

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について
- § 3：重要な単語
- § 4：【超短編】光触媒のたとえ話
- § 5：色素増感太陽電池

§ 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)

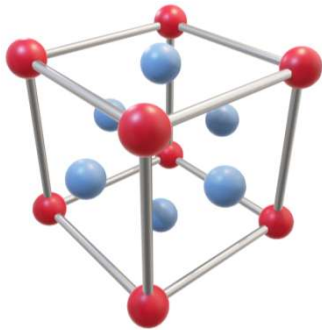
各頂点および格子の中心に原子が位置する格子

六方最密構造

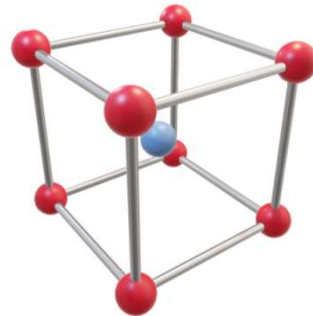
正六角柱の各頂点および格子の中心に原子が位置する構造

図で表すと...

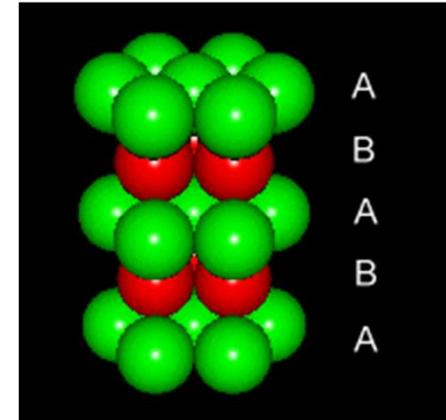
面心立方格子



体心立方格子



六方最密構造



§ 2

二酸化チタン結晶について

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)。

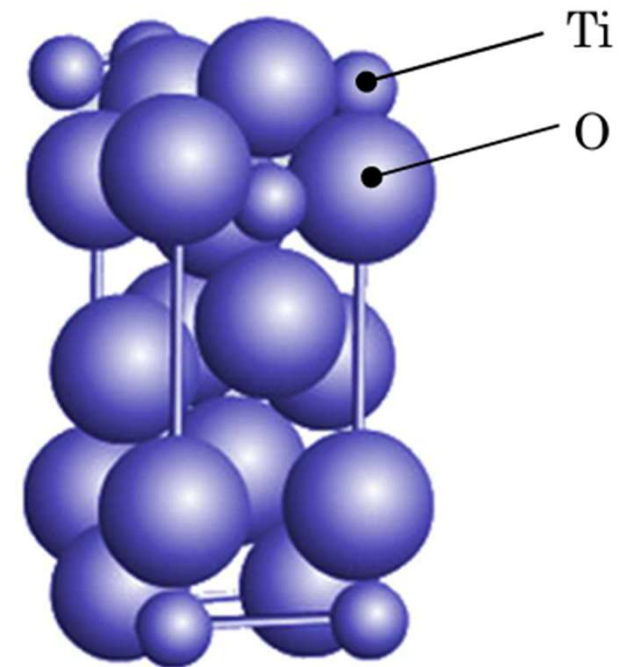
二酸化チタンの構造は...？

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

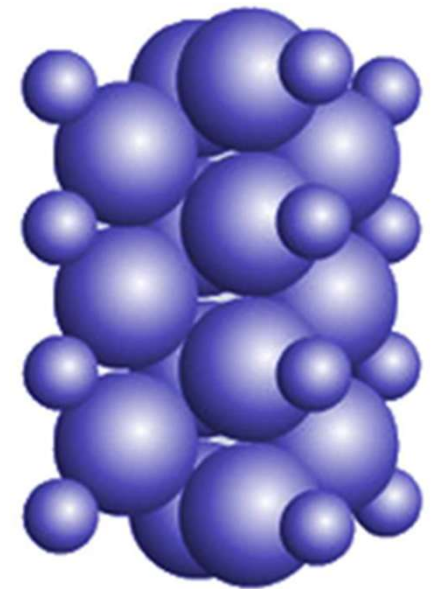
- 低温で焼成すると形成
- やや安定
- バンドギャップ...3.2eV
- 表面積が大きい（ルチルより）



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!

光触媒には向かない。
(表面積が狭い)



大きい粒子がO
小さい粒子がTi

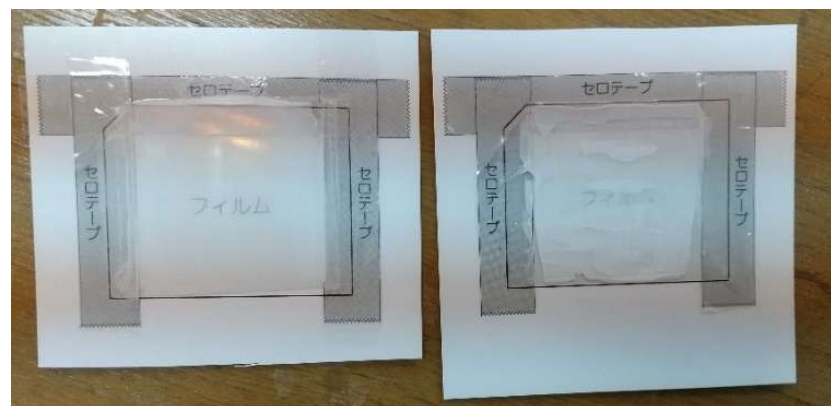
二酸化チタンの用途

- 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



§ 3

重要な単語



大切な考え方～価電子帯と伝導帯～

価電子帯

絶縁体・半導体の場合
のみ考える。

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。
電子がたくさん存在して、身動きが自由に取れない。

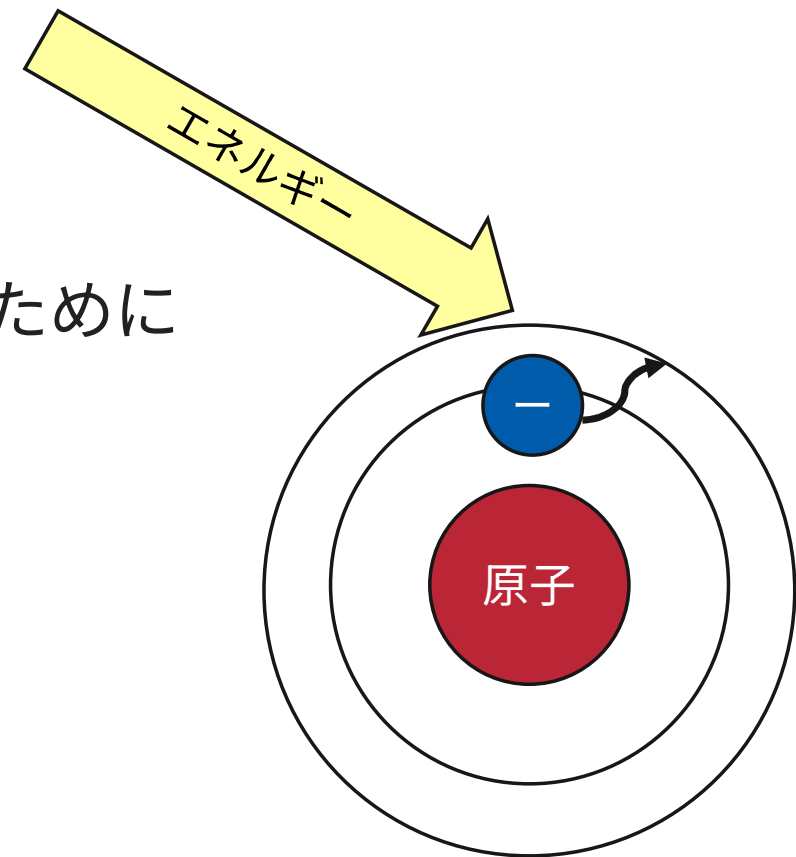
伝導帯

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


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

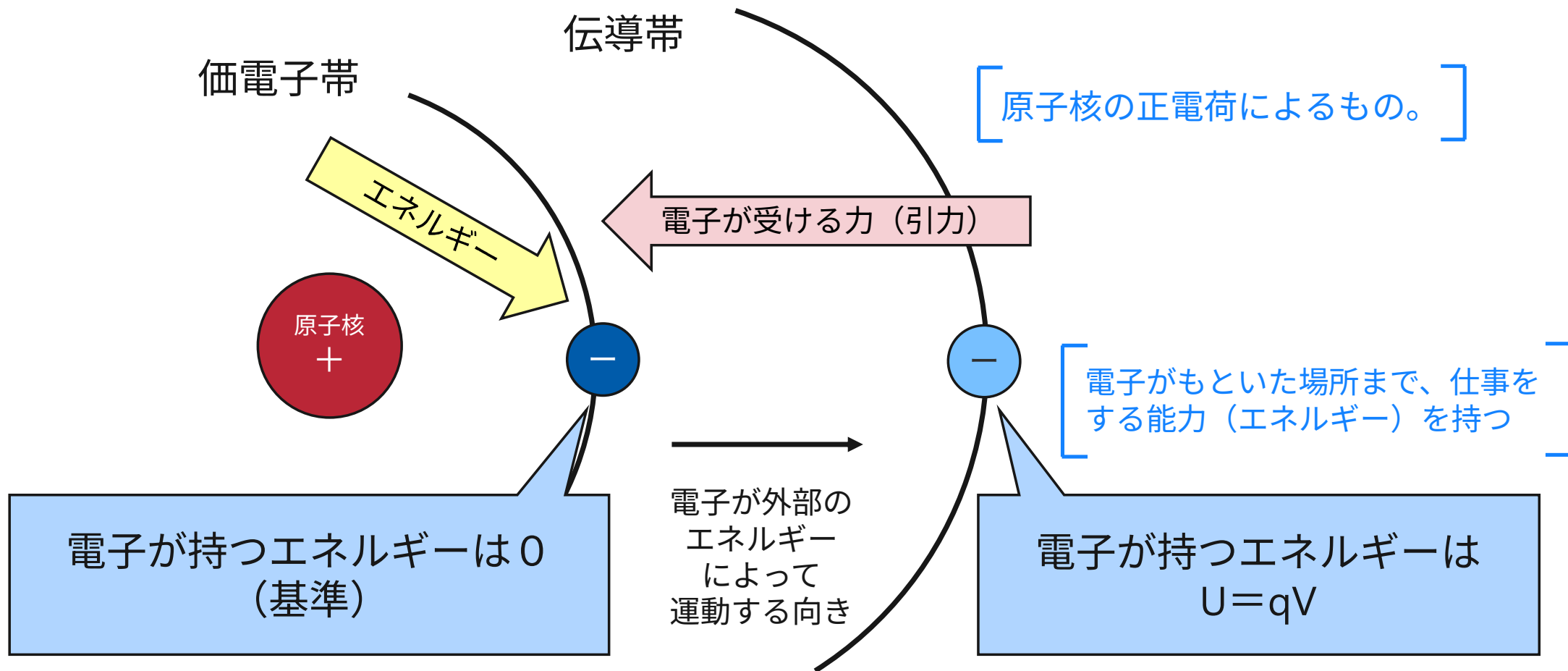
電子ボルト (eV) の定義より、

$U = qV$ 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...?」

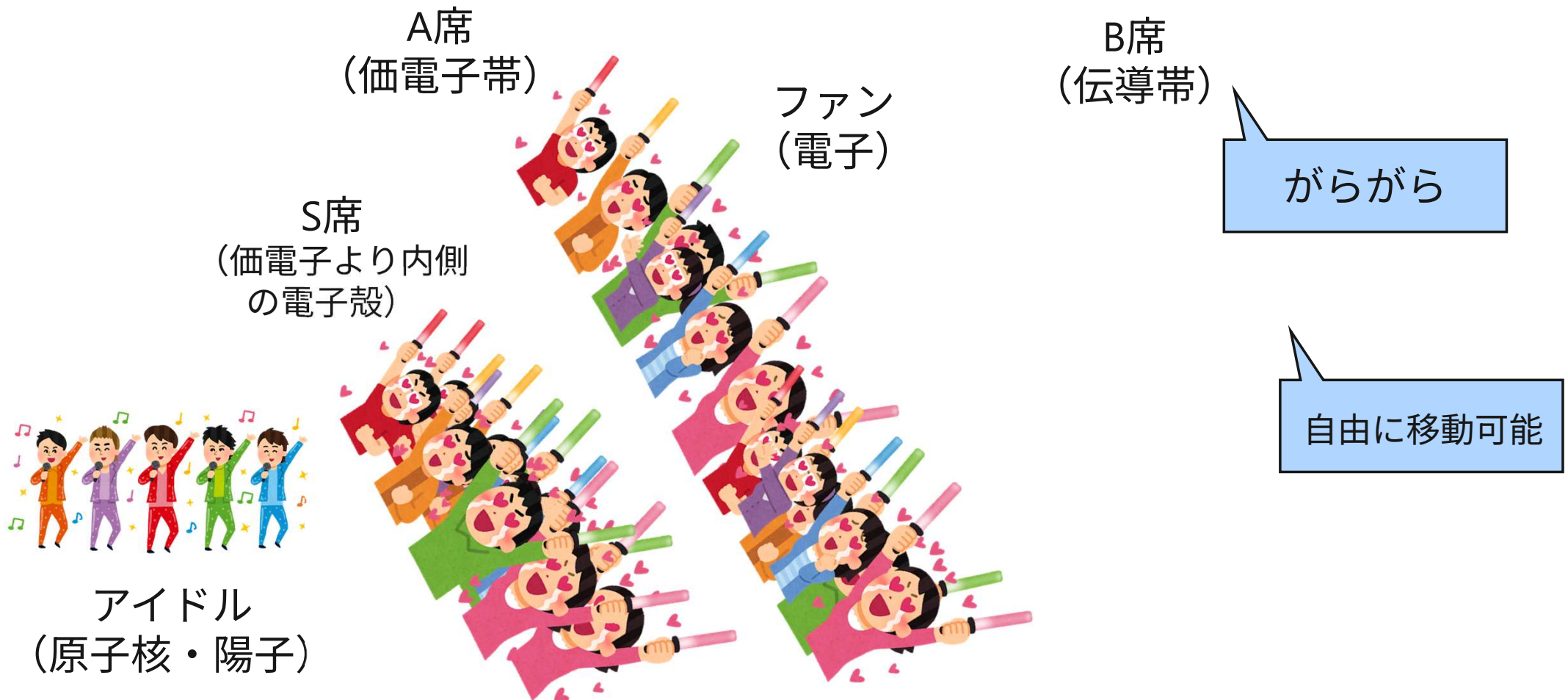


§ 4

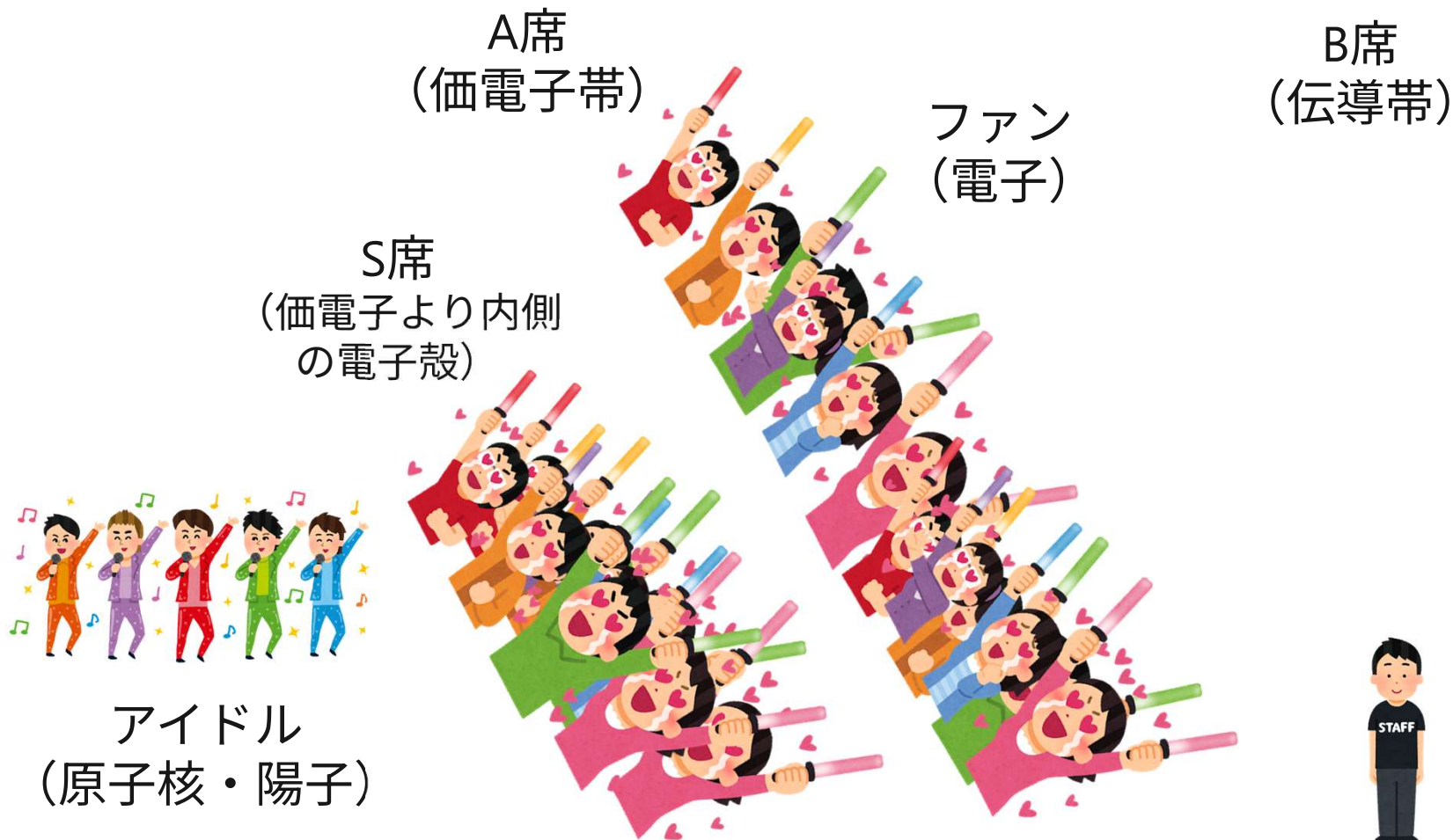
【超短編】 光触媒のたとえ話

正確ではないかもしれません。

わかりにくいたとえですが...



わかりにくいたとえですが...

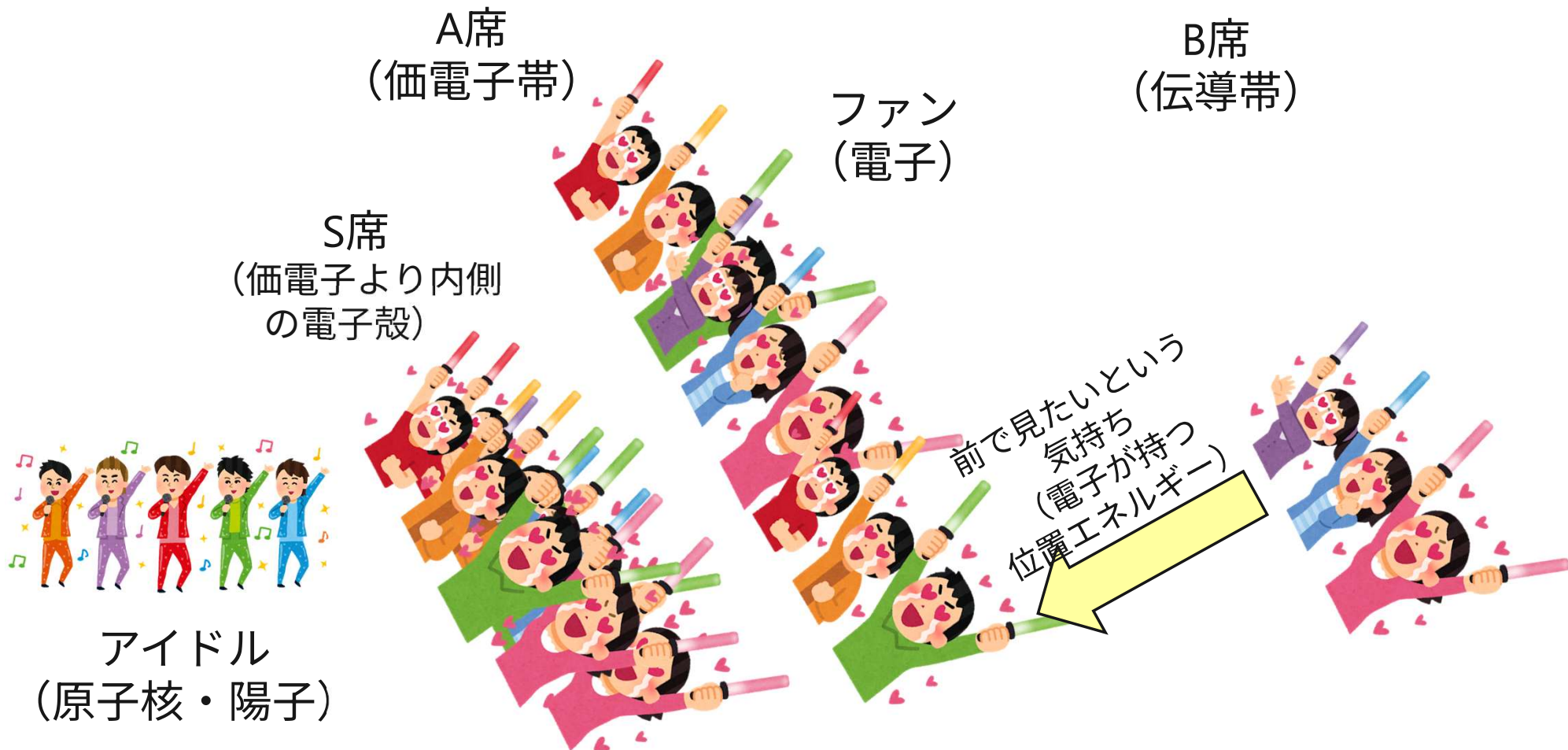


呼びかけ（外部エネルギー）が小さいと動く（協力する）ファン（電子(価電子)）は少ない。大きいと動くファンは多くなる。

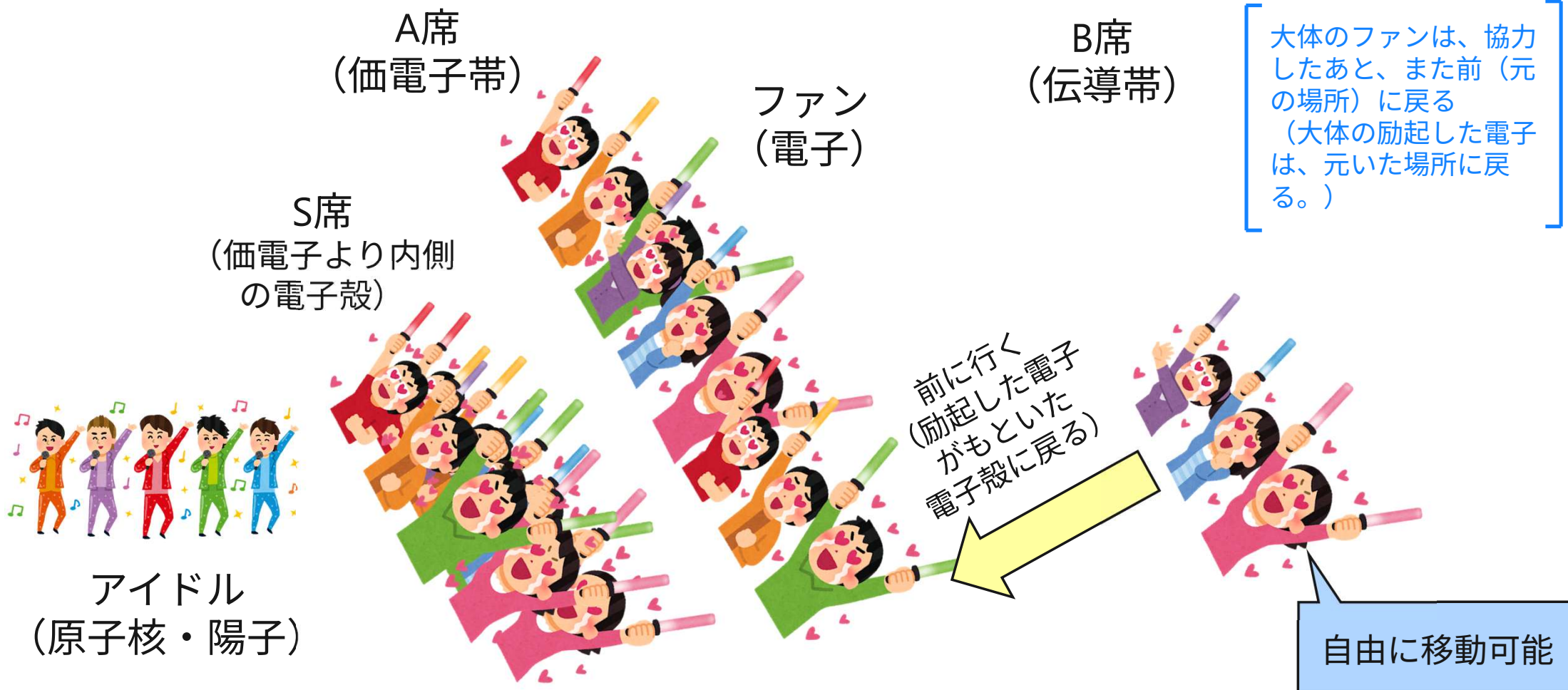
スタッフに協力したファン
(励起した電子)

特に理由はないけど
B席行ってください
(外部エネルギー)

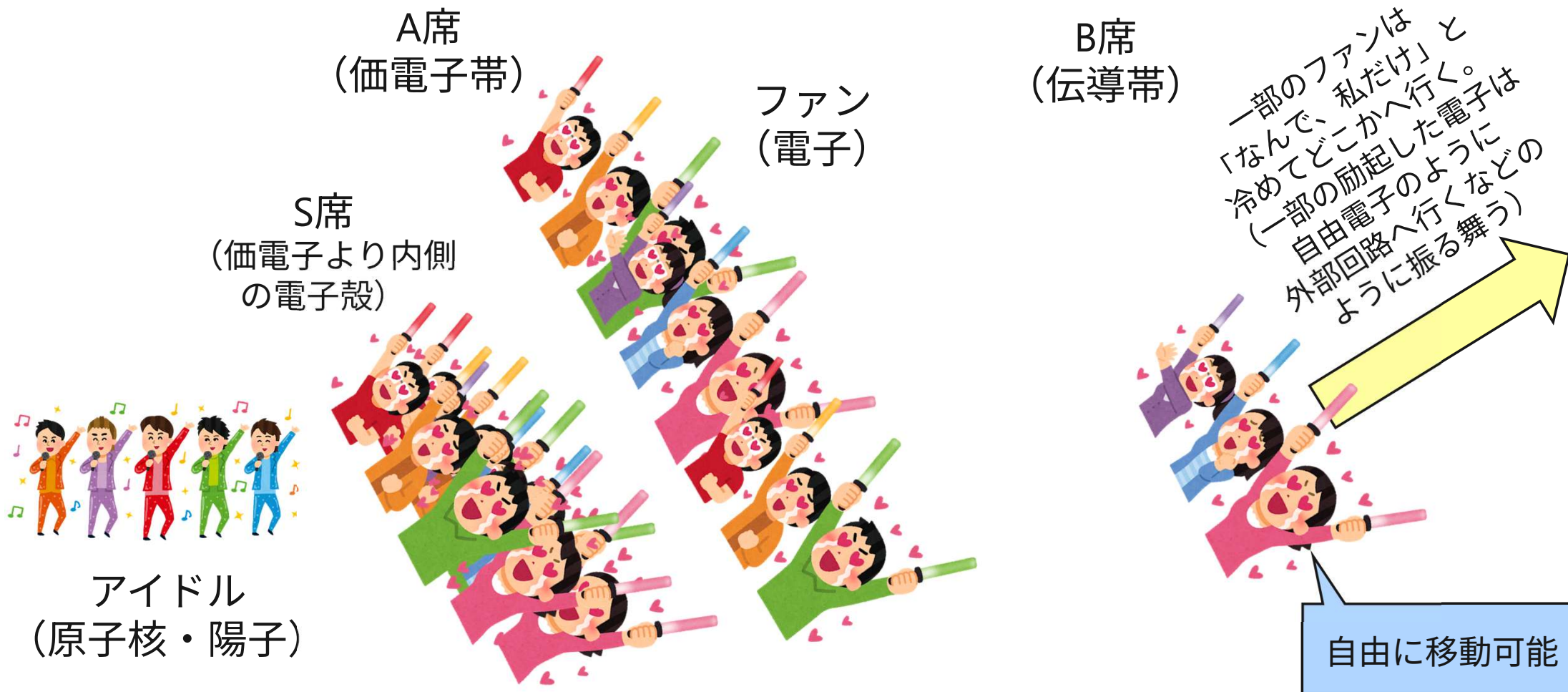
わかりにくいたとえですが...



わかりにくいたとえですが...



わかりにくいたとえですが...



わかりにくいたとえですが...

A席は、満席でお願いします。
(結合に関わる電子は不足しないほしい。)



アイドル
(原子核・陽子)

A席
(価電子帯)

S席
(価電子より内側の電子殻)

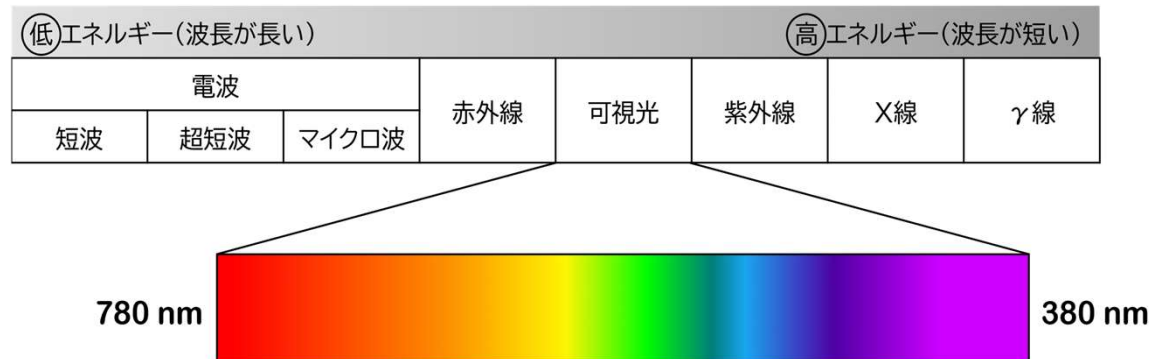
ファン
(電子)

B席
(伝導帯)



新たなファンが来る
(外部から電子を供給)

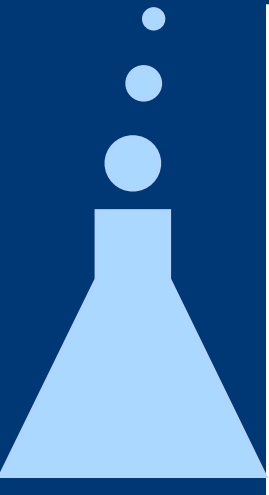
光触媒の性能を決める要素



- 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)

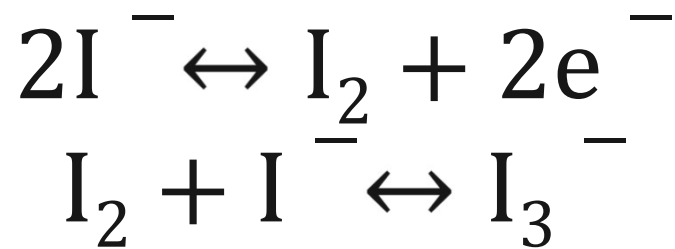
§ 5

色素増感太陽電池

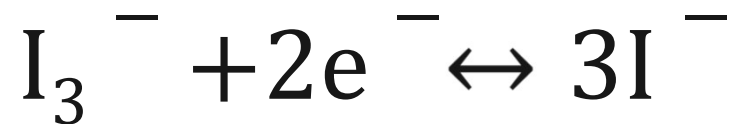


色素増感太陽電池

負極

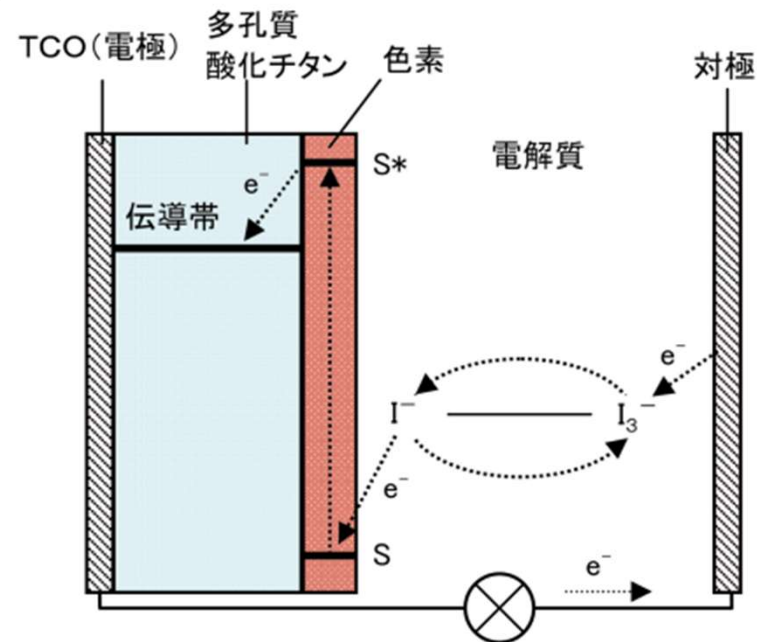


正極



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



【菊川おすすめ】 高分子化合物の例 [電気電子系の材料]

★無機高分子化合物の例（下に行くほど高難易度）

- ・酸化ケイ素IV → 半導体の原料・石英・ガラス
- ・酸化鉛IV 硫酸鉛IV → 鉛蓄電池
- ・酸化マンガンIV・酸化マンガンII → マンガン電池・アルカリマンガン乾電池
- ・炭化ケイ素 → パワー半導体
- ・酸化インジウムスズ（ITO）→ 色素増感太陽電池（私が17h焼いたあれ）

★有機高分子化合物の例（下に行くほど高難易度、無機よりやや難）

- ・ポリアセチレン→ヨウ素と混ぜると導電性がある
- ・ポリイミド→リチウムイオンバッテリー内部の電極固定用のテープ
- ・ポリアセン→無数のベンゼン環が1列につながったもの
- ・P3HT→ペロブスカイト太陽電池のポリチオフェン誘導体（ドナー）

有機半導体

（個人的に）
特に聞きたいなあ

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