

色素増感太陽電池での光誘起電子移動: Modified Sakata-Hashimoto-Hiramoto Model

(産業技術総合研究所)○北尾 修、柳田 真利、小野澤(小松崎) 伸子、杉原 秀樹

osamu-kitao@aist.go.jp

高効率色素増感太陽電池の開発の為に半導体界面での光誘起電子移動機構の理解が急務である。近赤外領域に光吸収がおよぶ増感色素の場合、半導体界面で酸素欠陥により生じる Ti^{3+} の電子トラップ準位 (Virtual Phase Space of Trap State (VPSTS)) を電子注入の受容位相空間 (Acceptor Phase Space (APS)) として考慮すべきことが最近の実験[1]により示唆された。従来の Sakata-Hashimoto-Hiramoto モデル (SHH) [2] で考慮している伝導帯 (Conduction Band (CB)) に加え VPSTS を APS に加えた新モデルを考案し電子移動速度式を導出した[3]。新速度式は色素増感太陽電池における界面での光誘起電子移動速度に最大値が存在することや、Incident Photon-to-Current Conversion Efficiency 短波長域での強度落ち込みを説明する。

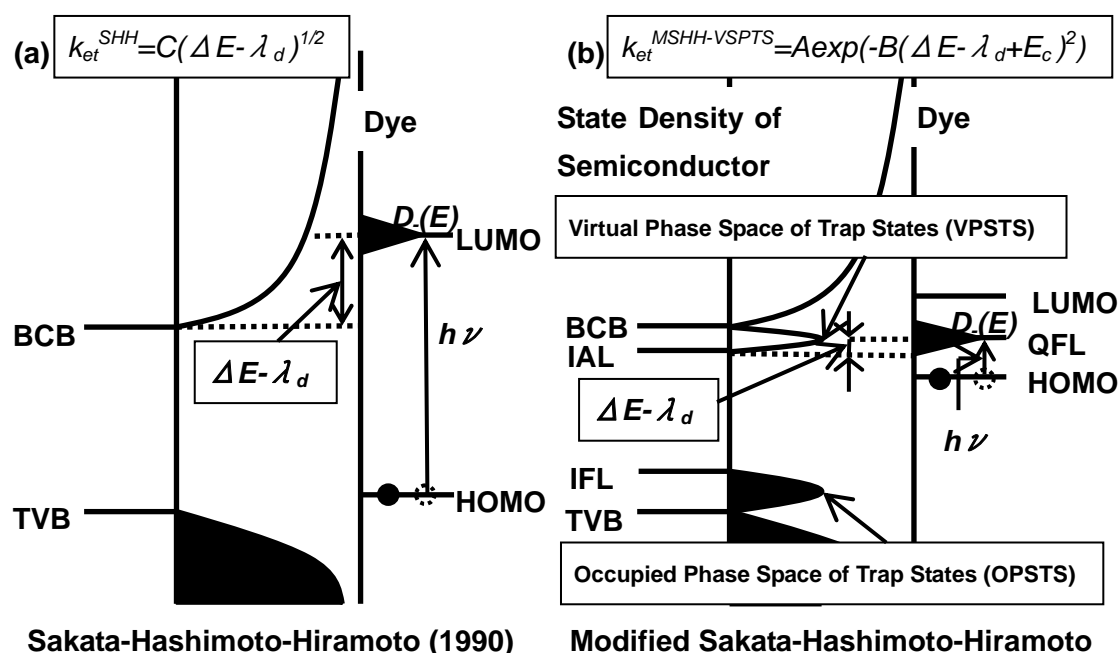


Fig.1 (a) SHH: Density Of State (DOS) of Conduction Band (CB), $\rho(E)$, and Distribution function of an excited dye, $D(E)$, whose peak is located at Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO) which is $(\Delta E - \lambda_d)$ above the Bottom of CB (BCB). ΔE is the energy change related to an ET process, and λ_d is the reorganization energy around dye related to the ET system, which is intrinsic in ET. The SHH has an electron distribution extending to the Top of Valence Band (TVB). (b) MSHH: DOS of CB, $\rho(E)$, and Virtual Phase Space of Trap States (VPSTS) and Distribution function of an excited dye, $D(E)$, whose peak is located at the Quasi Fermi Level (QFL) which is $(\Delta E - \lambda_d)$ above the Intrinsic Acceptor Level (IAL). MSHH has an electron distribution in Occupied Phase Space of Trap States (OPSTS) until the Intrinsic Fermi Level (IFL).

【参考文献】

- [1] K. Schwanitz, U. Weiler, R. Hunger, T. Mayer, and W. Jaegermann, *J. Phys. Chem. C*, **111**, 849 (2007).
 [2] T. Sakata, K. Hashimoto, and M. Hiramoto, *J. Phys. Chem.* **94**, 3040 (1990).
 [3] O. Kitao, M. Yanagida, N. Onozawa-Komatsuzaki, and H. Sugihara, submitted for publication.