

## 三次元多孔質構造を考慮した

色素増感 TiO<sub>2</sub> 電極のマルチスケールシミュレーション

- 扇谷 恵<sup>1</sup>、鈴木 愛<sup>2</sup>、Riadh Sahnoun<sup>1</sup>、古山通久<sup>1</sup>、坪井秀行<sup>1</sup>、畠山 望<sup>1</sup>、  
遠藤 明<sup>1</sup>、高羽洋充<sup>1</sup>、Carlos Del Carpio<sup>1</sup>、Ramesh C. Deka<sup>2</sup>、久保百司<sup>3</sup>、  
宮本 明<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> 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)

<sup>2</sup> 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)

<sup>3</sup> 東北大学大学院工学研究科附属エネルギー安全科学国際研究センター  
(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-701)

**【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されており、実用化に向けた材料開発が盛んに行われている。非経験的な材料設計への応用を目指して、我々は色素増感 TiO<sub>2</sub> 多孔質電極のマルチスケールシミュレータの開発を試みてきた。今回、TiO<sub>2</sub> 電極の複雑な三次元構造を考慮するために、電子拡散シミュレーションを取り入れた。

**【計算方法】** 当研究室で開発した三次元多孔質シミュレータ POCO<sup>2</sup> を用いることにより、粒子の平均半径 10 nm、空隙率を変化させて Fig. 1 のような計算モデルを作成した。開発した電子拡散シミュレータでは、計算モデルをメッシュに切り、電子は三次元 6 方向に等確率で進むとした。また、電子は粒子外に出たとき捕捉時間  $\tau_r$  s の間トラップされるとした[1]。

$$\tau_r = \frac{1}{N_C v_{th} \sigma} \exp\left(\frac{E_T}{k_B T}\right)$$

ここで、 $N_C$  は TiO<sub>2</sub> の伝導帯の状態密度、 $v_{th}$  は電子の熱運動速度、 $\sigma$  はトラップの断面積、 $E_T$  はトラップのエネルギー準位、 $k_B$  はボルツマン定数、 $T$  は温度を表す。

**【結果と考察】** 空隙率を横軸に、透明電極側に達した電子数の濃度換算値、及び計算モデル中の粒子の平均配位数を縦軸にとったグラフを Fig. 2 に示す。Fig. 2 から空隙率が増加すると粒子の配位数、及び透明電極側に達した電子数が減少することがわかった。また、Fig. 3 には空隙率に対する電子の総捕捉時間、及び配位数の関係を示した。Fig. 3 から、空隙率が減少するほど捕捉時間が減少することがわかった。さらに、空隙率 0.5 の場合に着目し、配位数の変化に伴う電子のトラップへの捕捉時間を検討したところ、配位数が増加するとともに捕捉時間が減少したことから、電子のトラップへの捕捉時間は粒子の配位数に影響されると考えられる。当日はこの結果を基にマルチスケールシミュレーションを行った結果も報告する予定である。

**【参考文献】** [1] M. J. Cass et al., *J. Phys. Chem. B*, **109**, (2005) 5100

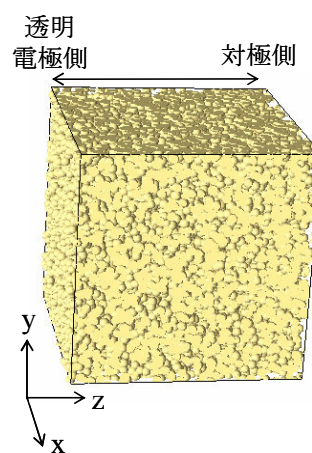


Fig. 1 計算モデル

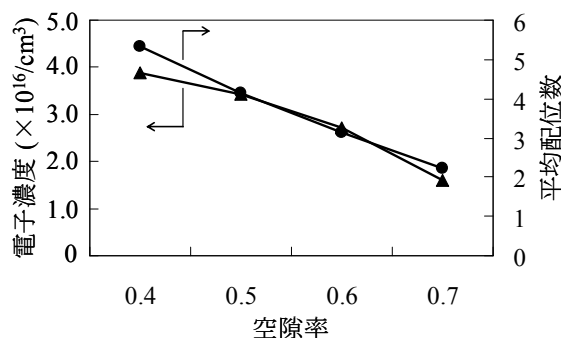


Fig. 2 空隙率の変化に対する透明電極側に達した電子数、及び平均配位数の関係

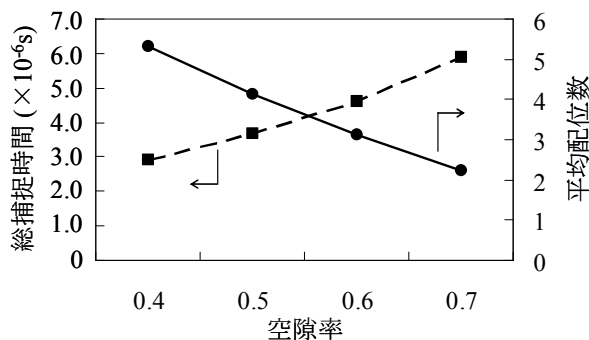


Fig. 3 空隙率の変化に対する電子の総捕捉時間、及び平均配位数の関係