

化学2 発表

二酸化チタン

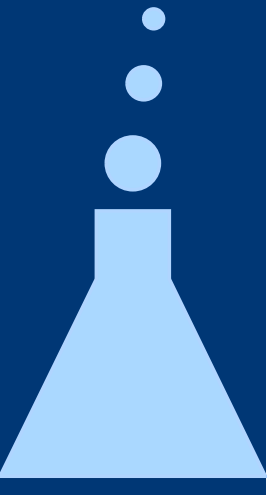
～世界を支える万能な触媒～

2年 エレクトロニクスコース
菊川 颯太



内容(Contents)

- § 1：結晶の基礎知識
- § 2：二酸化チタン結晶の物性
- § 3：二酸化チタンの利用



§ 1

結晶の基礎知識

～電気電子材料 1 の復習も兼ねて～

結晶とは...？

不規則に並べばアモルファス

結晶

原子・分子などの粒子が規則的に並んだもの



NaCl



AlKSO₄ · 12H₂O



CuSO₄ · 5H₂O

格子とは...？

格子（結晶格子）

結晶中の粒子がどのように並んでいるかを示したもののざっくり言えば枠。この中に粒子が並ぶ。

単位格子

格子のうち繰り返しの最小単位であるもの

金属結晶における単位格子のおもな種類

面心立方格子(fcc)

各頂点および各面の中心に原子が位置する格子

体心立方格子(bcc)

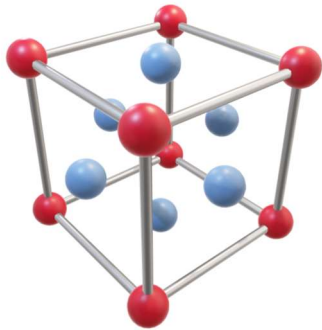
各頂点および格子の中心に原子が位置する格子

六方最密構造

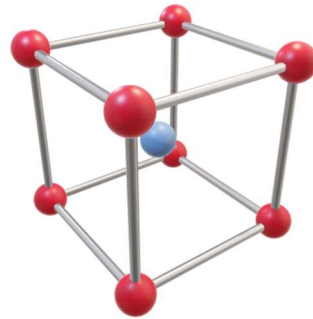
正六角柱の各頂点および格子の中心に原子が位置する構造

図で表すと...

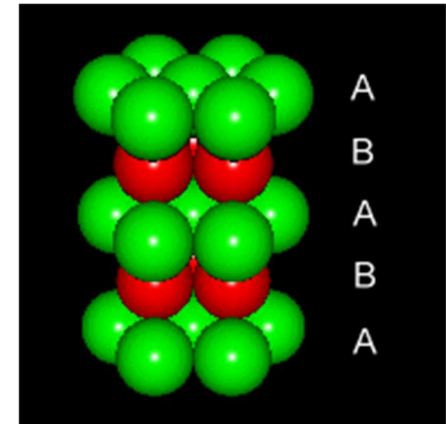
面心立方格子



体心立方格子



六方最密構造



大切な考え方～価電子帯と伝導帯～

価電子帯

価電子が存在している電子殻。

すなわち、電子が存在する最も外側の電子殻。

絶縁体や半導体では、電子がたくさん存在して、身動きが自由に取れない。

伝導帯

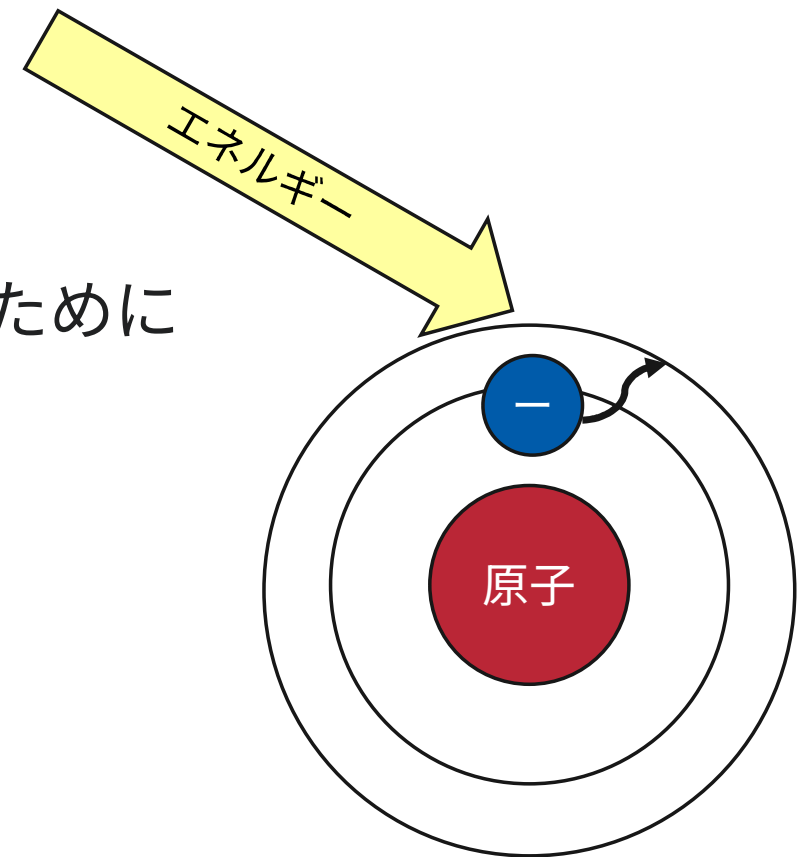
電子が少し存在している（全く存在していない）電子殻。

電子は自由に身動きが取れる。

大切な考え方～バンドギャップ～

バンドギャップ

電子が、価電子帯から伝導帯に移動するために必要なエネルギーのこと。



バンドギャップの単位

電子ボルト (eV)

電子1個に電位を与えたときに、電子が得る運動エネルギー。

電子1個に1Vの電位（電気的なエネルギー）を与えたときの電子がもつエネルギーを1eVと定める。


$$1\text{eV} = 1.602 \times 10^{-19}\text{J}$$

【補足】

電位を与えると、電場が発生する。すなわち電荷に力が及ぼされる。

1eV = 1.602×10^{-19} J の導出


$$1\text{eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{J}$$

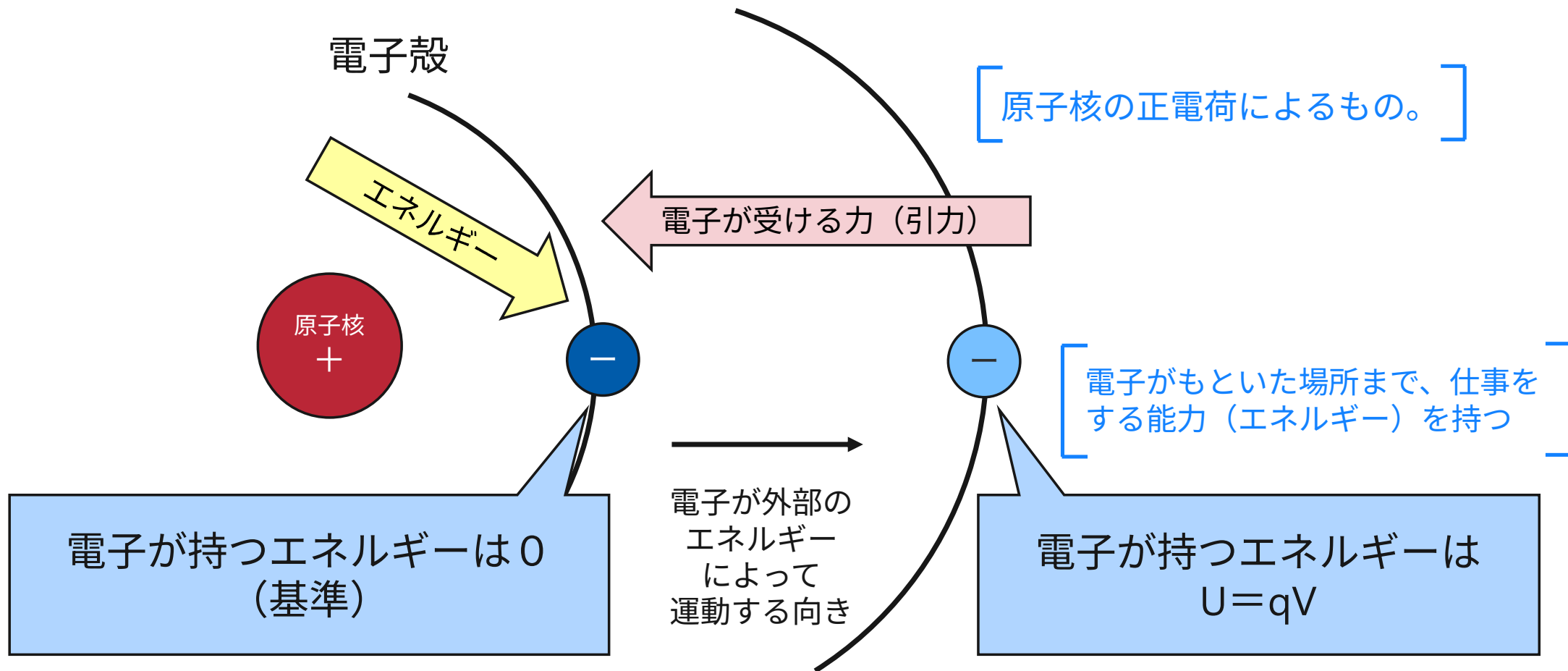
電子ボルト (eV) の定義より、

$U = qV$ を用いると電子一個が持つエネルギーは、

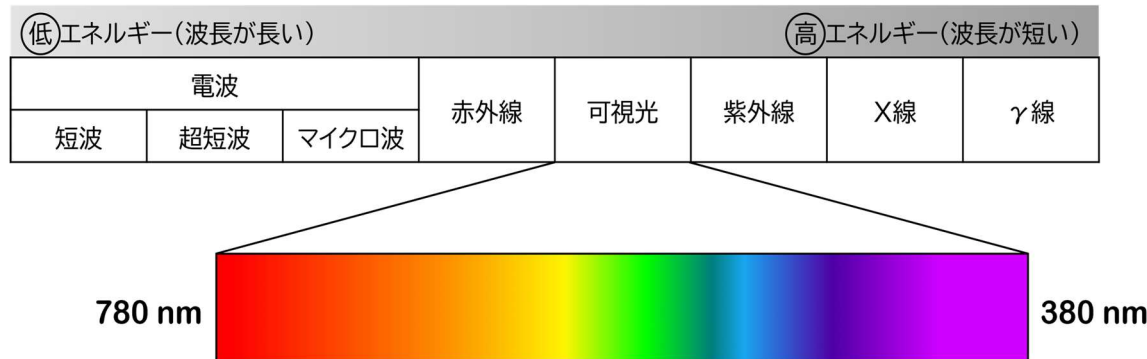
$$\begin{aligned} U &= 1.602 \times 10^{-19} \times 1 \\ &= 1.602 \times 10^{-19} \text{ J} \end{aligned}$$

【電気素量は $\pm 1.602 \times 10^{-19} \text{C}$ である。】

参考の図「実際の原子では...?」



光触媒の特性



- バンドギャップの大きさ
 - ...小さいと可視光で電子が励起
 - 大きいと紫外線で電子が励起
- 表面積
 - ...大きいほうが反応が起こりやすい
(光が当たる面積が大きくなる)

§ 2

二酸化チタン結晶の物性

結晶のおもな種類は2種類！

二酸化チタンとは

二酸化チタン (TiO₂)

チタン (Ti) と酸素 (O) の原子が1：2の割合で結びついた物質
共有結合による結晶を形成 (無機高分子化合物)
ちゃんと言えば、酸化チタン(IV)。

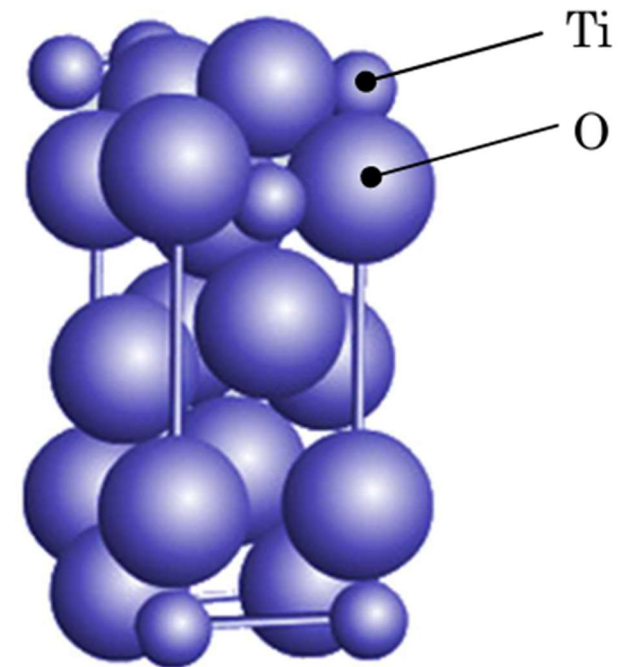
二酸化チタンの構造は...？

工業的に用いられているものは以下の2つ

- ・ アナターゼ型
- ・ ルチル型

アナターゼ型

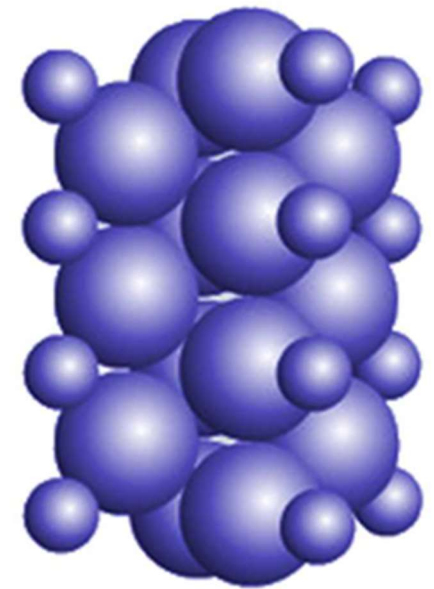
- 低温で焼成すると形成
- やや安定
- バンドギャップ...3.2eV
- 表面積が大きい（ルチルより）



ルチル型

- ・ 高温で焼成すると生成
 - ・ 非常に安定
 - ・ バンドギャップ...3.0eV
 - ・ 光の屈折率が高い
- 無機材料でNo.1!

反対に、光触媒には向かない。
(光を反射・表面積が狭い)



大きい粒子がO
小さい粒子がTi

§ 3

二酸化チタンの利用

顔料・触媒など、利用例は多数あり。

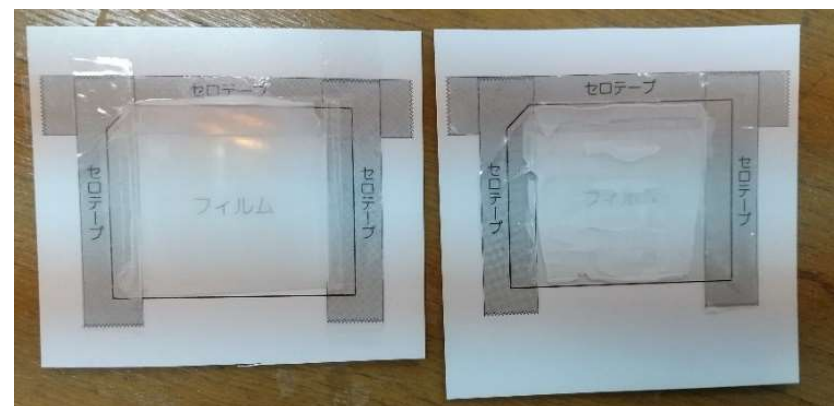
二酸化チタンの用途

- 顔料
- …白色の塗料として使用

- 触媒

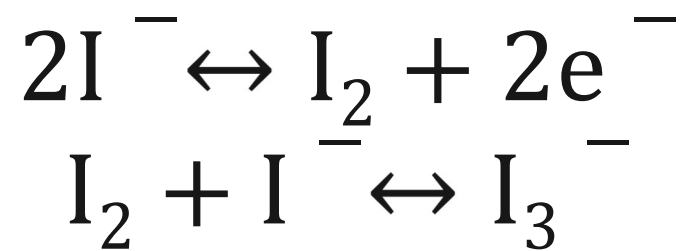
- 光
- 酸
- 塩基
- 酸化
- 還元

実験実習でも使用

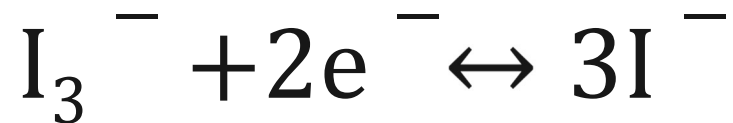


色素増感太陽電池

負極

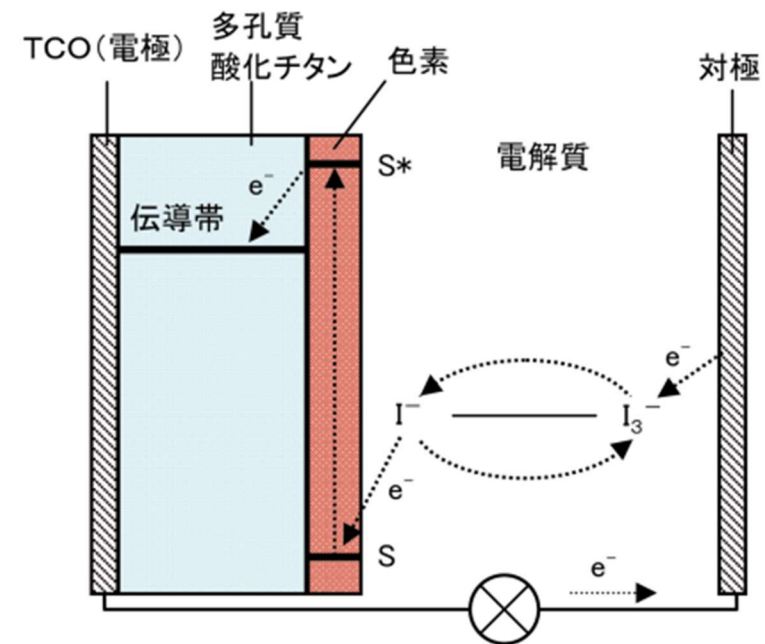


正極



注) 最初の反応以外は平衡の反応

光エネルギーによってTiO₂の電子が励起
→反応が発生



さいごに



参考文献（いずれも2024/10/13閲覧）

論文

- ・二酸化チタンの触媒特性 (J-STAGE)

https://www.jstage.jst.go.jp/article/shikizai1937/72/10/72_633/_pdf/-char/ja

- ・二酸化チタン光触媒の研究開発動向 (J-STAGE)

https://www.jstage.jst.go.jp/article/mukimate2000/11/313/11_313_347/_pdf

- ・光触媒酸化チタンの基礎と応用 (東北大学)

https://polar.imr.tohoku.ac.jp/_userdata/photocat2010.pdf

- ・光触媒の原理 (北海道大学触媒化学研究センター) [個人的一押し文献]

<https://www.kuba.jp/syoseki/PDF/3235.pdf>

- ・酸化チタン（ナノ酸化チタンを含む）の安全性等について (日本酸化チタン工業会)

<https://www.sankatitan.org/cms/wp-content/uploads/2022/08/2016.12ansen.pdf>

- ・色素増感太陽電池 (SHARP)

https://corporate.jp.sharp/rd/35/pdf/100_08_A4.pdf

サイト

- ・二酸化チタン (TiO₂) : 原点にして頂点の光触媒材料 (固体の物理学)

<https://solid-mater.com/entry/tio2#%EF%BC%92%E5%85%89%E8%A7%A6%E5%AA%92>

このスライドについて

作成日：2024/11/14

作成者：菊川颯太

不明点・疑義点等は菊川まで