



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) 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。本研究室では、配向性の高い自己組織化単分子膜を形成するシランカップリング剤 (SCAs) を TiO_2 表面上に化学修飾し、そのSCAsと有機色素を結合させることで、有機色素の凝集を制御できると期待している。

近年では、 TiO_2 表面上に化学修飾した3-アミノプロピルトリメトキシシランにスクアライン色素 (SQ2) を結合させると、SQ2のJ-二量化が生じることを見出した。これは、全光線透過率スペクトル測定によって観測された吸収帯などの実験結果から示唆された (図1)。実験結果とは対照的に、量子化学計算では、SQ2のH-二量化を支持する結果が得られた。これらの結果より、本研究で観測された J-二量化が、kashaの分子励起子理論とは異なる理論に起因する可能性が示唆された。

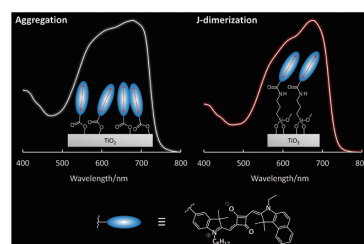


図1

今後の展望

多くの場合、有機色素の凝集はDSSCの光電変換の減少をもたらす。しかし、近年では、凝集種の形成によって光電変換特性が向上する例も報告され始めている。本研究で得られた知見が、前述のようなDSSCにおける進展の一助になることを期待する。

Department of Applied Chemistry and Food Science

Key words

Photocatalyst, Titanium oxide, Silane coupling agents, Dye-sensitized solar cell, Quantum chemical calculation



Doctor(Engineering) / Senior Lecturer

Tatsuya Takeshita

Education

Department of Environmental and Biological Chemistry, Fukui University of Technology, Department of Applied Science and Engineering, Environmental and Biological Chemistry Course, Fukui University of Technology (Master/Doctor Course; skip the master 2nd-grade)

Professional Background

WORLD INTEC CO., LTD. R&D (Assigned to chemical manufacturers)

Consultations, Lectures, and Collaborative Research Themes

Fabrication and characterization of dye-sensitized solar cell,
Quantum chemical calculation by using Gaussian

e-mail address

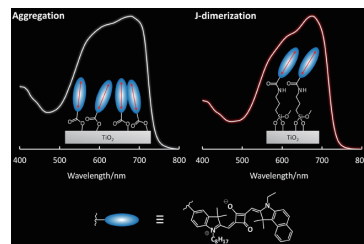
takeshita@fukui-ut.ac.jp



Main research themes and their characteristics

A study of dye-sensitized solar cell containing a photosensitizing dye covalently attached to the silane coupling agents

Recently, we reported the effects of a covalent attachment strategy using aminosilane coupling agents (APTMS) on squaraine dye (SQ2) aggregation on a titanium oxide (TiO_2) surface. In addition, we discuss the effect of APTMS on the photovoltaic conversion of dye-sensitized solar cells. According to the total transmittance spectrum measurements, SQ2 formed dimers and H- and J-aggregated species on the TiO_2 surface. However, the SQ2 covalently attached to the TiO_2 surface via APTMS (SQ2-APTMS/ TiO_2) exhibited a relatively narrow absorption band, which may be due to the J-dimer. In contrast, the intensities of the shoulder bands of the H-dimers and H-aggregated species decreased. The J-dimerization of SQ2 was analyzed based on the geometric structures and transition dipole moments obtained from quantum chemical calculations. Notably, quantum chemical calculations supported the formation of H-dimers, which is in contrast to the experimental results. Thus, the narrow absorption bands of SQ2-APTMS/ TiO_2 observed in this study can be attributed to a different model from molecular excitation theory.



Future prospects

Our group hopes that this study will contribute to the development of DSSCs with dye aggregates that enhance photovoltaic performance.