

メゾスコピック伝導モデルに基づく色素増感型太陽電池の非線形電流電圧特性

Mesoscopic transport model at TiO₂/dye/electrolyte interface of dye-sensitized solar cells

東理大 ○(B)久恒 和也, (M1)藤本 康平, 生野 孝*

Tokyo Univ. of Science ○Kazuya Hisatsune, Kohei Fujimoto, and Takashi Ikuno*

E-mail: tikuno@rs.tus.ac.jp

目的 高い意匠性を持ち低い発電コストが期待されている色素増感型太陽電池(Dye-sensitized solar cells: DSC)において、構成材料の一つである TiO₂ 多孔質膜の微粒子サイズが小さいため、異種材料界面での拡散電位は極めて小さい^[1]。つまり、DSC は、材料界面での拡散電位により非線形電流電圧($I-V$)特性が生じる PN 接合とは異なる原理で非線形 $I-V$ 特性を示すと考えられる。

我々は、電解液/色素/TiO₂ 多孔質膜の界面における局所キャリア輸送現象に着目し、後述するメゾスコピック伝導モデルを上記界面に適用することによって DSC の非線形 $I-V$ 特性が説明できると考えた。本研究では、メゾスコピック伝導モデルに基づいたキャリア輸送シミュレーションを行い、さらに実験結果との比較を行いモデルの妥当性を評価した。

実験 DSC の場合、数 nm の領域にわたる電解液/色素/TiO₂ 界面において非線形 $I-V$ 特性が発現すると考えられるので、界面での電子伝導メカニズムはバリスティック(弾道)伝導であると考えた(Fig. (a))。そこで、電解液/色素/TiO₂ 微粒子の界面に対して散乱のない単一チャネルの電子伝導を示すランダウアー公式(式(A)^[2])を用いた。

$$I = \frac{q}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE T(E) [f_1(E) - f_2(E)] \quad (A)$$

但し、 I は電流、 q は素電荷、 h はプランク定数、 E はエネルギー、 $T(E)$ は色素の LUMO の広がり(電子の透過係数)、 $f_1(E)$ 及び $f_2(E)$ はそれぞれ TiO₂ と電解液におけるフェルミ・ディラック分布関数である。上記のキャリア輸送シミュレーションは Python を用い作成した。

結果と考察 Fig. (b) に計算結果を示す。本モデルを用いて非線形 $I-V$ 特性を示すことができた。また、TiO₂ の伝導帯下端(CBM)が浅くなるにつれて立ち上がり電圧が増加することが分かった。これは CBM- E_F 間距離の増加に伴い界面を伝導する CBM 上電子が減少し、その分電流を生じさせるためにより大きい印加電圧を要することに起因していると考えられる。この傾向は、CBM が -4.26 eV の TiO₂ に -4.05 eV の ZnO をコーティングすることで電流の立ち上がりが高電圧側にシフトする、という実験結果^[3]と一致している。

当日は、各種パラメータにおけるシミュレーション結果に加え実験結果との比較を示す。

[1] Z. Zhang, *et al.*, *Chems. Rev.* **112** (2012) 5537-5539. [2] Cappozzi, *et al.*, *Nat. Nanotechnology* **10** (2015) 523.

[3] Al-Juaied, *et al.*, *Energy and Power Engineering* **5** (2013) 591-595.

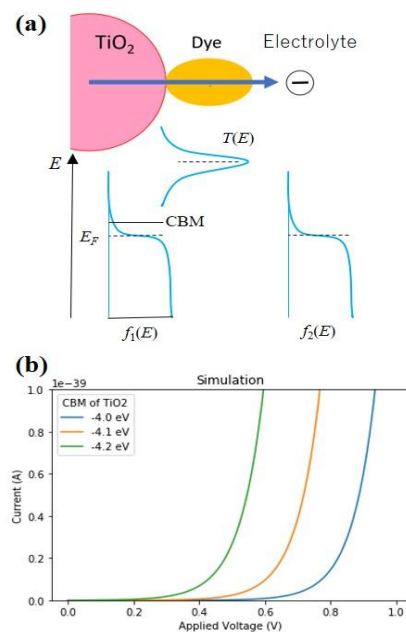


Fig. (a) Conduction of electrons between dye/TiO₂/electrolyte. (b) $I-V$ characteristics of DSC calculated based on the mesoscopic conduction model (CBM dependence of TiO₂)