

氏名	AJENDRA KUMAR VATS (インド)
学位の種類	博士 (工学)
学位記番号	生工博甲第388号
学位授与の日付	令和3年 3月 25日
学位授与の条件	学位規則第4条第1項該当
学位論文題目	Investigation of NIR Dyes with Varying Anchoring Groups Aiming Towards Improved Stability and Efficiency by Rational Molecular Design (合理的な分子設計による安定性と効率向上を目指した 様々なアンカー基を用いた近赤外色素の研究)
論文審査委員会	委員長 教授 馬 廷 麗 准教授 パンディ シャム スディル " 加 藤 珠 樹 教授 尾 坂 格

学 位 論 文 内 容 の 要 旨

色素増感太陽電池は、費用対効果、審美的な色、および低光強度下での非常に優れた光変換効率により、次世代太陽電池として注目されているが、実用化には、変換効率と安定性のさらなる向上が不可欠である。筆者は、これらの課題を解決するため、本研究では増感剤として、様々なアンカー基と近赤外波長領域での強い光吸収を備えた新しい増感色素の設計と合成、および色素増感太陽電池の増感剤としての応用を進めている。色素のアンカー基の性質と酸化チタン (TiO_2) の結合強度の影響に関する詳細な調査を行い、安定性と効率向上両方の観点で有効となる新しい増感剤の合理的な分子設計とそれらの色素増感太陽電池への応用を目的としている。

第1章では、次世代太陽電池の背景、スコープと必要性に関して記載している。増感色素分子のアンカー基の性質は、電子注入を制御することによって変換効率を制御するだけでなく、結合の強さを制御することによってデバイスの安定性にも影響を与えることはよく知られている。また、色素増感太陽電池に用いられる増感色素のアンカー基の性質と安定性及び効率向上、高効率化のために近赤外色素の必要性、色素増感太陽電池の構成、動作原理、および現在の問題点とその解決方法及び研究目的を述べている。

第2章では、本研究に使用している新たな近赤外色素の設計のために利用した分子軌道計算の手法、近赤外色素合成及び物性評価、表面処理、 TiO_2 表面上の色素の吸着速度及び吸着強度、色素増感太陽電池の作製方法、光電変換効率性能の評価方法を記載している。

第3章では、色素増感太陽電池へよく使用されるヨウ素系の酸化還元電解質や酸化チ

タンに適した様々なアンカー基を用いた新たな近赤外色素の合理的な設計のために、Gaussian G09 プログラムによる分子軌道計算手法で、種々の色素について電子物性を詳細に調査した。計算により、色素のアンカー基の種類を変えて色素の吸収波長、エネルギー準位、エネルギーバンドギャップを求めたことを記載している。アンカー基の異なる非対称スクアリン色素を用いて、HOMO のエネルギーと吸収極大(λ_{\max})値の間には強い相関があり、理論的に予測された値と実験的に観測された値の差は、 λ_{\max} で ± 0.06 eV、HOMO エネルギー準位で ± 0.05 eV と非常に小さかったことを報告している。このような優れた相関は、新規機能性材料特に増感色素の設計と開発の理論的予測の信頼性を検証している。

第4章では近赤外色素の代表として様々なアンカー基を用いたスクアリン色素の設計、合成及び物性評価と色素増感太陽電池への応用を行った。TiO₂ 表面上に色素吸着挙動に対するアンカー基の性質と、結合強度及び光電変換への影響について詳細に議論している。スクアリン色素の中で、ホスホン酸アンカー基を有する色素が TiO₂ に対して最も強い結合を示し、一方、シアノアクリル酸アンカー基が最高の光電変換効率を示したと結論している。高い色素吸着量、非常に高い結合強度、および好ましいエネルギーカスケードにもかかわらず、ホスホン酸アンカー基を有する色素の不十分な光電変換効率の理由を理論的分子軌道計算によって、明らかにしている。

第5章では、理論的と実験的アプローチを組み合わせ合わせた合理的な分子設計により、ホスホン酸アンカー基を用いた増感色素の光電変換におけるボトルネックを解決することに取り組んでいる。特に、ホスホン酸アンカー基に焦点を当てて、非対称スクアリン色素を用いて、色素の会合防止および電子求引性と異なる役割をもつ二つのアンカー基の導入など様々なアプローチで色素分子の設計、合成と物性評価おこなった。ホスホン酸とアクリル酸二つのアンカー基を用いた新しく設計された近赤外増感色素 (SQ-162) は、ホスホン酸のみアンカー基を用いた色素 (SQ-143) の変換効率悪化の問題を改善し、TiO₂ 表面で最高の結合強度を示した。この結合強度は、シアノアクリル酸アンカー基を用いた色素 (SQ-140) よりも 550 倍以上強力あることを報告している。

第6章では、論文全体の総括と、本研究の今後の展望について記載している。

学位論文審査の結果の要旨

本論文に関し、調査委員から理論的分子軌道計算、近赤外色素の設計、色素の吸着と脱着速度、アンカー基の性質と光電変換効率の関係と研究の新たな展開などについて質問されたが、いずれも筆者から満足（明確）な回答が得られた。

また、公聴会においても、多数の出席者があり、種々の質問がなされたが、いずれも著者の説明によって質問者の理解が得られた。

以上より、論文審査及び最終試験の結果に基づき、論文審査委員会において慎重に審査した結果、本論文が博士（工学）の学位に十分値するものであると判断した。