

光電荷輸送の整流化を可能にする錯体/共役系ポリマー複合光触媒デザイン

(京大院工¹・JST さきがけ²) ○中田 明伸^{1,2}

Design of Metal Complex/Conjugated Polymer Hybrid Photocatalysts via Manipulation of Photoinduced Charge Transportation (¹*Graduate School of Engineering, Kyoto University*, ²*PRESTO, JST*) ○Akinobu Nakada^{1,2}

π -conjugated polymers have recently attracted much attention as a promising candidate of efficient photocatalyst material, due to their semiconducting properties based on extended π -conjugation as well as to the great tunability of properties based on molecular design. Metal-based catalytic sites are frequently required for the polymer photocatalysts to facilitate molecular conversion reactions. Hence, the design principle, that maximizes the synergy between the conjugated skeleton and catalyst moiety, is strongly desired for achieving efficient photocatalytic reactions. We have designed a hybrid photocatalyst that drives CO_2 reduction and water oxidation by site-selectively introducing complex catalysts appropriate for the spatial separation of photogenerated charges in π -conjugated polymers.

Keywords : Photocatalyst; CO_2 reduction; Metal complex; Conjugated polymer

太陽光の主成分である可視光を有効利用し、水を電子源として効率よく二酸化炭素を還元する光触媒の実現が熱望されている。光触媒反応では、光触媒の光励起によって生成した電子と正孔が、それぞれ異なる触媒サイトへと移動し、基質の還元および酸化がそれぞれ進行する。そのため、水を電子源とした CO_2 還元を機能する光触媒の設計指針として、光励起による電荷分離を空間的に制御し、励起電子が生成する部位に CO_2 還元触媒を、一方で正孔が生成する部位に水の酸化触媒を、それぞれ位置/機能選択的に配置することができれば理想的である。

近年、光伝導性を有し、かつ分子軌道分布の設計柔軟性を有する π 共役系高分子が光触媒材料として注目されている。我々は、 π 共役系高分子の分子設計により光電荷分離状態を制御した上で、分子性触媒を位置/機能選択的に配置することで、酸化還元触媒サイトに効率よく励起キャリアを誘導可能な光触媒の開発を目指している (Fig. 1)。本発表では、(1) 適切な分子軌道エネルギー設計による CO_2 還元の高効率化²、および (2) 錯体触媒の位置/機能選択的な導入による CO_2 還元・水の酸化に対するバイファンクショナル光触媒としての機能発現³ に関して報告する。

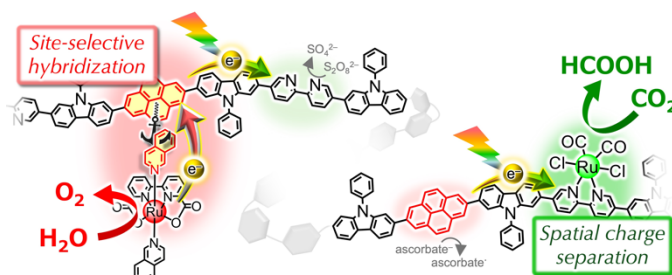


Fig. 1 Design principle of metal complex/conjugated polymer hybrid photocatalyst in this study.

1) A. Nakada and H.-C. Chang *et al.*, *J. Mater. Chem. A* **2022**, *10*, 19821.

2) K. Ishihara, A. Nakada, and R. Abe *et al.*, *J. Mater. Chem. A* **2024**, *12*, 30279.