

色素増感型太陽電池の電極構造最適化を指向した マルチスケールシミュレーション

○小野寺 真里¹、扇谷 恵¹、鈴木 愛²、坪井 秀行¹、畠山 望¹、遠藤 明¹、
高羽 洋充¹、久保 百司¹、宮本 明^{2,1}

¹ 東北大学大学院工学研究科(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

² 東北大学未来科学技術共同研究センター

(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

【緒言】

色素増感型太陽電池は低コストであり、デザイン性が高いなどの理由から将来有望な次世代太陽電池である。実用化のためには更なる変換効率の向上が求められている [1]。効率向上のためには光電極材料である TiO₂ 多孔質の構造最適化が必須である。

本研究では従来の不規則性 TiO₂ ナノ粒子モデルに加え、秩序性の高いナノスケルトン TiO₂ モデル [2] を構築し、当研究室独自の色素増感型太陽電池マルチスケールシミュレータ [3] によりデバイス特性の比較を行った。

【方法】

当研究室独自の Tight-binding 量子化学計算プログラム“Colors” [4] により増感色素の振動子強度を算出した。比表面積が等しいナノ粒子モデルとナノスケルトンモデルを当研究室独自の三次元多孔質シミュレータ [5] により構築し (Fig. 1)、電子移動、屈曲度シミュレーションを行った。以上の値をデバイス特性シミュレータの入力値とし、電流-電圧特性の解析を行った。

【結果】

Table 1 に電子移動、屈曲度シミュレーションの結果を示す。ナノ粒子構造に対し、ナノスケルトン構造は電子拡散係数が大きく屈曲度が小さいため、電子伝達性に優れていることがわかった。

Fig. 2 に得られた電流-電圧曲線を示す。ナノスケルトン構造はナノ粒子構造よりも電流密度、開放電圧ともに向上し、優れたデバイス特性を示した。

以上より、ナノスケルトン TiO₂ は電極構造として有用であることが示された。

【参考文献】

- [1] B. O'Regan, M. Grätzel, *Nature*, **353** (1991) 737.
- [2] T. Sakai et al., *J. Oleo Sci.*, **57** (2008) 629.
- [3] K. Ogiya et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **47** (2008) 3010.
- [4] M. Elanany et al., *J. Phys. Chem. B*, **107** (2003) 1518.
- [5] M. Koyama et al., *ECS Trans.*, **7** (2007) 2057.

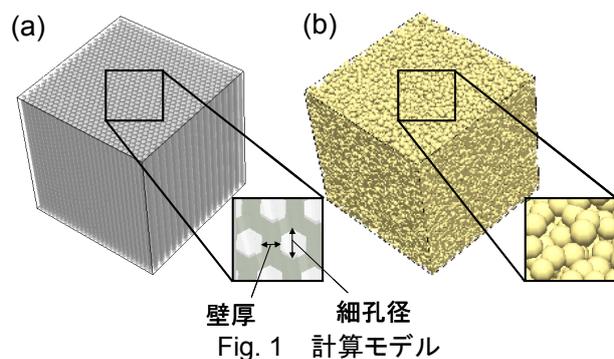


Fig. 1 計算モデル
(a) ナノスケルトンモデル (細孔径 15 nm, 壁厚 5 nm),
(b) ナノ粒子モデル
(TiO₂ 粒径 15 nm, 空隙率 0.5, 粒子間の重複率 0.5)

Table 1 メソ構造解析結果

	比表面積 /m ² g ⁻¹	拡散係数 / × 10 ⁻⁴ cm ² s ⁻¹	屈曲度 /-
ナノスケルトン	79.07	2.01	0.943
ナノ粒子	79.04	1.30	1.60

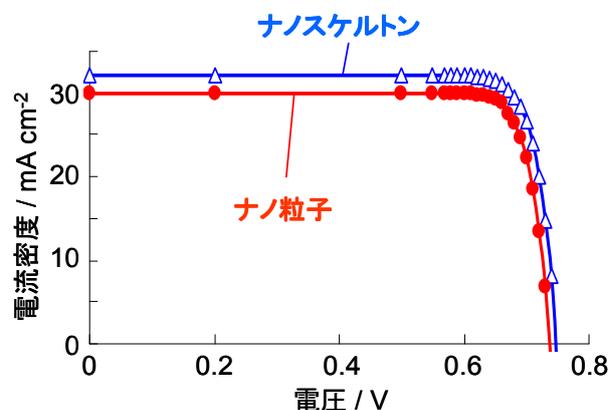


Fig. 2 電流-電圧特性の比較