

パラフェニレン誘導体 (X-OPP-n) の 光触媒活性に関する分子設計

田 中 昇*

A Molecular Design to Investigate the Paraphenylene Derivative as Effective Photocatalysis

Noboru TANAKA*

Abstract

As a clean energy, hydrogen fuel has become of major interest recently. We investigate paraphenylene derivative X-OPP-n as the effective photocatalysis by using molecular design method. As a result, it is shown that Li-OPP-4 is the most effective photocatalysis.

Keywords: photocatalysis, hydrogen fuel

1. はじめに

水素燃料は燃焼しても水となるためクリーンエネルギーとして着目されている。太陽光が関わる光触媒の利用によって水素燃料を作る方法がある。特に太陽光の約 43% を占める可視光線の利用が最も有効である。光触媒については様々な研究がなされてきてはいるが、まだ可視光線が利用できる光触媒の開発までに至っていない。光触媒等の新素材の開発は、従来、経験や試行錯誤的な実験に頼ることが多く、このために膨大な経費と労力を必要としてきたばかりではなく、経験則以外の研究の遂行はきわめて困難であった。最近の飛躍的なグラフィックコンピュータの発達によって、分子の立体構造や分子過程のモデリングができるようになり、分子レベルからの新素材の設計（分子設計）が可能となりつつある。

本研究では、水の分解機能を持つ光触媒、パラフェニレン誘導体 (X-OPP-n) に注目し、分

子設計によって吸収波長が 400 nm 以上でバンドギャップが 3 eV 以下の物性値を持つ誘導体を探った。

2. 理論・方法

2-1 光触媒¹⁾

分子内の電子は、光の吸収によって励起エネルギーレベルへ遷移し、発光によって励起状態から基底エネルギーレベルへ遷移する。光触媒は光の吸収によって電子の励起させる作用を利用する。触媒は反応系の活性化エネルギーを下げることににより反応速度を高める作用があるが、光触媒は活性化エネルギーを下げるだけでなく光励起状態における不安定な状態を利用し暗時では起こらないような反応も促進させる。本研究で取り上げるパラフェニレン OPP 誘導体 X-OPP-n (X は官能基, n はベンゼン環の個数) は、光によって励起した電子を利用し酸化・還元反応を起こさせる触媒である。X-OPP-n 誘導体は共役二重結合を形成しており、分子鎖内、分子間相互作用によって高分子半導体の性

平成 9 年 10 月 15 日受理

* 情報システム工学研究所・教授