## 可視光駆動型光触媒 Poly(heptazine imide)による高効率な光触媒活性のメカニズム

Mechanism of highly efficient photocatalytic performance of visible light-driven photocatalyst poly(heptazine imide)

東理大・理工物理 $^1$ , O(B)山口 愛佳 $^1$ , 瀬尾 豪一朗 $^1$ , 金井 要 $^1$ 

Department of Physics, Faculty of Science and Technology, Tokyo University of Science <sup>1</sup>

°Aika Yamaguchi¹, Goichiro Seo¹, Kaname Kanai¹

E-mail: 6218123@ed.tus.ac.jp

光触媒は、光エネルギーを使って水素を発生させたり、有機物を分解したりするなど様々な用途に応用できることから、近年大きな注目を集めている。二次元窒化炭素ポリマーの一つである poly(heptazine imide)(以下 PHI)は、エネルギーを蓄積して暗所でも光触媒活性を示すというユニークな性質を持つ $^1$ 。さらに PHI は、窒化炭素ポリマーの代表的存在である melon よりも高い水素発生速度を示し、助触媒なしで酸素を発生できることから、可視光応答型光触媒として応用が期待されている $^{2,3}$ 。しかし、なぜ PHI がこのような高い光触媒活性を持つのかについては、まだ不明な点が多い。

本研究では、PHI が高い光触媒活性を示す理由を追究するため、光触媒活性に影響を与えるいくつかの基本的な特性を melon と比較した。還元対象としていくつかの有機色素を用い、PHI と melon の吸着能力と活性能力を定量的に評価した結果、吸着能力と光触媒活性能力の相関が明らかになった。また、PHI の吸着能力の高さは、その誘電率の大きさに関係していることが示され、特に大きな永久双極子を持つ色素に対して高い吸着能力を示すことがわかった。本発表では、これらの結果をもとに、PHI が高い活性を示すメカニズムについて考察する。さらに、高効率な活性を示す光触媒を設計するための指針を提案する。

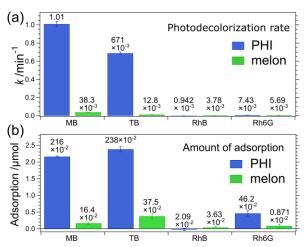


Figure 1. (a) Photodecolorization rate k of each dye by photocatalytic activity of PHI and melon. (b) Adsorption amount of each dye to PHI and melon.

- 1. Lau, V. W. hei *et al.* Dark Photocatalysis: Storage of Solar Energy in Carbon Nitride for Time-Delayed Hydrogen Generation. *Angewandte Chemie International Edition* **56**, (2017).
- 2. Lau, V. W. H. *et al.* Rational design of carbon nitride photocatalysts by identification of cyanamide defects as catalytically relevant sites. *Nature Communications* 7, (2016).
- 3. Savateev, A. *et al.* Potassium Poly(heptazine imides) from Aminotetrazoles: Shifting Band Gaps of Carbon Nitride-like Materials for More Efficient Solar Hydrogen and Oxygen Evolution. *ChemCatChem* **9**, 167–174 (2017).