Pb-S ネットワークを有する含ハロゲン三次元配位高分子の合成および物性評価

(関西学院大学理) ○郷原 柊太 ・秋吉 亮平・田中 大輔

Synthesis and Property Evaluation of Halogen-Containing Three-Dimensional Coordination Polymers with Pb-S Network (*School of Science, Kwansei Gakuin University*) oShuta Gobara, Ryohei Akiyoshi, Daisuke Tanaka

Sulfur-containing coordination polymers (S-CPs) are expected to be applied as visible light-driven photocatalysts due to their semiconductor properties and high carrier transfer characteristics. In a previous work, we reported [Pb(tadt)]_n (**KGF-9**), composed of Pb (II) ions and 1,3,4-thiadiazole-2,5-dithiol (H₂tadt), exhibits photocatalytic properties for CO₂ reduction.¹⁾ In this study, we synthesize a new semiconductor S-CP containing iodide ions. Lead halide and H₂tadt were reacted to synthesize new S-CPs. The single-crystal X-ray diffraction of the obtained plate-like crystals revealed that the novel S-CP had a three-dimensional structure with the composition [PbI(Htadt)]_n. We will discuss the crystal structure and the band structure of [PbI(Htadt)]_n.

Keywords: coordination polymer, lead(II), Halogen, semiconductive property

含硫黄配位高分子(S-CPs)は可視光吸収特性や高いキャリア移動特性などの半導体特性を示すことから可視光駆動型光触媒としての応用が期待されている。特に、Pb(II)イオンと 1,3,4-チアジアゾール-2,5-ジチオール $(H_2$ tadt)から構成される S-CP である $[Pb(tadt)]_n$ (**KGF-9**)は CO_2 還元光触媒として機能することが報告されている 1)。

本研究では、KGF-9 の合成時にヨウ素イオンを共存させることにより、構造中にヨウ素を取り込んだ新規半導体 S-CP の合成を試みた。実際の合成ではハロゲン化鉛と H_2 tadt を用いてソルボサーマル合成を実施した。得られたプレート状結晶について単結晶 X 線構造回折測定を行ったところ、合成した新規配位高分子は $[PbI(Htadt)]_n$ の組成を持つ三次元構造を有することが明らかとなった。発表当日は $[PbI(Htadt)]_n$ の結晶構造およびバンド構造について議論する。

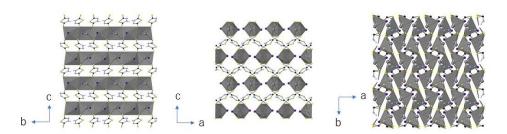


Figure 1. [PbI(Htadt)]』の単結晶構造

1)Y.Kamakura, K.Maeda, ACS Catal. 2022, 12, 10172 – 10178