

酸化チタンナノチューブ内壁面の色素分子の吸着過程の 赤外分光その場観測

In-situ infrared spectroscopic monitoring of adsorption of dye molecules on the inner
walls of TiO₂ nanotubes

東北大通研 [○]山田 夏輝, 但木 大介, 馬 騰, 庭野 道夫

Research Institute of Electrical Communication, Tohoku Univ.

[○]Natsuki Yamada, Daisuke Tadaki, Teng Ma, and Michio Niwano

E-mail: niwano@riec.tohoku.ac.jp

はじめに 酸化チタンを用いた色素増感型太陽電池は低コストで簡便な次世代太陽電池の一つとして研究開発が進んでいる。この太陽電池の性能向上のために必要な課題の一つが酸化チタン表面の色素の化学吸着状態での被覆率の増大である。一方、我々は、色素増感太陽電池の変換効率の向上のために、アノードとして、チタニア微粒子の代わりに、表面積が大きく、高い電子移動度を持つ酸化チタン(TiO₂)ナノチューブ薄膜を用いることを検討してきている。そこで我々は、TiO₂ ナノチューブ薄膜のナノチューブ内壁表面における色素分子の吸着状態・吸着過程を、多重内部反射型赤外分光法 (MIR-IRAS) でその場観察し、特に、酸化チタン表面上の色素分子の化学吸着状態の存在の確認を目指した。

実験と結果 MIR-IRAS 用に端面を 45° に研磨した Si プリズムを用意し、その上に DC マグネトロンスパッタを用いて 200 nm の Ti 薄膜を堆積させた。Ti 薄膜を電解液中で 40 V の印加電圧で陽極酸化しプリズム上に TiO₂ ナノチューブを形成した。その後、酸素雰囲気中で 450 °C の熱処理を行うことによりアナターゼ相に結晶化した。色素として N719 を用い、TiO₂ ナノチューブ薄膜付の Si プリズムを装着した溶液セルに N719 色素溶液を注入し、色素吸着の様子を MIR-IRAS でその場観察した。色素溶液は N719 色素 0.03 mM であり、溶媒は acetonitrile と tert-butyl-alcohol を体積比 1:1 で混合した溶液を使用した。得られた赤外吸収スペクトルの時間変化を Fig. 1 に示す。図の下部に、第一原理計算結果を示す。上段が酸化チタン表面に色素分子が化学吸着した場合の計算スペクトルで、下段が色素分子のスペクトルである。これらのスペクトルの比較から、1384 cm⁻¹ に現れているピークが、-COOH 基を介して、色素が酸化チタン表面に化学吸着した状態に対応すると考えられる。また、その他のピークは、化学吸着もしくは物理吸着した色素によるものと示唆される。

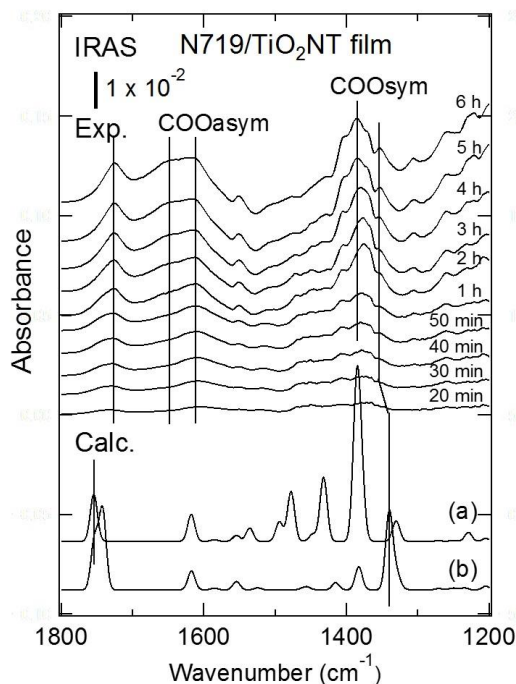


Fig. 1: 測定した IR スペクトル
と第一原理計算の結果