

## 量子化学計算によるアゾベンゼン色素ーシランカップリング剤の物性予測

(福井工大) ○竹下 達哉

Computational Study of Azobenzene-based dye Covalently Attached to the Silane Coupling Agents (Faculty of *Environmental and Information Sciences, Fukui University of Technology*)  
○Tatsuya Takeshita

In this study, computational investigation was carried out on azobenzene-based dye covalently attached to silane coupling agents (SCAs). The potential of azobenzene-based dye covalently attached to SCAs (Azo-SCAs) to act as a photosensitizing dye was analyzed. Time-dependent density functional theory and frontier molecular orbital calculations revealed that Azo-SCAs has excellent optical properties and electron injection ability. These findings enhance the understanding of the covalent attachment strategy using SCAs and contribute to improving photocatalytic activity of titanium dioxide-based photocatalysts and photovoltaic conversion efficiency of dye-sensitized solar cells.

**Keywords :** Azobenzene; Silane Coupling Agents; Titanium Dioxide; Dye-Sensitized Solar Cell; DFT calculation

シランカップリング剤(SCAs)は異種材料間の接着や表面改質などに使用される材料であり、酸化チタン( $\text{TiO}_2$ )の光触媒活性や色素増感太陽電池(DSSC)の耐久性の向上などにも用いられている<sup>1)</sup>。本研究では、オキシラン基を有する SCAs (OTES)と共有結合した 4-[(*E*)-(4-methoxyphenyl)diazenyl]-1-naphthalenamine (*E*-MPDNA-OTES)が  $\text{TiO}_2$  や DSSC の光増感色素として機能する可能性を明らかにするために、量子化学計算による物性予測を実行した。

$\text{TiO}_2$  クラスタ上における *E*-MPDNA-OTES の HOMO および LUMO を Fig. 1 に示す。HOMO は *E*-MPDNA 全体と第二級アミン部位に分布していた。一方で、LUMO はシリルアンカーと結合した Ti 原子周辺に分布していることが確認された。この結果より、*E*-MPDNA から  $\text{TiO}_2$  への電子注入が生じることが明らかとなった。すなわち、*E*-MPDNA-OTES が  $\text{TiO}_2$  や DSSC の光増感色素として機能することが明らかとなった。

当日は、*E*-MPDNA-OTES のコンフォーマー、紫外可視吸収スペクトル、分子軌道、*Z*-MPDNA-OTES の物性などについても合わせて報告する。

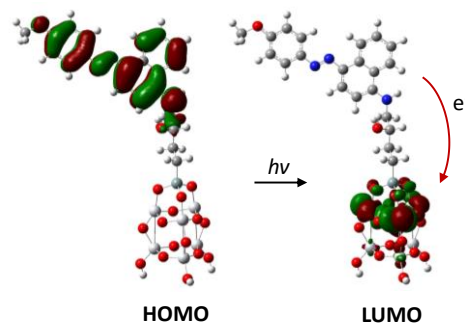


Fig. 1 HOMO and LUMO of *E*-MPDNA-OTES adsorbed on the  $\text{TiO}_2$  cluster using CPCM in EtOH. Calculations were carried out at the B3LYP/6-31G\*/LanL2DZ level of theory. Surface isovalue: 0.02 e/bohr<sup>3</sup>.

- 1) Luitel, T.; Zamborini, F.P. Covalent Modification of Photoanodes for Stable Dye-Sensitized Solar Cells. *Langmuir* **2013**, *29*, 13582-13594.