

Ru錯体-有機色素共増感太陽電池の計算化学的研究

○草間 仁¹・船木 敬¹・甲村長利²・佐山和弘¹

¹ 産業技術総合研究所 太陽光発電研究センター 機能性材料チーム

² 産業技術総合研究所 機能化学研究部門 バイオケミカルグループ

緒言

TiO₂光電極とヨウ素レドックスを用いた色素増感太陽電池(DSSC)において、最近シクロメタル化ルテニウム錯体色素FT89¹とカルバゾール系有機色素²MK-45、又はMK-111との共増感により大きな性能向上を達成した。³この要因を解明するため、色素二量体(FT89-FT89、MK-45-MK-45、MK-111-MK-111等)や複合体(FT89-MK-45、FT89-MK-111等)における分子間相互作用の計算を密度汎関数法(DFT)にて行った。⁴

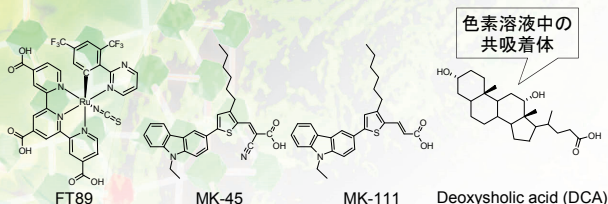
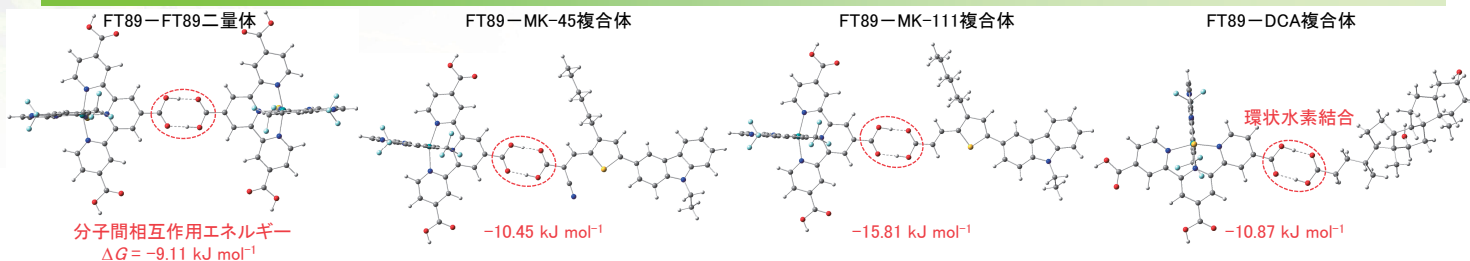


Table Photovoltaic performances of DSSCs under 100 mW cm⁻² of AM1.5G filtered light³

Entry	Dye	J _{sc} (mA cm ⁻²)	V _{oc} (V)	FF	η (%)	I _{3⁻} of FT89	I _{3⁻} of MK dye
1	FT89	19.2	0.67	0.71	9.1	2.3	
2	MK-45	10.4	0.73	0.73	5.5		4.5
3	MK-111	6.8	0.68	0.72	3.4		4.3
4	FT89+MK-45	19.9	0.69	0.68	9.4	1.2	1.8
5	FT89+MK-111	21.0	0.71	0.66	9.8	1.0	2.0
6	FT89+DCA	20.5	0.70	0.67	9.6	1.6	
7	FT89+MK-45+DCA	20.7	0.70	0.69	10.0	1.4	1.3
8	FT89+MK-111+DCA	21.2	0.71	0.68	10.2	1.1	1.3

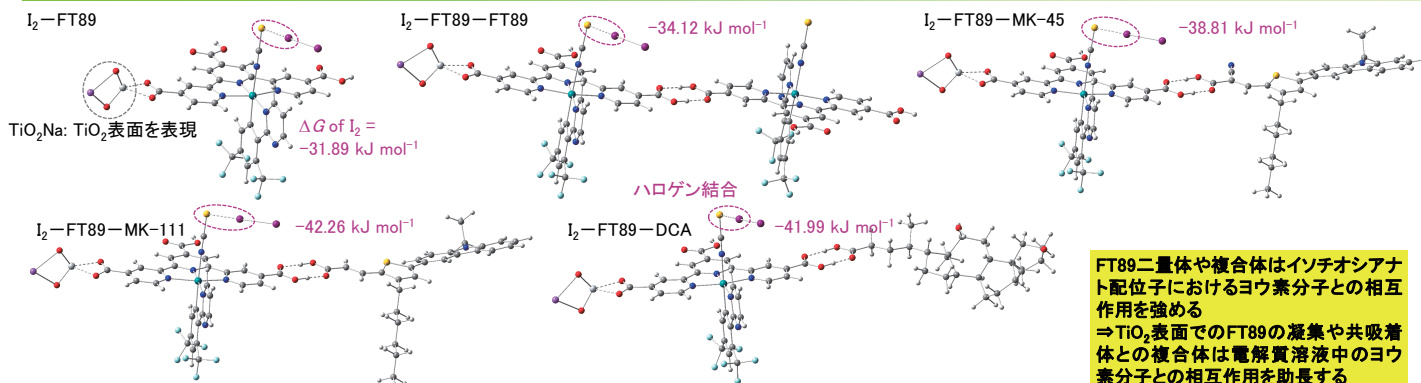
^a Amount of sensitizer in 10⁻⁷ mol cm⁻².

計算結果: 二量体、及び複合体

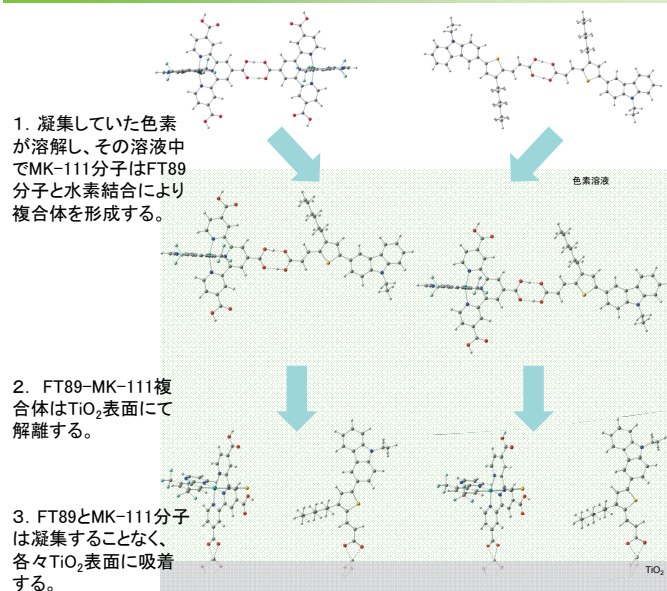


溶液中で共存している場合、FT89単量体は二量体形成よりも、MK-45、DCA、MK-111単量体と水素結合により複合体を形成しやすい ⇒ MK-111はFT89と、DCAやMK-45よりも強く水素結合し、FT89の凝集をより効果的に抑制する

計算結果: I₂-FT89-X



考察: MK-111によるFT89凝集抑制機構



結論

- DSSCセル作製時TiO₂への色素吸着過程において、MK-111はDCAやMK-45よりも強い分子間水素結合を形成し、好ましくないFT89の凝集を大幅に抑制する効果があることを見いだした。
- MK-45よりも光応答性は劣るが、MK-111は(特にI_{3⁻}と重なる波長領域で)増感色素と凝集抑制剤の両方の役割を担っている。
- その結果、TiO₂内の電子とヨウ素レドックス電解質酸化体(I₂)との再結合が抑制されDSSC性能が向上すると考えられる。
- 本研究で得られた知見は、増感色素と共吸着体の観点から高効率共増感DSSCへの設計指針を与える。

謝辞

本研究の理論計算の一部は、自然科学研究機構 計算科学研究センターの利用により行ったものである。

引用文献

- (1) T. Funaki, H. Funakoshi, O. Kitao, N. Onozawa-Komatsuzaki, K. Kasuga, K. Sayama and H. Sugihara, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2012, **51**, 7528-7531.
- (2) N. Koumura, Z. S. Wang, S. Mori, M. Miyashita, E. Suzuki and K. Hara, *J. Am. Chem. Soc.*, 2006, **128**, 14256-14257.
- (3) T. Funaki, N. Koumura and K. Sayama, *Chem. Lett.*, 2013, **42**, 1371-1373.
- (4) H. Kusama, T. Funaki, N. Koumura and K. Sayama, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014, **16**, 16166-16175.