

遷移成分解析法による色素増感太陽電池の検討

北尾修

産業技術総合研究所 太陽光発電工学研究センター

研究の目的

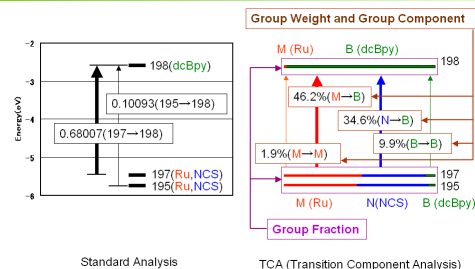
色素増感太陽電池につかわれる色素の吸収スペクトルの内容を簡便に情報の洩れなく整理する方法を提案する。

ODFT・TD-DFT計算法による色素の吸収スペクトル

○遷移成分解析法(TCA(Transition Component Analysis))による吸収スペクトルに関する内容の整理

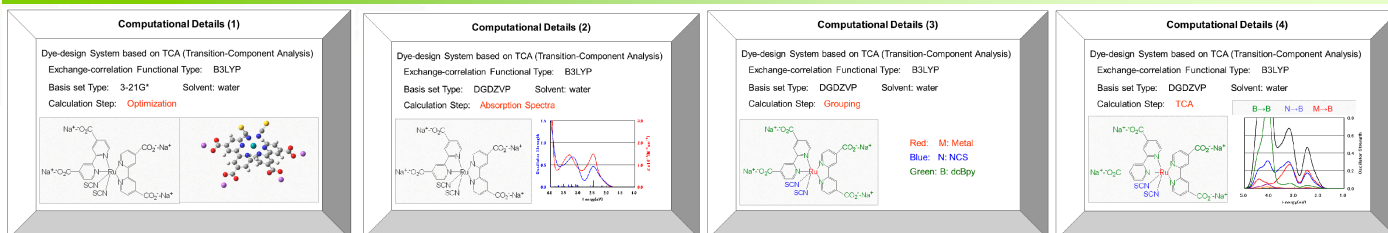
○FT色素への応用

TCAの概要



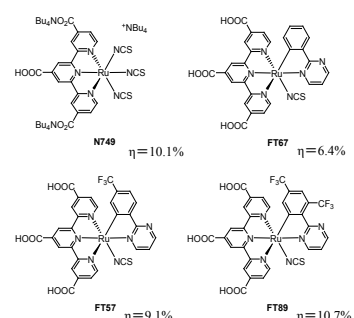
Standard Analysis and TCA on the first singlet excited states for N719 calculated by TD-DFT with B3LYP functional, DGDZVP basis set, and solvation effect described by C-PCM (water).

TCAの手続きと特徴

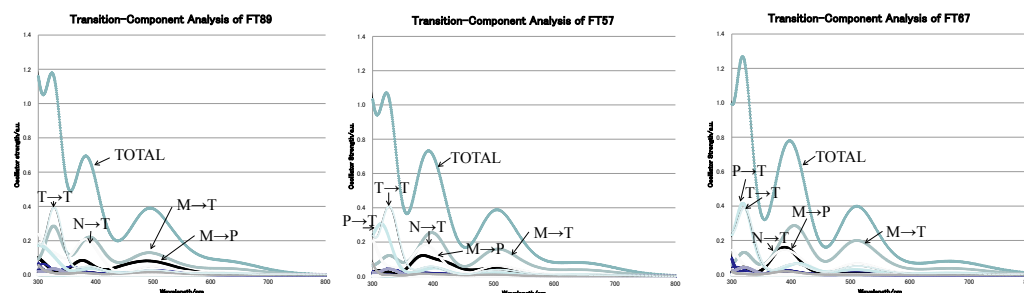


- Transition Component Analysis (TCA) is proposed to analyze electronically excited wave functions easily and exactly by two steps:
- (i) each MO is decomposed into **Group Fractions (GFs)** with an overlap matrix,
- (ii) the set of GFs is used to rearrange the set of weights of configurations for excitations into a set of **Group Weights (GWs)** and the accompanying set of **Group Components (GCs)**.
- TCA gives us an intrinsic and complete understanding of electron excitations without loss of information.

FT色素への応用



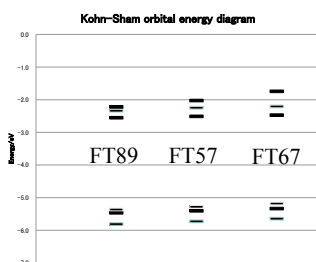
Molecular Structures of N749, FT67, FT57, and FT89.



M: Metal; N: NCS; T: TcTerp; P: Phenylpyrimidine

結論

- (1) FT色素の励起スペクトルの計算によるシミュレーションを実施した。
- (2) FT色素の優秀さの変化はHOMO順位の変化で説明できる。
- (3) FT色素にTCAを行ってみると、FT89では第一ピークに「M→P」の寄与があり、FT57, FT67に行くに従い小さくなるのが判明した。
- (4) 電子吸引基の導入により第一ピークにフェニルピリミジン基の関与が大きいことが、エネルギーダイアグラムの変化よりも理解できる。



参考文献

- [1] M.K.Nazeeruddin, P.Péchy, M.Grätzel, *Chem. Commun.* **1997**, 1705.
- [2] O.Kitao and H.Sugihara, *Inorganica Chimica Acta*, **2008**, 361, 712.; *ibid.*, **2009**, 362, 2099.
- [3] O.Kitao, *Electrochemistry*, **2008**, 76, 165.
- [4] T.Funaki, H.Funakoshi, O.Kitao, N.Onozawa-Komatsuzaki, K.Kasuga, K.Sayama, and H.Sugihara, *Angew.Chem.Int.Edit.*, **2012**, 51, 7528.

謝辞: 自然科学研究機構 計算科学研究センター