

# クロロフィル誘導体を用いた新規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) クロロフィル誘導体を増感剤とホール輸送剤に用いた新規太陽電池を提案する[1]。
- (2) 各種色素のDFT計算を行いHOMO-LUMO準位を整理し、太陽電池の効率との相関を議論する。
- (3) TD-DFT計算に基づく吸収スペクトルをシミュレーションし、実験結果と比較する。

## 実験

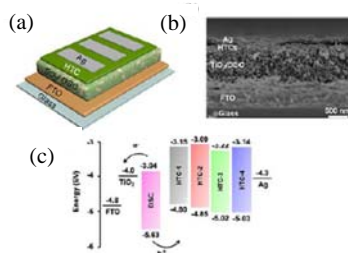


Figure 1. a) device architecture. b) cross-sectional SEM image of the solar cells. c) energy diagram tested in this study.

## 計算の詳細と実験結果

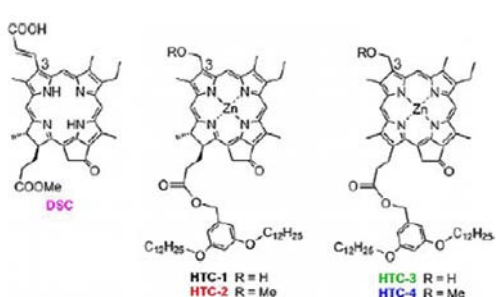


Figure 2. Molecular structures of DSC, HTC-1, HTC-2, HTC-3, and HTC-4 discussed herein.

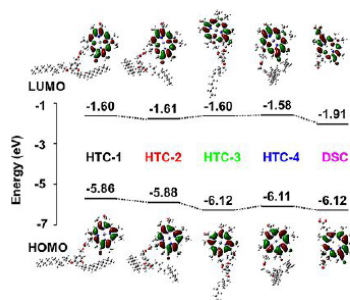


Figure 3. Frontier orbitals based on DFT/CAM-B3LYP/6-31G(d,p) with PCM (chlorobenzene) for HTC-1, HTC-2, HTC-3, HTC-4, and DSC [2].

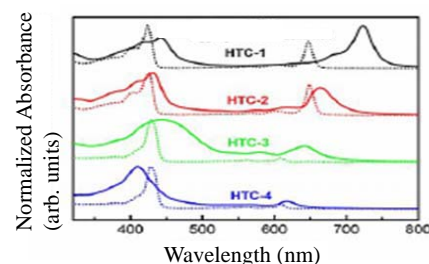


Figure 4. UV/Vis absorption spectra of HTC as the monomer in THF (dotted line) and aggregates on solid film (solid line).

## 計算結果と考察

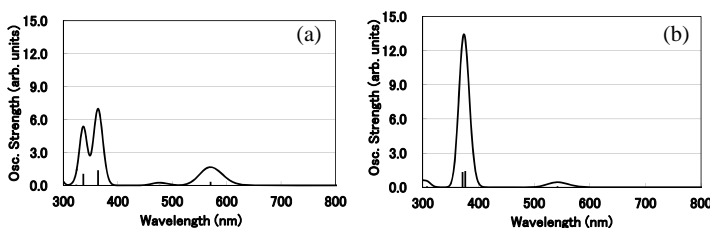


Figure 5. Theoretical absorption spectra and oscillator strength based TD-DFT/CAM-B3LYP/6-31G(d,p) with PCM(chlorobenzene) for (a) HTC-1 and (b) HTC-3 [2].

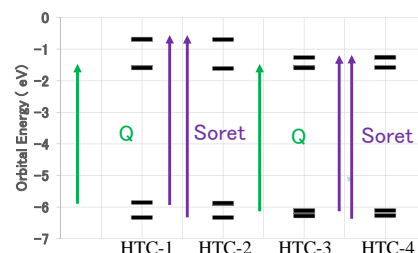


Figure 6. Frontier orbitals based on DFT/CAM-B3LYP/6-31G(d,p) with PCM(chlorobenzene) for HTC-1, HTC-2, HTC-3, and HTC-4.

## 結論

- (1) クロロフィル誘導体を増感剤とホール輸送剤に用いた新規太陽電池を提案した。効率はHTC-1 (0.86%), HTC-2 (0.30%), HTC-3 (0.25%), HTC-4 (0.15%)であった。
- (2) DFT計算の結果、ホール輸送剤のHOMO準位が高いものが効率が一番良い事が整理でき、実験結果とも一致した。
- (3) TD-DFT計算に基づく吸収スペクトルのシミュレーションは実験結果とよい一致をみた。

## 参考文献

- [1] Yue Li, Wenjie Zhao, Mengzhen Li, Gang Chen, Xiao-Feng Wang, Xueqi Fu, Osamu Kitao, Hitoshi Tamiaki, Kotowa Sakai, Toshitaka Ikeuchi, and Shin-ichi Sasaki, Chem. Eur. J., **23**, 10886 (2017).
- [2] M. J. Frisch *et al.*, Gaussian 09, Revision 01, Gaussian, Inc., Wallingford, CT (2009).

## 謝辞

自然科学研究機構 岡崎共通研究施設 計算科学研究センター