

# クロロフィル誘導体色素増感太陽電池に関する理論的研究

北尾修<sup>1</sup>・王晓峰<sup>2</sup>

<sup>1</sup>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・<sup>2</sup>吉林大学

## 研究の目的

- [1] chlorin  $e_6$  誘導体を用いた色素増感太陽電池を作成し、電池性能を評価した [1]。
- [2] DFT計算並びにTD-DFT計算を用いて色素の電子状態を検討し、色素増感太陽電池の効率の傾向を議論する。

## 計算

全系はCAM-B3LYP 交換相関汎関数と 6-31G (d,p) 基底関数を用い、CPCM (ethanol) 法にて溶媒和効果を取り込んだ DFT 計算にて構造最適化した。励起状態は最適化された構造にて TD-DFT 計算にて行った。全ての計算は Gaussian 09 [2] で取り扱った。

## クロロフィル誘導体の構造と電池特性

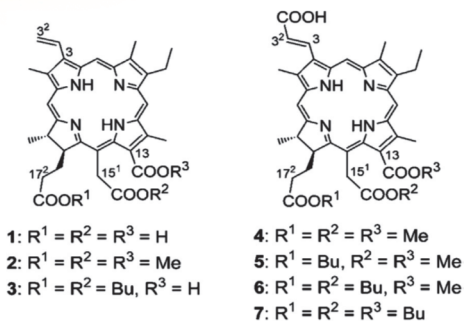


図1. クロロフィル誘導体の構造。

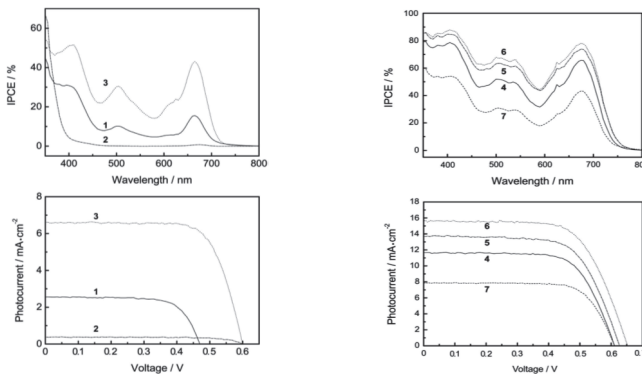


図2. クロロフィル誘導体に基づく IPCE プロファイルと I-V カーブ。

## 計算結果と電池性能

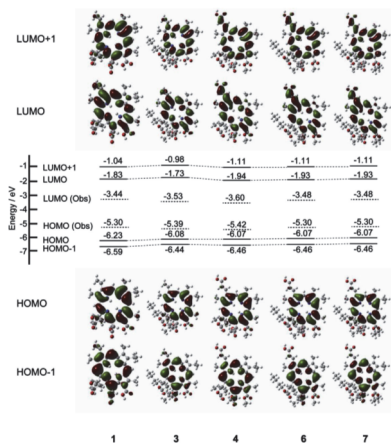


図3. 主要軌道のエネルギーレベルと分子軌道分布。

表1. クロロフィル誘導体に基づく電池性能。

Dye	$J_{sc} / \text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	$V_{oc} / \text{V}$	FF	$\eta / \%$
1	2.5	0.47	0.72	0.9
2	0.4	0.60	0.75	0.2
3	6.6	0.60	0.73	2.9
4	11.7	0.61	0.89	4.9
5	13.7	0.63	0.67	5.7
6	15.6	0.65	0.66	6.7
7	7.9	0.61	0.72	3.5

アルキル置換基の巨大化 (H → Me → Bu)  
 → 逆電子移動の低下で性能向上 (1 < 3, 4 < 5 < 6)  
 → 還元反応の低下で性能低下 (6 > 7)

## 結論

- [1] chlorin  $e_6$  増感色素で、それぞれ光電変換効率 (%) は1 (0.9), 2 (0.2), 3 (2.9), 4 (4.9), 5 (5.7), 6 (6.7), 7 (3.5) であった。
- [2] 電池効率の傾向 (2 < 1 < 3) は増感色素のカルボキシル基の有無とアルキル置換基の巨大化に基づく逆電子移動の低下で説明できる。
- [3] 電池効率の傾向 (4 < 5 < 6) はアルキル置換基の巨大化に基づく増感色素の逆電子移動の低下で説明できる。
- [4] 7色素での大きな効率低下は増感色素のHOMOの電子分布から、アルキル置換基の巨大化に基づく色素酸化体の還元反応の低下が原因であると示唆される。

## 参考文献

- [1] X-F. Wang, H. Tamiaki, O. Kitao, T. Ikeuchi, and S. Sasaki, J. Power Sources, **242**, 860 (2013).
- [2] Frisch, M.J. *et al.*, Gaussian 09, revision A.1; Gaussian, Inc. Wallingford, CT, USA, 2009.

## 謝辞

本研究の理論計算は、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。