



講師 / 博士 (工学)

竹下 達哉

Tatsuya Takeshita

学歴

福井工業大学 環境生命化学科、福井工業大学 工学研究科 応用理工学専攻 博士前期課程、
福井工業大学 工学研究科 応用理工学専攻 博士後期課程 (飛び級入学)

経歴

株式会社ワールドインテックR&D事業部 入社 (化学メーカーに配属)

相談・講演・共同研究に応じられるテーマ

色素増感太陽電池の作製と評価、Gaussianを用いた量子化学計算

メールアドレス

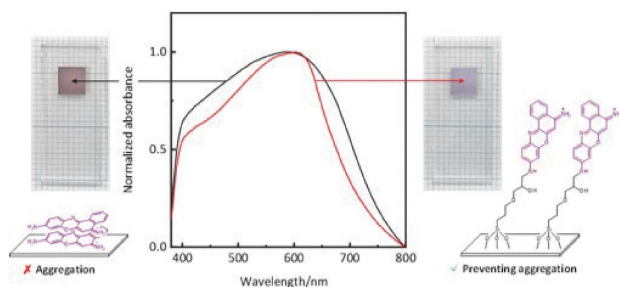
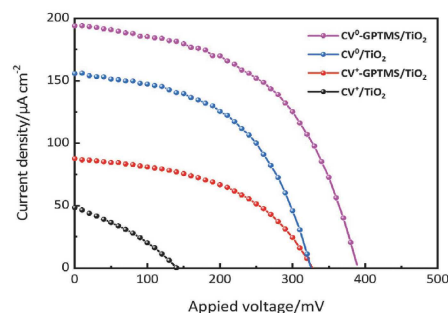
takeshita@fukui-ut.ac.jp

主な研究と特徴

「シランカップリング剤と結合した光増感色素を含む色素増感太陽電池に関する研究」

色素増感太陽電池(DSSC)は次世代太陽電池の一つであり、その光電変換効率の決定には、光励起された有機色素から酸化チタン(TiO_2)への電子注入が重要な鍵を握る。電子注入効率に影響を与える因子の一つには、 TiO_2 表面上で生じる有機色素の凝集が挙げられる。一般に、有機色素の凝集は励起状態の消光に基づく電子注入効率の低下を誘起する。本研究室では、 TiO_2 表面上で生じる有機色素の凝集を抑制する手法として、シランカップリング剤(SCAs)を用いた化学修飾に着目している。SCAsに基づく配向性の高い自己組織化単分子膜(SAM)を TiO_2 表面上に形成し、そのSAMと有機色素を結合させることで、有機色素の凝集が抑制されると考えられる。それに伴い電子注入効率が改善されると期待される。ここでは、3-Glycidyloxypropyltrimethoxysilane (GPTMS)と共有結合したクレシルバイオレット(CV^+)によって化学修飾された TiO_2 電極を含むDSSCについて検討した結果を示す。

CV^+ はカチオン性オキサジン色素であり、H-ダイマーやH-凝集種を形成する。 TiO_2 表面上における CV^+ の凝集に対するGPTMSの影響を確認するために、スライドガラス上に薄膜を調製した(図1)。 TiO_2 表面へのGPTMS処理に続いて CV^+ を吸着させた薄膜(CV^+ -GPTMS/ TiO_2)の色調は、GPTMS未処理の薄膜(CV^+/TiO_2)と比較して明らかに異なる。この結果より、GPTMSによって CV^+ の凝集が抑制されていると示唆された。この薄膜の全光線透過率スペクトル測定を行った結果、 CV^+/TiO_2 ではブロードなスペクトルが得られた一方で、 CV^+ -GPTMS/ TiO_2 では比較的鋭いスペクトルが観測された。溶液中における CV^+ の吸収スペクトルや文献に基づいて、 CV^+/TiO_2 における短波長側および長波長側のブロードな吸収帯は、それぞれH-凝集種およびJ-凝集種に起因していると確認された。 CV^+ -GPTMS/ TiO_2 では、これらのダイマーバンドが観測されなかったことから、GPTMSによって TiO_2 表面上における CV^+ の凝集が抑制されたと結論付けた。続いて、同様の薄膜を導電性ガラス基板上に調製後、白金電極および電解液を用いてDSSCを作製した。 CV^+/TiO_2 および CV^+ -GPTMS/ TiO_2 を含むDSSCの光電変換効率はそれぞれ0.002%および0.014%と算出され、GPTMS処理により光電変換効率が7倍に増大した。これは、上記で明らかにした CV^+ の凝集の抑制によって、短絡電流密度と開放端電圧が増大したことに起因する(図2)。したがって、 TiO_2 表面に化学修飾したGPTMSは、 CV^+ の凝集を抑制し、結果としてDSSCの光電変換効率の向上をもたらすと結論付けた。

図1. CV^+/TiO_2 (左)および CV^+ -GPTMS/ TiO_2 (右)の全光線透過率スペクトル図2. CV^+/TiO_2 電極(黒)および CV^+ -GPTMS/ TiO_2 電極(赤)を含むDSSCの電流密度-電圧特性(青と紫は、 CV^+ の脱プロトン体で増感した際のデータ)

今後の展望

TiO_2 表面に化学修飾したSCAsと有機色素を化学結合する戦略は、 TiO_2 表面上で生じる有機色素の凝集を抑制し、光電変換効率を向上させる手法となることが明らかとなった。しかしながら、本研究で用いた CV^+ では高い光電変換効率を得るに至らなかった。現在、従来のDSSCで使用されてきたメタルフリー有機色素に変更し、凝集に対するSCAsの効果や光電変換効率への影響について検討している。また、新規な光増感色素の開拓を目指して、量子化学計算ソフト(Gaussian)を用いた有機色素の物性予測等も検討している。

SCAsを用いたDSSCは、これまでも検討されていたが、その役割は共吸着剤 (有機色素とともに TiO_2 表面に吸着し、有機色素同士の凝集を抑制する材料) としての報告が中心であった。しかしながら、SCAsの最大の特徴は「有機材料と無機材料を連結する機能」であり、この機能を活かしたDSSCの報告例はまだ少ない。 TiO_2 表面に化学修飾したSCAsと有機色素を化学結合する戦略について今後も研究を進めていく。

所属学会

公益社団法人 日本化学会会員 (2013年 - 現在まで)
シクロデキストリン学会 (2014年 - 現在まで)
光化学協会 (2015年 - 現在まで)

主要論文・著書

T. Takeshita

"Computational Study of Cresyl Violet Covalently Attached to the Silane Coupling Agents: Application to TiO_2 -Based Photocatalysts and Dye-Sensitized Solar Cells"
Nanomaterials, 10 (2020) 1958.

T. Takeshita

"Effect of the TiO_2 surface modification with 3-glycidyloxypropyltrimethoxysilane on the aggregation of cresyl violet: Application to a dye-sensitized solar cell"
Materials Chemistry and Physics, 286 (2022) 126196.