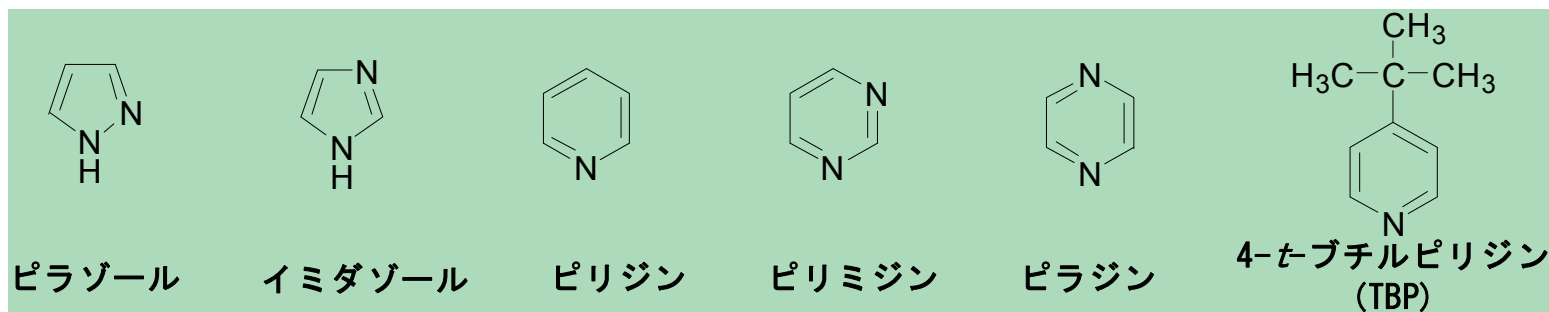


色素増感太陽電池における 含窒素複素環式化合物の影響

革新材料チーム付兼務 草間 仁

(エネルギー技術研究部門太陽光エネルギー変換グループ)

- 色素増感太陽電池(DSSC)の性能を向上させる方法の1つとして、4-*t*-ブチルピリジン(TBP)を電解質溶液に添加することがよく知られている。
- TBP添加によって一般的に短絡電流密度 J_{sc} は低下するが、開放電圧 V_{oc} とフィルファクター ff が上昇し、最終的に光電変換効率 η は向上する。
- 次の6種類の含窒素複素環式化合物の添加が電池性能に及ぼす影響を調べ、密度汎関数理論(DFT)法によりその理由について検討した。



含窒素複素環式化合物のDSSC性能への影響

添加物	J_{sc} (mA·cm ⁻²)	V_{oc} (V)	ff	η (%)
なし	16.5	0.62	0.63	6.5
ピラゾール	15.6	0.67	0.67	7.0
イミダゾール	9.9	0.85	0.77	6.5
ピリジン	14.7	0.73	0.72	7.7
ピリミジン	15.2	0.67	0.69	7.0
ピラジン	15.4	0.67	0.66	6.9
TBP	14.2	0.77	0.72	7.9

色素: Ru(II)錯体 (N3)

光電極: FTO、TiO₂薄膜(膜厚15 μ m)

電解質溶液: 含窒素複素環式化合物 0.5 mol·dm⁻³、ヨウ化1,2-ジメチル-3-プロピルイミダゾリウム C₈H₁₅N₂I 0.6 mol·dm⁻³、LiI 0.1 mol·dm⁻³、I₂ 0.05 mol·dm⁻³、溶媒; CH₃CN

対極: Pt蒸着FTO

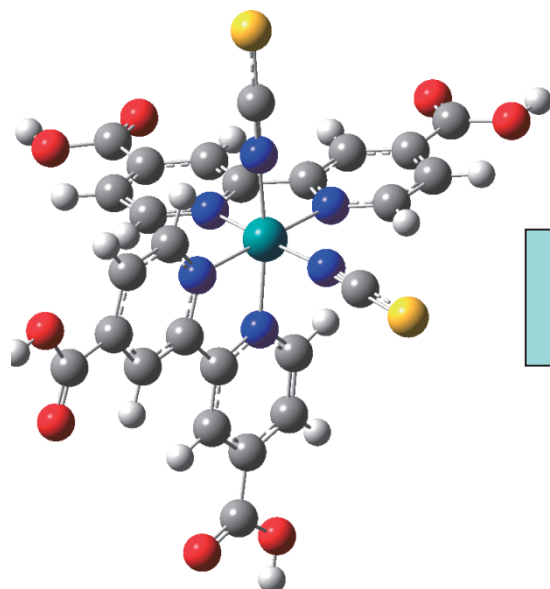
光電変換特性: 100 mW·cm⁻² (AM1.5)、セル面積0.25 cm²

いずれの含窒素複素環式化合物添加でも V_{oc} は増大するが、 J_{sc} は低下した。

本発表では、含窒素複素環式化合物とRu色素との相互作用を理論的に研究し、 J_{sc} 低下の理由を解明する。

AIST ヨウ素-色素-含窒素複素環式化合物の相互作用(Gaussianソフトウェア)

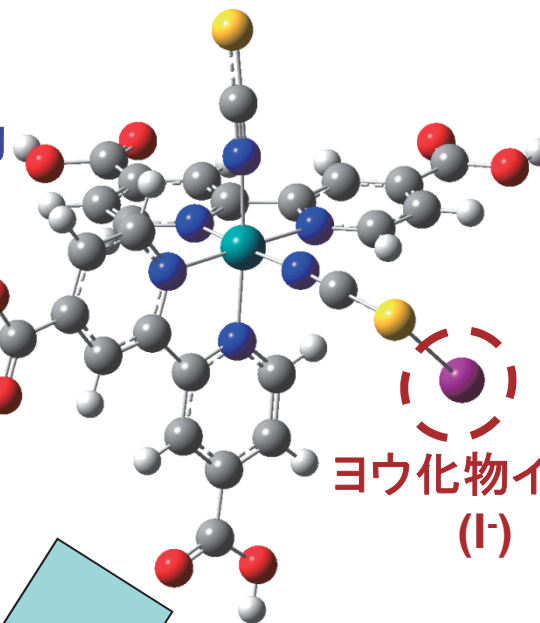
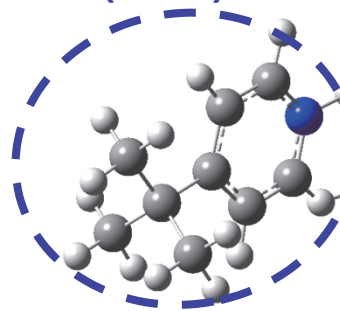
●: Ru, ●: N, ●: C, ●: S, ●: O, ○: H



酸化型色素
(N3)

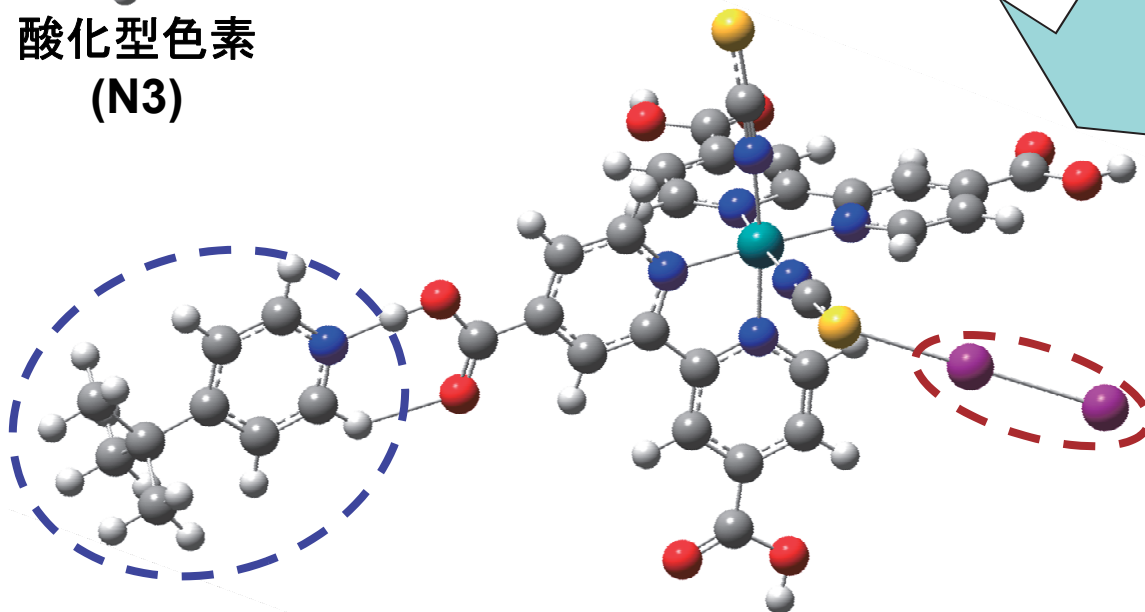
I⁻, TBP

含窒素複素環式化合物
(TBP)



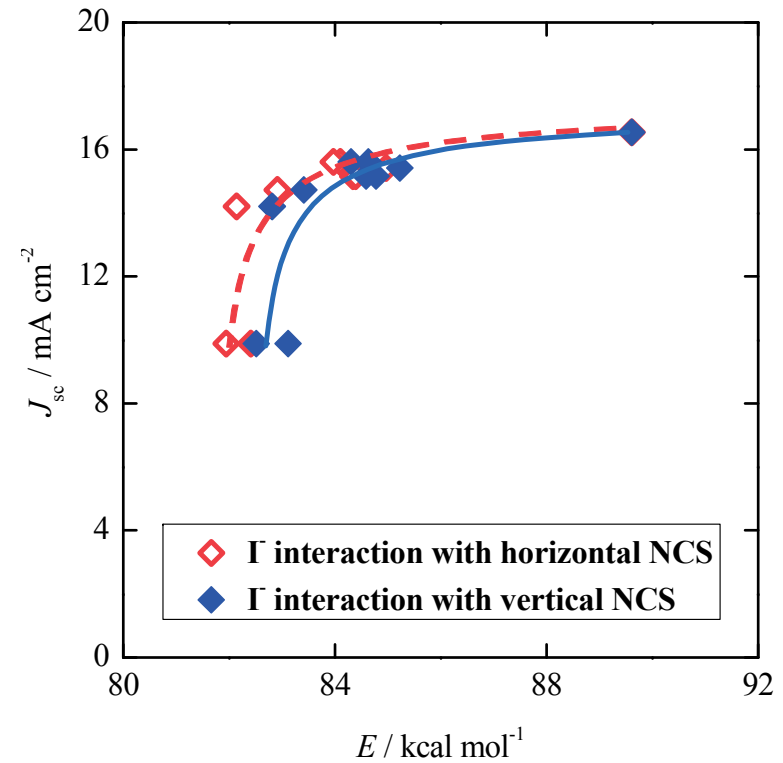
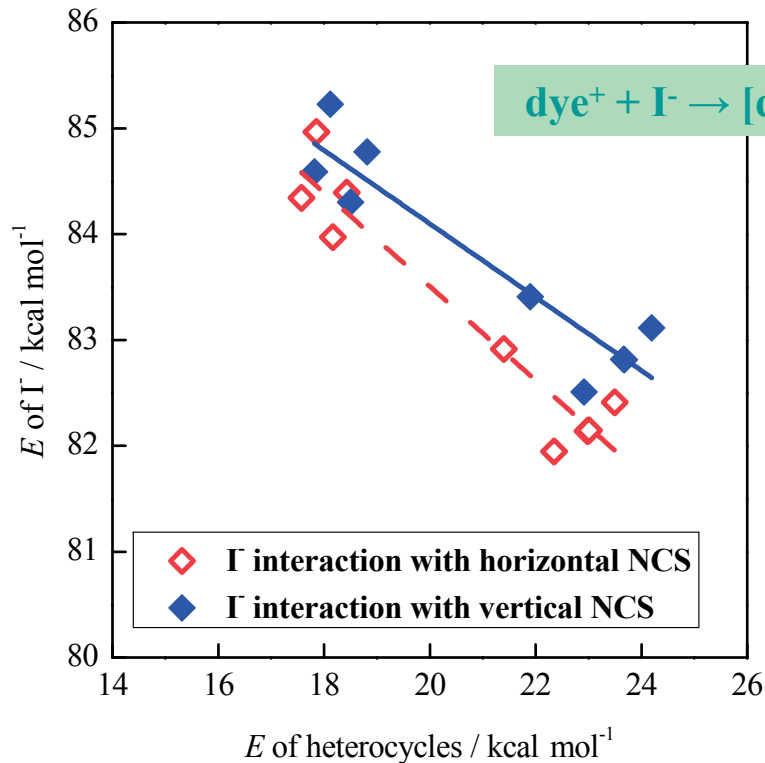
ヨウ化物イオン
(I⁻)

I⁻



ヨウ化物イオンはイソチオシアネート配位子のS原子と結合し、含窒素複素環式化合物はカルボキシル基と水素結合する。

ヨウ化物イオン・含窒素複素環式化合物の酸化型色素との相互作用エネルギー E の相関、及びヨウ化物イオンの E と含窒素複素環式化合物を用いたDSSCの J_{sc} との相関



含窒素複素環式化合物はヨウ化物イオンと酸化型色素との相互作用を弱める(左図)



酸化型色素とヨウ化物イオンとの相互作用が強いほど J_{sc} が高い(右図)



含窒素複素環式化合物はヨウ素レドックスによる酸化型色素の再還元反応を抑制する