17p-A2-13

## 第一原理計算による高効率光変換色素分子の理論設計

Theoretical design of highly efficient dye molecules by first-principles calculations 東大先端研<sup>1</sup>. 台湾大学擬態中心<sup>2</sup>. 東大院工<sup>3</sup>, <sup>0</sup>三嶋 謙二<sup>1</sup>. 木下 卓巳<sup>1</sup>, 林 倫年<sup>2</sup> , 瀬川 浩司<sup>1</sup>, 山下 晃一<sup>3</sup>

Univ. of Tokyo, Research Center for Advanced Sciences and Techmology<sup>1</sup>, National Taiwan University<sup>2</sup>, Univ. of Tokyo, Chemical System Engineering<sup>3</sup>, <sup>°</sup>Kenji Mishima<sup>1</sup>, Takumi Kinoshita<sup>1</sup>, Michitoshi Hayashi<sup>2</sup>, Hiroshi Segawa<sup>1</sup>, Koichi Yamashita<sup>3</sup>

## E-mail: erdao@tcl.t.u-tokyo.ac.jp

光電変換効率 10%を超える有機色素増感型太陽電池の実現が、1991 年に Grätzel ら<sup>1</sup>によって初めて報告されて以来、変換効率向上を目的とした実験的・理論的研究が世界規模で盛んに行われている。特に、光電変換効率向上を目的として、近赤外領域の長波長太陽光を十分に吸収する、ルテニウム錯体光増感色素の開発が急務である。例えば、最近、瀬川らは、 光電変換効率 12.5%、~740nm に吸収ピークを持つ、ルテニウムホスフィン錯体(DX)タンデム 型太陽電池の開発に成功した<sup>2</sup>。しかし、更なる高効率色素を開発するためには、多くの実験 的な試行錯誤を繰り返すことが必須となり、将来的に、多大な経済的・人的浪費を伴う問題 点が深刻になると考えられる

一方、近年の顕著な第一原理計算技術の進歩に伴い、実験することなく、所望の複雑な分 子やマテリアルを計算により、事前に、「設計」することが可能になった。長波長光の吸収を持つ 有機系分子が、有機色素系太陽電池の変換効率向上の点で有利なため、長波長帯の光吸収を持つ 有機色素分子の合成が特に重要である。有機色素分子としては、典型的に、ルテニウム錯体が用 いられる。ルテニウムのような重金属を含む分子では、正確な吸収スペクトルを計算するには、 通常の非相対論的な量子化学計算に加えて、スピン-軌道相互作用を摂動として取り込まなければ ならない。本発表では、DX よりも長波長光吸収ピークを持つ分子の理論的設計を目的として、 その計算方法と、設計分子の特徴を述べる。



[1] B. O' Regan and M. Grätzel, Nature, **353** (1991) 737.

[2] T. Kinoshita, J. T. Dy, S. Uchida, T. Kubo, and H. Segawa, Nat. Photonics (in press).