

1P14

透明導電膜/TiO₂ 界面における電圧ロスを考慮した色素増感型太陽電池 マルチスケールシミュレーション手法の開発と応用

○小野寺真里¹, 三浦隆治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)

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】色素増感型太陽電池の開発をより高効率化するために実験に加えコンピューターシミュレーションによる理論設計が有用であると考えられる。

これまで当研究室では、色素増感型太陽電池マルチスケールシミュレータの開発を行ってきた[1,2]。本研究では、従来の手法に新たに透明導電酸化膜(TCO)/TiO₂電極界面における電圧ロスを考慮したシミュレーション手法を開発した。

【方法】Tight-binding 量子化学計算プログラム“Colors” [3]により増感色素(N3 色素)の振動子強度を算出した。TiO₂ 多孔質電極の計算モデルを三次元多孔質シミュレータ[4]を用いて構築した。計算モデルに対して電子移動・屈曲度シミュレーション[1]を行い、TiO₂内電子拡散係数・屈曲度を予測した。得られた振動子強度、電子拡散係数、屈曲度を入力し、従来の手法[2]に TCO / TiO₂ 界面における電圧ロス V_1 を考慮した電流-電圧特性シミュレーションを行った。 V_1 は式(1)で表される[5]。

$$V_1 = \frac{kT}{e} \ln \left[1 + \frac{J}{A^* T^2 \exp(-e\phi_b / kT)} \right] \quad (1)$$

(e :電気素量、 J :電流密度[A m⁻²]、 A^* :TiO₂ の Richardson 定数(=6.71 × 10⁶ A m⁻² K⁻² [5])、 ϕ_b : ショットキー障壁高さ)

【結果】計算モデル(図 1)に対して電子移動・屈曲度シミュレーションを行った結果、電子拡散係数は 1.24 × 10⁻⁴ cm² s⁻¹、屈曲度は 1.66 と算出された。以上を入力値とし、 V_1 を考慮した本手法と従来の手法[2]により得られた電流-電圧曲線の比較を図 2 に示す。本手法により、電流密度: 24.0 mA cm⁻²、開放電圧: 710 mV、フィルファクタ: 0.826、エネルギー変換効率: 14.1 %が得られた。TCO / TiO₂ 界面における電圧ロスを考慮することにより、従来の手法に比べて実験値[6]に近い予測値が得られた。

1) K. Ogiya et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **47** (2008) 3010.

2) M. Onodera et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, in press.

3) M. Elanany et al., *J. Phys. Chem. B*, **107** (2003) 1518.

4) M. Koyama et al., *ECS Trans.*, **7** (2007) 2057.

5) M. Ni et al., *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, **90** (2006) 2000.

6) M. K. Nazeeruddin et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **115** (1993) 6382.

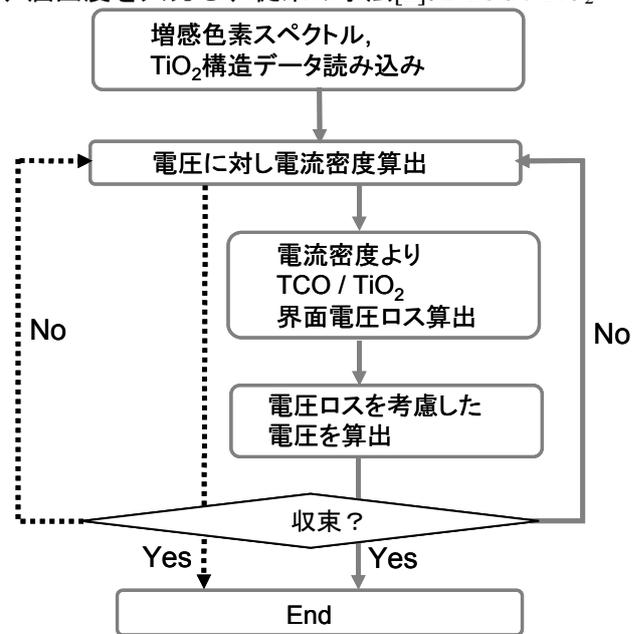


図 1 電流-電圧特性の計算フロー (破線: 従来法、実線: TCO/TiO₂ 界面電圧ロス考慮)

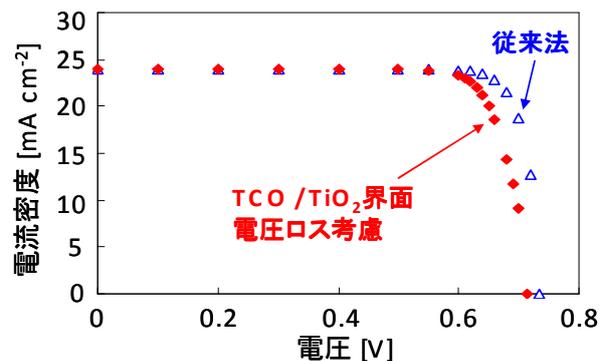


図 2 電流-電圧特性の従来法との比較