

# 高効率光増感色素の戦略的開発と色素増感太陽電池への応用

名古屋工業大学 増田研究室

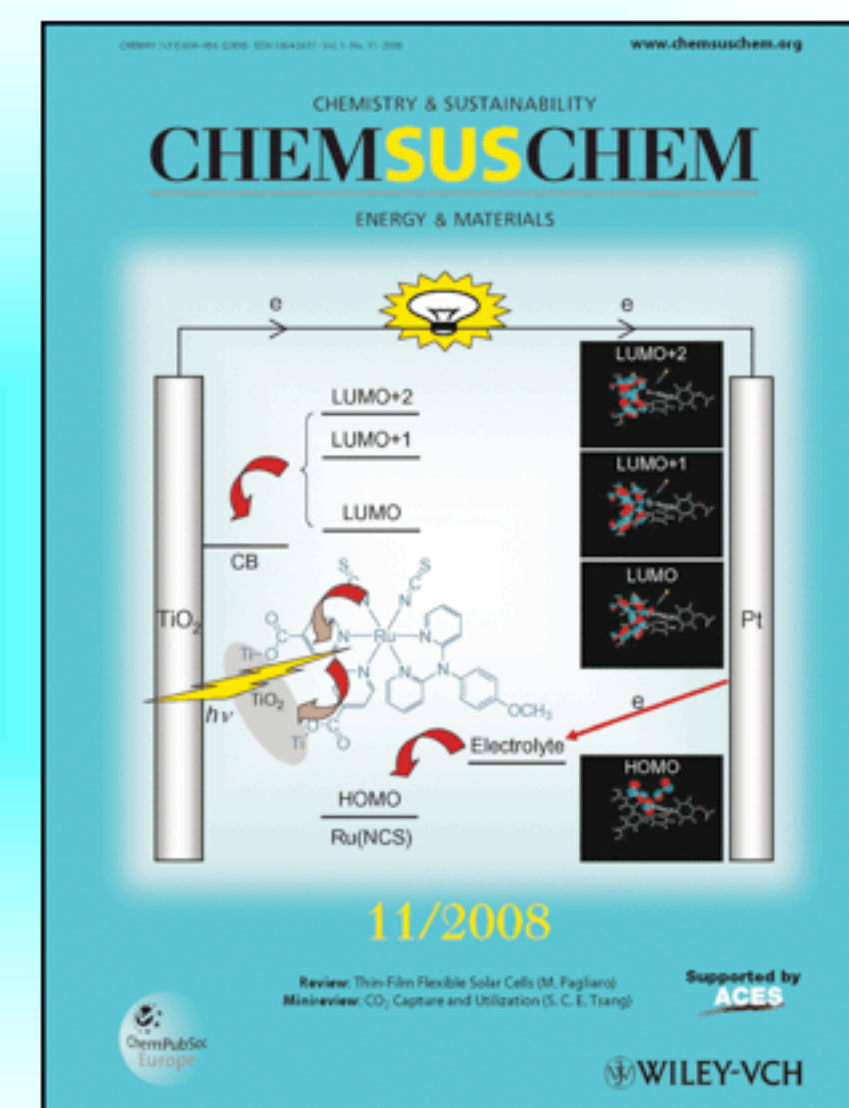
## 分子軌道計算を駆使した高い変換効率を示す色素材料の開発

我々は色素増感型太陽電池の重要な構成要素の一つである増感色素のエネルギー変換効率及び耐久性の向上を目指し、効率よく太陽光を電気エネルギーに変換することが可能で且つ分子自体の安定性の高い色素材料の開発研究を行っている。

特に我々は大型コンピュータを利用した分子軌道計算を重視し、高変換効率実現のためにデザインされた色素分子に関して、まず軌道計算によるHOMO及びLUMO軌道のエネルギーと半導体電極の伝導帯及び電解質の酸化還元電位との適合性を見積もり、励起電子から半導体へ効率よく電子移動が可能かどうか検討している。その上で、得られた結果に基づき、置換基などを様々に交換した一連の色素化合物を合成し、それらの太陽電池としての性能を評価し、問題点を洗い出した上で色素のデザインにフィードバックしている。こうした色素開発を通して、色素を設計する上で重要な傾向を幾つか発見し、戦略的に色素の設計・開発を行うことができるようになった。

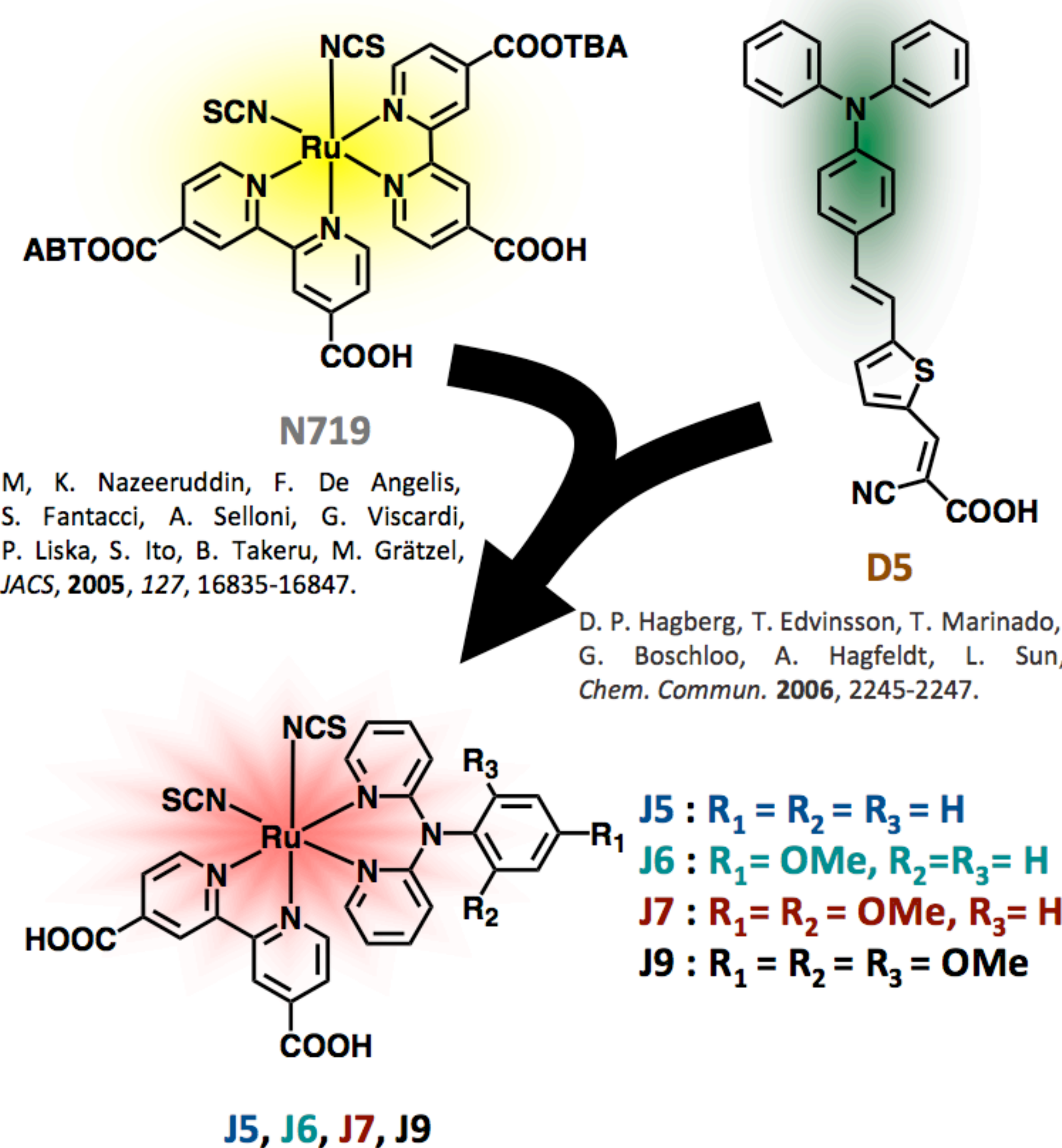
### 本研究に関するトピックス

我々の開発した色素を用いた光増感太陽電池の変換効率がこれまでのチャンピオンデータに匹敵する効率を示した。本研究は高く評価され、Wiley-VCHから出版されている論文誌ChemSusChemの2008年11月号のCover Pictureとして、その号の表紙に選出された。



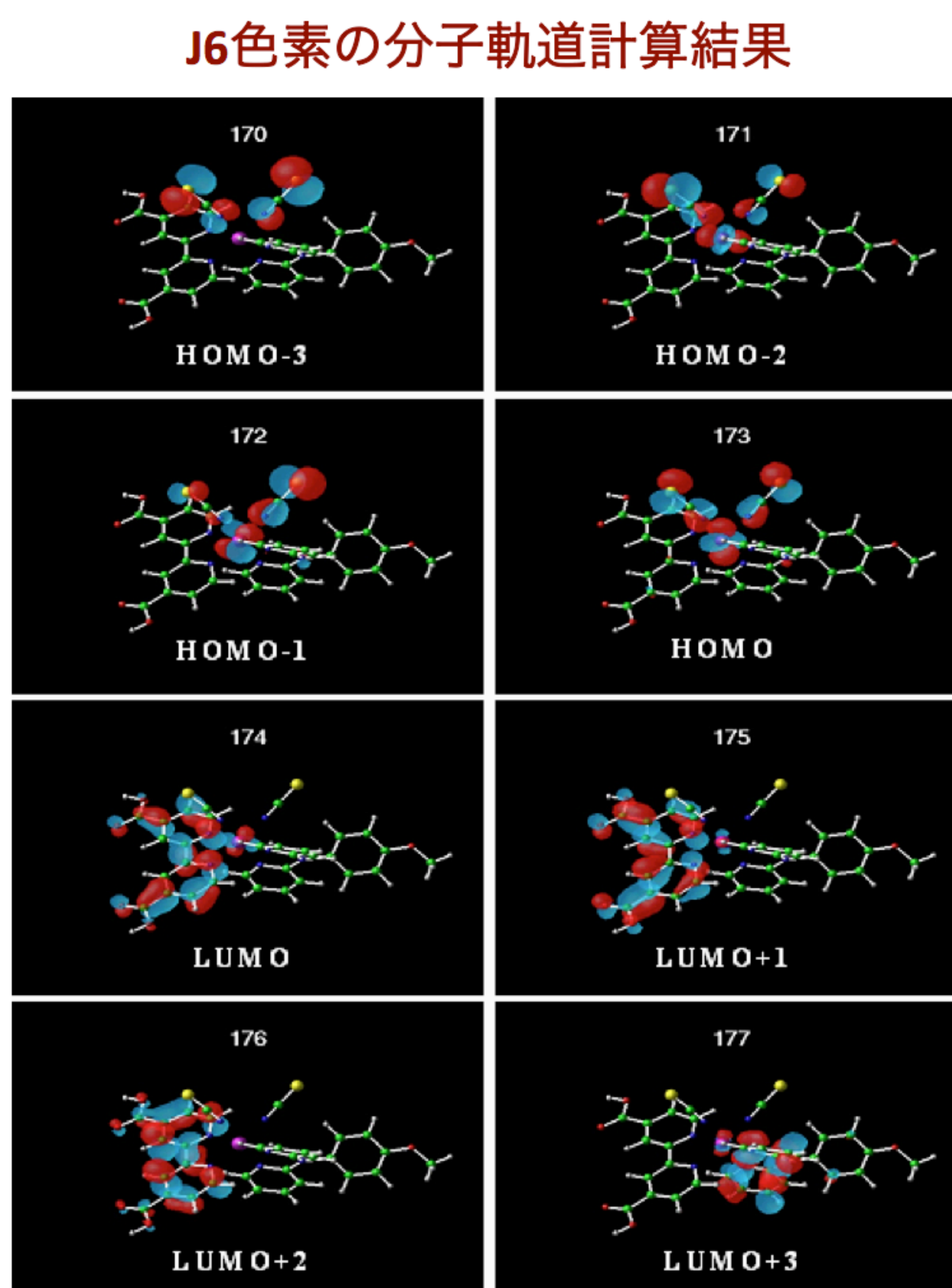
Z. Jin, H. Masuda, N. Yamanaka, M. Minami, T. Nakamura, Y. Nishikitani, ChemSusChem. 2008, 1, 901-904.

### J色素の構造

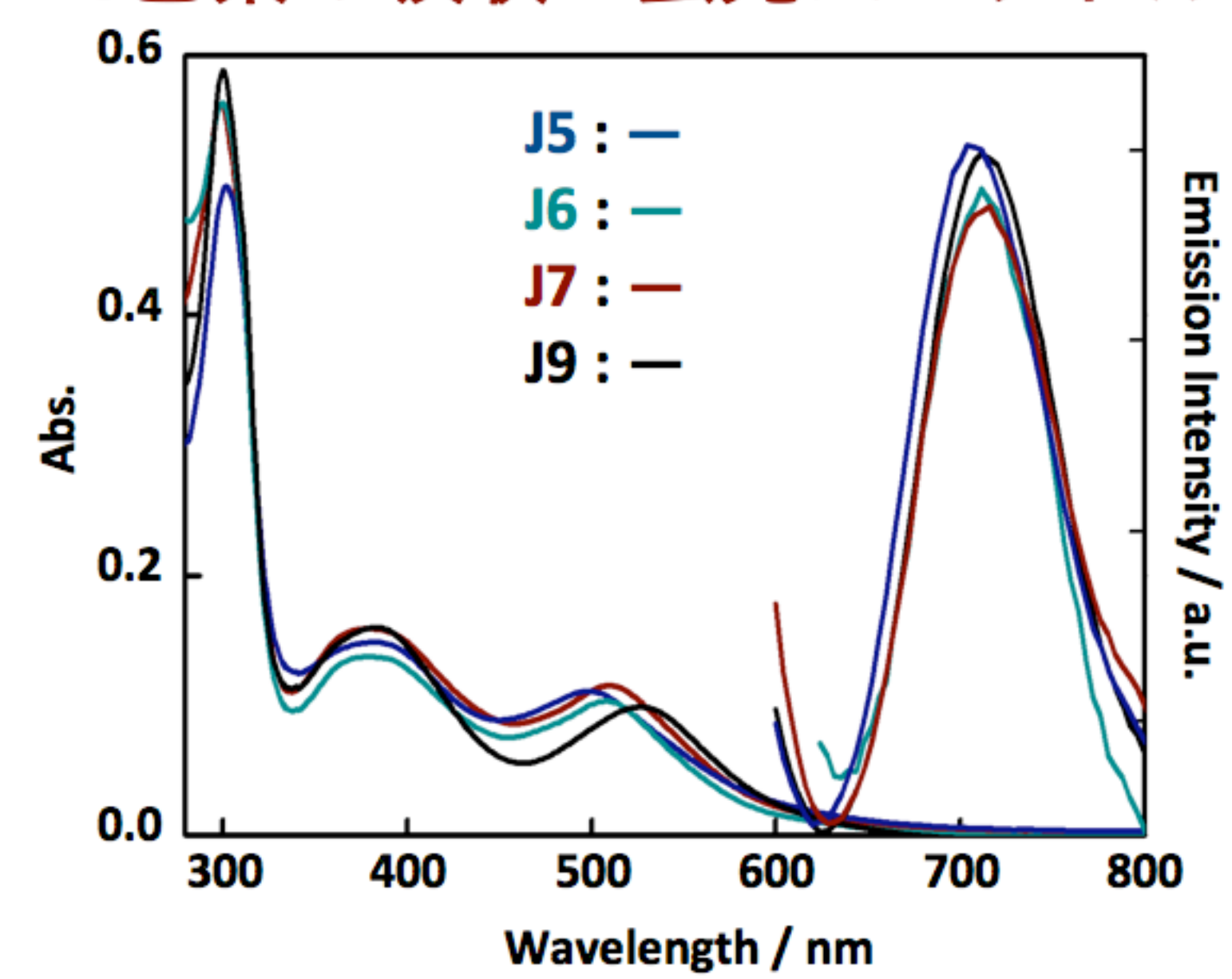


Ru色素であるN719と有機色素として高い変換効率を示すD5色素の長所を融合した一連のJ色素を設計。

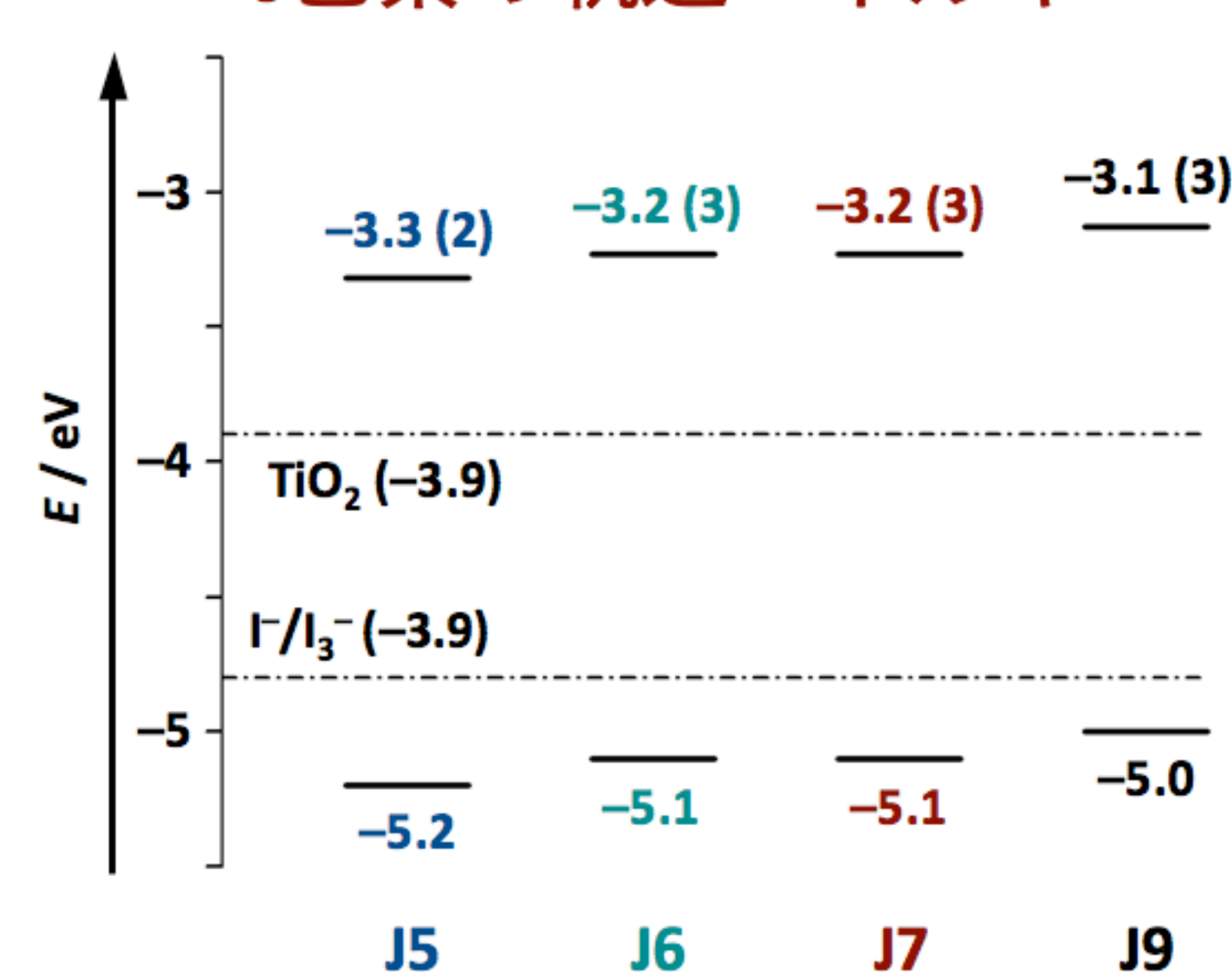
### 各J色素のHOMO-LUMO軌道エネルギー



### J色素の吸収・蛍光スペクトル

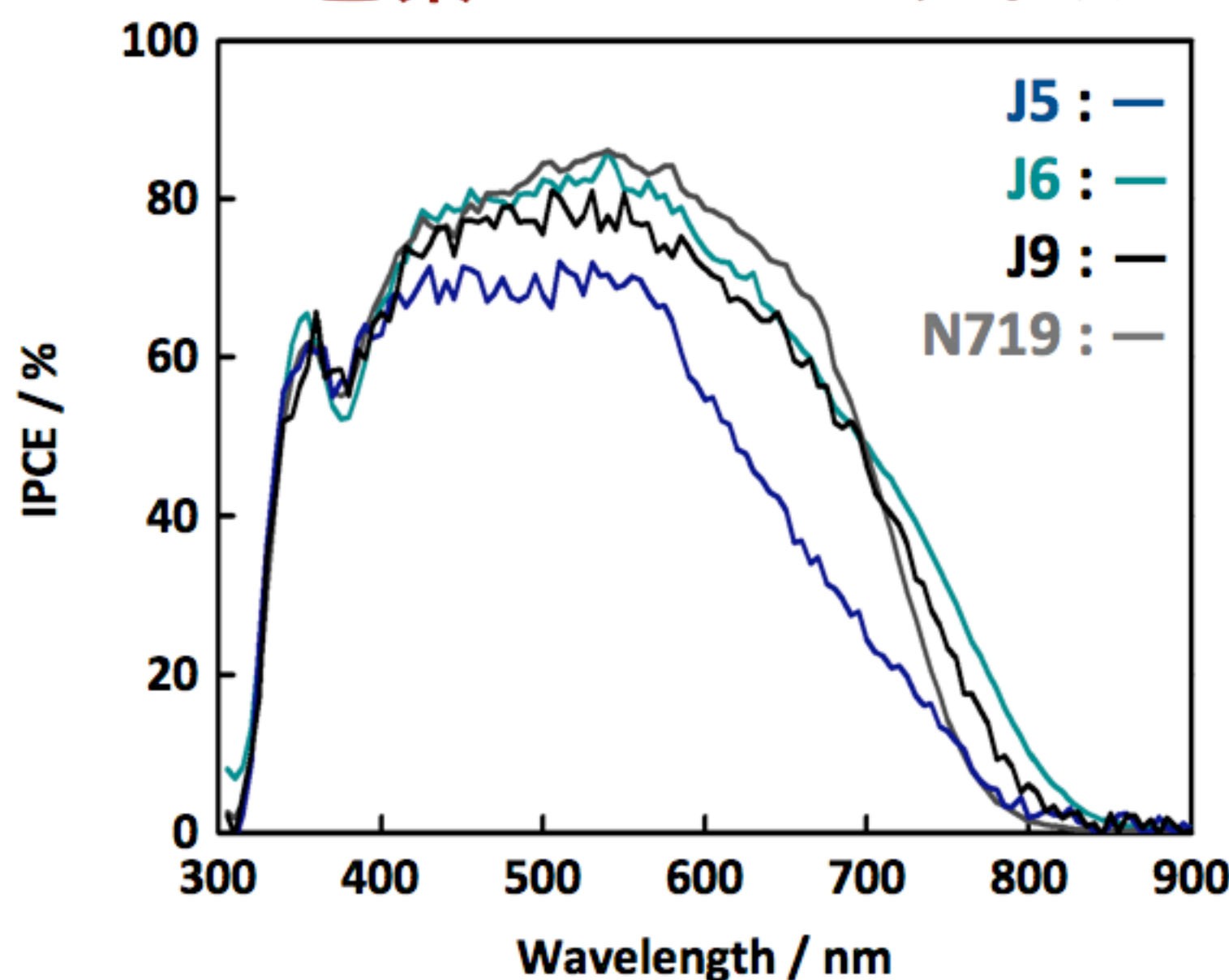


### J色素の軌道エネルギー

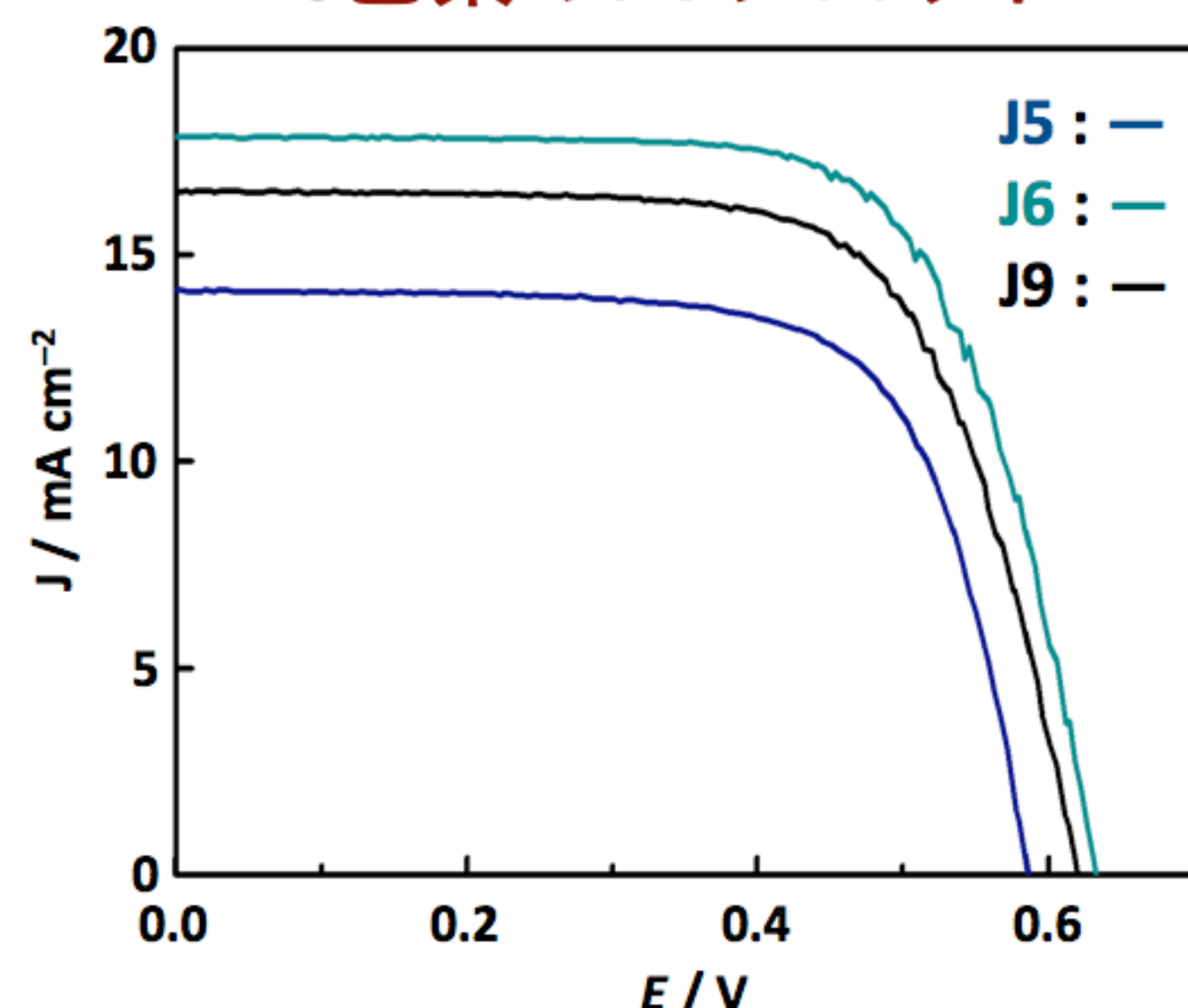


分子軌道計算や吸収・蛍光スペクトルの測定結果から、各J色素の軌道エネルギーはTiO<sub>2</sub>の伝導帯やI<sup>-</sup>/I<sub>3</sub><sup>-</sup>の電位と比較して太陽電池に適したものであることが判明。また軌道計算から励起された電子はTiO<sub>2</sub>に結合している配位子の軌道に入ると予想され、励起電子のTiO<sub>2</sub>への電子移動に適したものであることを示唆。

### J色素のIPCEスペクトル



### J色素のI-Vプロット



### 各J型色素及びN719色素の太陽電池特性

色素 Dye	開放電圧 V <sub>oc</sub> [V]	短絡電流密度 J <sub>sc</sub> [mA cm <sup>-2</sup> ]	フィルファクター FF	変換効率 η [%]
J5	0.58	14.1	0.71	5.8
J6	0.63	17.9	0.70	7.9
J7	0.71	15.3	0.72	7.8
J9	0.62	16.5	0.69	7.1
N719	0.66	17.5	0.70	8.0

酸化チタン上に各J型色素を吸着させ太陽電池を作成し、同条件(AM 1.5 G)でその太陽電池としての特性を評価。IPCEスペクトルやI-Vプロットから得られた太陽電池特性では、J6色素がN719色素に匹敵する高い変換効率を示すことが判明。他の色素も比較的高い変換効率を示し、分子軌道計算を用いた戦略的な色素設計を行うことにより、効率的な色素開発と高い変換効率の実現可能であることを示唆。