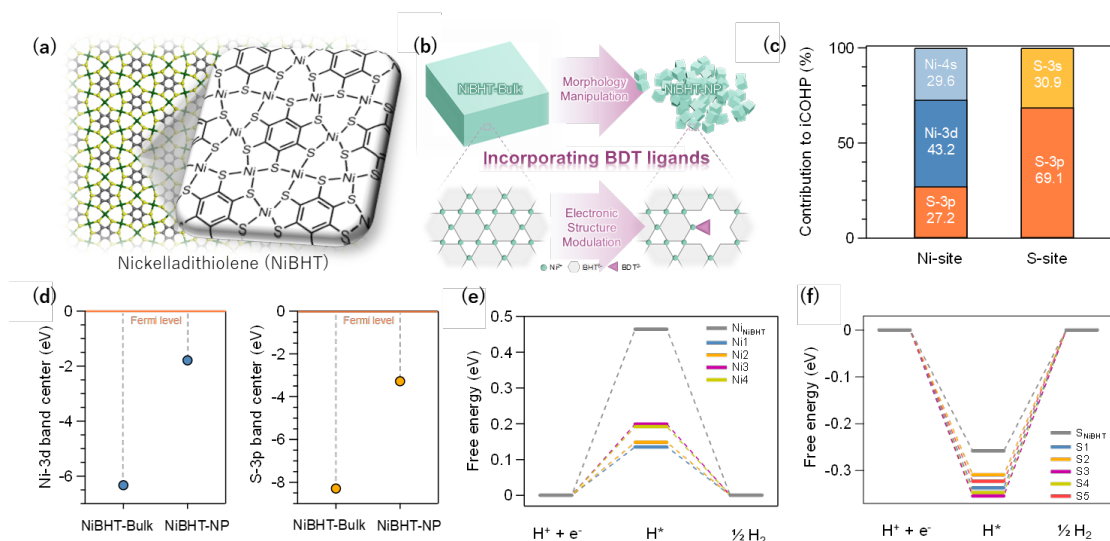


Figure 1. (a) Structure of NiBHT. (b) Schematic of incorporating BDT nonbridging ligands into NiBHT. (c) Contribution of Ni-4s, Ni-3d, S-3p, and S-3s to iCOHP for proton adsorption on Ni-site or S-site of NiBHT. (d) Calculated band center for Ni-3d or S-3p of NiBHT-NP and NiBHT-Bulk. Free energy diagram for HER process taking place on selected (e) Ni and (f) S sites of NiBHT-NP under Volmer-Heyrovsky pathway.

発表論文(謝辞あり)

Guan, J.; Koizumi, K.; Fukui, N.; Suzuki, H.; Murayama, K.; Toyoda, R.; Maeda, H.; Kamiya, K.; Ohashi, K.; Takaishi, S.; Tomita, O.; Saeki, A.; Nishihara, H.; Kageyama, H.; Abe, R.; Sakamoto, R. *ACS Catal.*, **2024**, *14*, 1146–1156.