

# N3型ルテニウム錯体色素増感太陽電池における 色素とヨウ素との相互作用

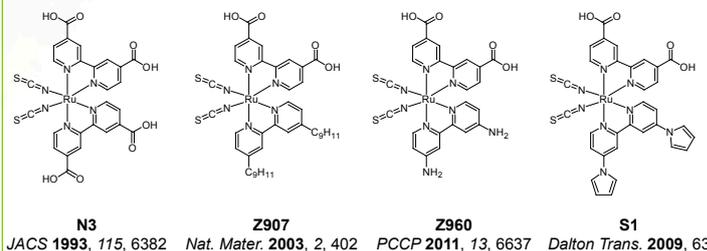
草間 仁(Hitoshi KUSAMA)

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  
(兼)太陽光発電工学研究センター革新材料チーム付

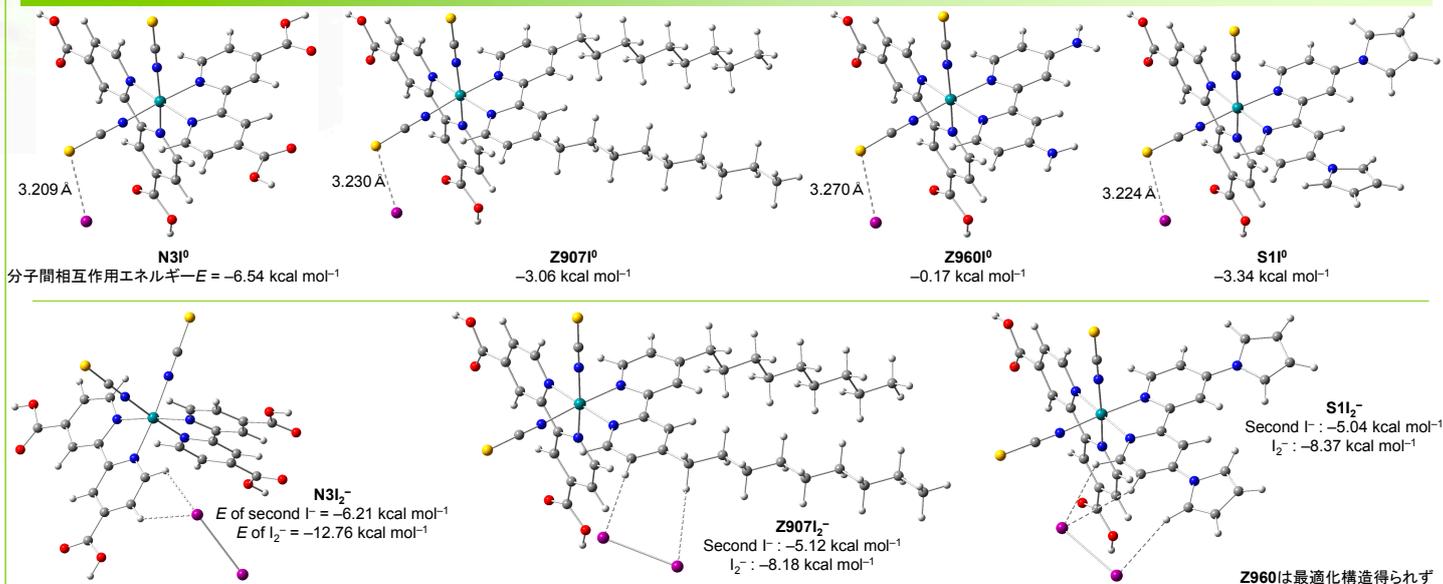
## 研究の目的

○色素増感太陽電池(DSSC)において代表的な増感色素の1つはN3である。  
○1つのピリジンジカルボン酸配位子において、2つのカルボキシル基を種々の官能基に置換し、DSSC性能を向上させる試みが広く行われている。  
○DSSC性能を左右するヨウ素レドックスとの分子間相互作用へのこれら置換基の影響はよく分かっていない。  
○4種類のN3型Ru錯体色素(置換基)についてヨウ化物イオン(I<sup>-</sup>)やヨウ素分子(I<sub>2</sub>)との分子間相互作用を密度汎関数法(Gaussian 09, B3LYP/LanL2DZ)法により検討し、置換基の影響を明らかにする。  
○理論計算の結果に基づき、色素構造のDSSC性能への影響について考察する。

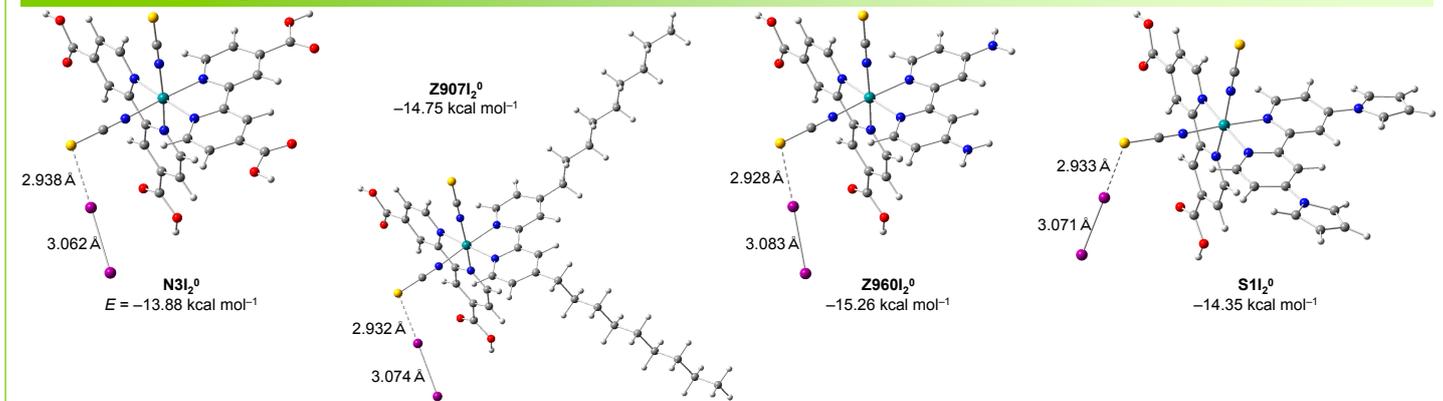
## 色素の構造



## 酸化型色素とI<sup>-</sup>との分子間相互作用



## 基底状態の色素とI<sub>2</sub>との分子間相互作用



## 考察

○酸化型色素とI<sup>-</sup>との分子間相互作用の強さはZ960 < Z907 < S1 < N3の順であり、さらにもう1つのI<sup>-</sup>との相互作用の強さはZ907 < S1 < N3の順、Z960では安定な構造が得られなかった→この順に酸化型色素のヨウ化物イオンによる再還元反応が進みやすい→高い短絡電流密度(PCCP 2011, 13, 6637; Dalton Trans. 2009, 63)

○基底状態の色素とI<sub>2</sub>との分子間相互作用の強さは N3 < S1 < Z907 < Z960の順→この順に電解質への逆電子移動反応が助長される(Acc. Chem. Res. 2009, 42, 1799)→開放電圧の低下(PCCP 2011, 13, 6637; Chem. -Eur. J. 2011, 17, 6781; J. Phys. Chem. B 2003, 107, 8981)

○色素開発においては吸収スペクトルやモル吸光係数、HOMO・LUMOエネルギーレベルのみならず、ヨウ素レドックスとの分子間相互作用も考慮すべきである。

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。