

利用者氏名

○井深 遼太郎(1)

(1)創発物性科学研究センター 情報変換ソフトマター研究ユニット

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

光触媒は産業的にも学術的にも大変注目されている分野で現在も新しい材料が盛んに開発されている。その中でもグラフィティックカーボンナイトライド(GCN)と呼ばれる炭素窒素からなるポリマーが、金属元素なしに光触媒能を示すとして注目を集めてきた。しかしながら、未だその詳細なメカニズムは解明されたとは言えない。というのも GCN は溶媒に不溶の粉末としてか得られず構造も未だ完璧に決まっていない材料であり、正確な構造・物性相関の議論が出来ないからである。我々は GCN の部分構造を有機合成的に作り上げ、構造がしっかりと決まった材料で物性を調べ GCN の光触媒能を解析するという研究を最近立ち上げた。合成した材料を実験的、計算科学的に解析していくことでより深く機構を理解することを目的とする。

2. 具体的な利用内容、計算方法

TD-DFT 法による最高被占軌道(HOMO), 最低空軌道(LUMO)の可視化、ならびに三重項励起状態、一重項励起状態のエネルギー準位差、振動子強度の計算

3. 結果

昨年度、GCN の繰り返し構造であるヘプタジン・トリアジンからなる環状三量体に着目し計算を行っていた。しかしながら、そのどれも実際には光触媒能は実験では観測されなかった。本年度はより大きな構造を計算で評価し、どれ程大きな構造から光触媒特性が発現するか見積もった。その結果、GCN の物性は特定のサイズから不連続に変化することはなく、サイズと相関し徐々に変化していくことが計算より見積もられた。一方大きくなるにつれコンフォメーションの最適化が難しくなり、実際に水中では凝集構造を形成していることが示唆された。2量体の計算ではその集合様式により物性が大きく変化することから、現在凝集構造と物性の相関について見積もりを行うと同時に、実際にサンプルの合成・実験による検証を進めている。

4. まとめ

GCN の光触媒特性を理解するためのモデル化合物の計算を行なった。GCNの触媒特性は集合様式に大きく影響されることが示唆された。

5. 今後の計画・展望

GCN に関して徐々に知見が集まってきた。計算結果・実験結果の両面から考察を重ね、光触媒に関してしっかりとした論文をまとめる予定である

6. 利用がなかった場合の理由

