

環境食品応用化学科

キーワード

光触媒、酸化チタン、自己組織化、シランカップリング剤、色素増感太陽電池



講師 / 博士 (工学)

竹下 達哉

Tatsuya Takeshita

学歴

福井工業大学 環境生命科学科、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」

シランカップリング剤 (SCAs) やホスホン酸誘導体、アルカンチオールなどは、表面改質剤として機能することが知られており、固体表面に接着性や撥水性などを付与する。本研究では、前述のような材料を用いた酸化チタン (TiO₂) 表面の修飾に伴う光触媒活性の向上や機能性の付与などを検討している。ここでは、TiO₂を材料として含む色素増感太陽電池 (DSSC) にSCAsを用いた研究について述べる (図1)。この研究では、導電性ガラス基板上に堆積させたTiO₂の表面上にSCAsに基づく自己組織化単分子膜 (Self-Assembled Monolayers; SAMs) を形成し、そのSCAsの末端官能基と光増感色素を結合させる。これは、秩序だった構造を持つSAMsを介して光増感色素の配向・配列を制御すること、およびそれに伴ってDSSCの光電変換効率を増大させることを目的としている。本研究では、上記のようなDSSCの作製と評価に加えて、SCAsと結合した光増感色素がDSSCの材料として機能することを確認するために量子化学計算も実施している。図2 (左) はGaussianを用いて得られた、SCAsと結合した光増感色素の分子軌道とエネルギーダイアグラムを示している。ここでは、光増感色素として、以前に報告したクレシルバイオレット (CV₀) を示している。分子軌道計算によって得られた最低空軌道 (lowest unoccupied molecular orbital; LUMO) レベルはTiO₂の伝導体下端のエネルギー (-4.0 eV) よりも高く、エネルギー的に電子注入が可能であることが確認された。また、最高被占軌道 (highest occupied molecular orbital; HOMO) レベルは、DSSCの電解質として一般的に用いられるヨウ化イオンのレドックスポテンシャル (-4.8 eV) よりも低いため、電子注入により酸化されたCV₀が還元される可能性が示唆された。図2 (右) は、CV₀およびSCAsと結合したCV₀の吸収スペクトルを示している。CV₀の吸収極大波長は520 nm付近に観測された (黒のスペクトル)。また、振動子強度から光捕集効率 (LHE) は0.83と算出された。SCAsと結合したCV₀においては、吸収極大波長の長波長シフトおよびLHEの増大が観測され、SCAsによってCV₀の物性が改善されることが確認された (赤のスペクトル)。以上の結果よりSCAsと結合したCV₀がDSSCの光増感色素として機能する可能性が見出された。今後は、Gaussianを用いたSCAsと結合した光増感色素の計算を続けていくとともに、SDGsの目標7の達成に向けて、その光増感色素を用いたDSSCの作製と評価について、さらに研究を進めていく予定である。

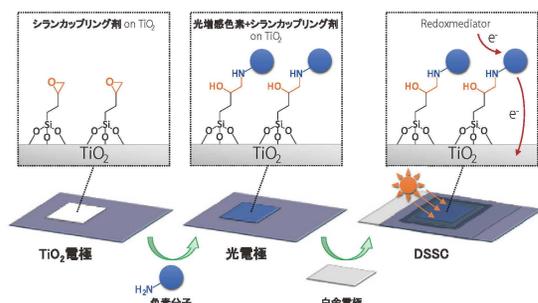


図1. シランカップリングと結合した光増感色素を含むDSSC (エポキシ基を有するSCAとアミノ基を有する光増感色素を用いた例)

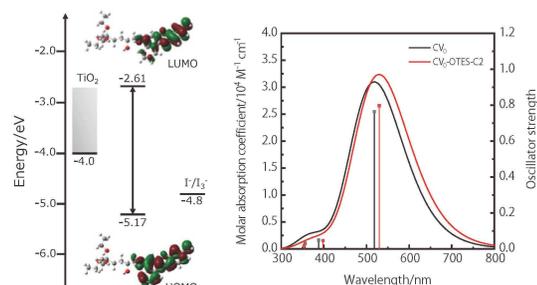


図2. (左) PCPM-B3LYP/6-31G*レベルで計算されたSCAsと結合したCV₀の分子軌道とエネルギーダイアグラム: (右) PCPM-TD-B3LYP/6-31+G*レベルで計算されたCV₀およびSCAsと結合したCV₀の吸収スペクトルおよび振動子強度 (縦線)

今後の展望

SCAsを用いたDSSCは、これまでも検討されてきたが、その役割は共吸着剤(光増感色素とともにTiO₂表面に吸着し、光増感色素同士の会合を抑制する材料)としての報告が中心であった(S. Nakanishi and Qi Feng et al., ACS Appl. Mater. Interfaces, 2014, 6, 8, 5818-5826.) (M. Hanaya et al., Chem. Commun., 2015, 51, 158894-15897.)。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。本研究は、DSSCの性能に与えるSCAsの効果を明らかにし、新たな価値を生むと予想される。また、Gaussianを用いたSCAsと結合した光増感色素の計算は、従来とは異なる新規な光増感色素の開拓につながる可能性が期待できる。DSSCの光電変換効率を増大させる方法の1つとして、SCAsによるTiO₂表面上への光増感色素の固定化が有用であることを明らかにすることを今後の展望とする。

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 TiO₂-Based Photocatalysts and Dye-Sensitized Solar Cells" Nanomaterials, 10 (2020) 1958.

T. Takeshita

"DFT and TD-DFT Study on Azobenzene-Based Dye Covalently Attached to Silane Coupling Agents: Toward Dye-Sensitized TiO₂ Catalyst and Dye-Sensitized Solar Cell Applications" ChemistrySelect, 6 (2021) 6011-6018.