

Tight-Binding 量子分子動力学法に基づく
色素増感型太陽電池 TiO₂ 電極のマルチスケールシミュレーション

○ 扇谷 恵¹、呂 晨¹、Agalya Govindasamy¹、坪井秀行¹、古山通久¹、畠山望¹、遠藤 明¹、高羽洋充¹、久保百司¹、Del Carpio Carlos A.¹、宮本 明^{1,2}

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 6-6-10)

【緒言】近年、次世代太陽電池の一つとして色素増感型太陽電池が注目を集めているが、光電変換効率の低さが実用化に向けた課題となっている。計算化学的手法を用いることで実際に材料を合成することなく電極の性能を予測することができれば、経済的・時間的コストが低減され、光電変換効率向上のためのより効率的な新規材料開発が可能となる。そこで本研究では、電子・原子レベルの特性に基づいた色素増感 TiO₂ 多孔質電極のマルチスケールシミュレータを開発することを目的とした。

【計算方法】振動子強度算出のための機能を当研究室で開発した Tight-binding 量子分子動力学法プログラム“Colors”に新たに実装し、色素の振動子強度を予測した。また Colors によりアナターゼ型 TiO₂(101)面の電子状態計算を行い、得られた確率密度分布に基づき、同じく当研究室で開発したモンテカルロ法プログラムによりキャリア移動度を予測した。これらの量子化学計算から得られた色素の振動子強度の値、および TiO₂ の電子の移動度の値を色素増感 TiO₂ 多孔質電極特性マクロスケールシミュレータの入力値として用いた。

【結果と考察】まず Colors を用いて色素の基底状態における電子状態計算を行い、得られた波動関数をもとに、振動子強度を算出した。モデルには代表的な増感色素である N3 色素を用いた。モデルと計算結果から予測した紫外可視吸収スペクトルを図 1 に示す。これは、実測値と定性的に一致した。

次に、酸化物半導体光電極材料の TiO₂ のキャリア移動度算出計算を行った。モデルにはアナターゼ型 TiO₂(101)面を用いた。得られた結果を表 1 に示す。表 1 から、正孔より電子の移動度の方が大きいという実験値[1]と同様の結果が得られたことがわかる。

さらに、上記の計算から得られた色素の振動子強度、および TiO₂ の電子の移動度を入力値として色素増感 TiO₂ 多孔質電極の電極特性を予測した。シミュレーションから得られた透過光強度と波長の関係を図 2 に示す。図 2 から、入射光の強さと色素の振動子強度の値に依存して、セルを透過する光の強さが変化する様子が再現できたことがわかる。

以上より、量子論に基づく色素増感 TiO₂ 多孔質電極の電極特性を予測可能とする新規マルチスケールシミュレータの開発に成功した。

[1] R. Könenkamp, *Phys. Rev. B*, **61**, 11057 (2000).

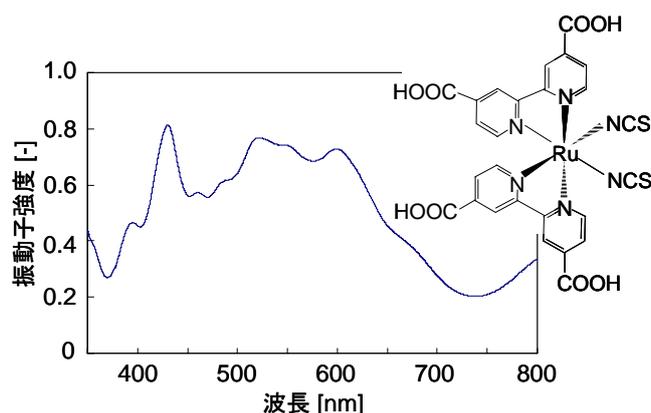


図 1. N3 色素と予測した紫外可視吸収スペクトル

表 1. TiO₂(101)面のキャリア移動度

	計算値 [cm ² /Vs]	実験値 [cm ² /Vs]
電子	10.6	15.0
正孔	1.52	~10 ⁻³

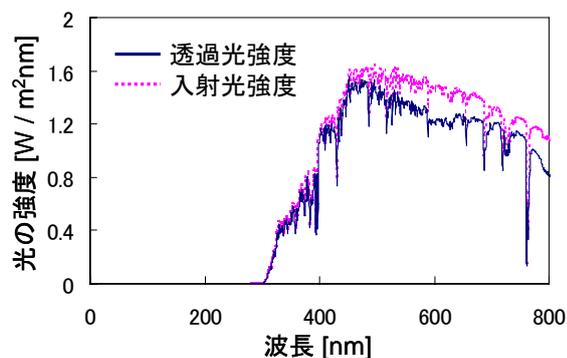


図 2. 透過光強度の波長依存性