

ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	3. 計算化学
中項目	3-4. 材料設計
小項目	3-4-7. 太陽光エネルギー変換材料

概要（200字以内）

色素増感太陽電池を代表とする化学的太陽光エネルギー変換材料は、太陽光エネルギーを安価で高効率に利用する観点から社会的に重要である。光電変換は、太陽光スペクトルと「nmサイズの分子」に内在するエネルギー吸収スペクトルとの共鳴により駆動するが、現在この部分を計算化学で設計することは可能である。光電変換効率をさらに向上させる工夫として、磁場と「cmサイズの材料」に内在するエネルギー吸収スペクトルとの共鳴による誘導電流発生が提案されており、将来はこの部分も計算化学で設計できるようになる。

図。計算化学による光電変換材料設計による誘導電流発生が提案されており、将来はこの部分も計算化学で設計できるようになる。

現状と最前線

○ 「nmサイズの分子」に内在する電子励起固有状態

- 概要
 

色素増感太陽電池を代表とする化学的太陽光エネルギー変換材料は、太陽光エネルギーを安価で高効率に利用する観点から社会的に重要である[1]。光電変換は、太陽光スペクトルと「nmサイズの分子」である増感色素に内在するエネルギー吸収スペクトルとの共鳴により駆動する。
- 現状と最前線
 

現在、「百原子程度の分子」であれば、環境の影響を有効的に取り込みつつ、注目する分子の電子励起固有状態間のエネルギー差 (eV 単位) を定量的議論に足る精度で計算できるので、光電変換材料の増感色素の部分を実験的手法で定量的に設計するのは、計算環境さえ許せば、可能となっている[2]。
- 将来予想と方向性
 

しかしながら、上述の計算は現在では相当に恵まれた計算機環境がないと実行不可能である。今後、実験研究者の手元にある「パソコン」で同等の計算ができるように、新規な理論とその理論に基づく計算プログラムが開発される必要がある。

○ 「cm サイズの材料」 に内在する電子励起固有状態

● 概要

前項の光電変換で駆動された電流は、量子力学で解釈すれば、電池全体にわたる電子定在波である。定在波には位相が伴い、ド・ブロイ波として捕らえた電子は電池全体に渡る電子励起固有状態にある。この概念に基づき、磁場で電子を電子定在波のエネルギーの高い電子励起固有状態に励起して誘導電流を発生させ、太陽光エネルギー変換材料の有効的光電変換効率を著しく向上させる試みが提案されている[3]。

● 現状と最前線

現在、磁場印加色素増感太陽電池は、磁場から電池全体にわたる電子定在波へのエネルギー注入の実証実験が取り組まれ始めたところである。

● 将来予想と方向性

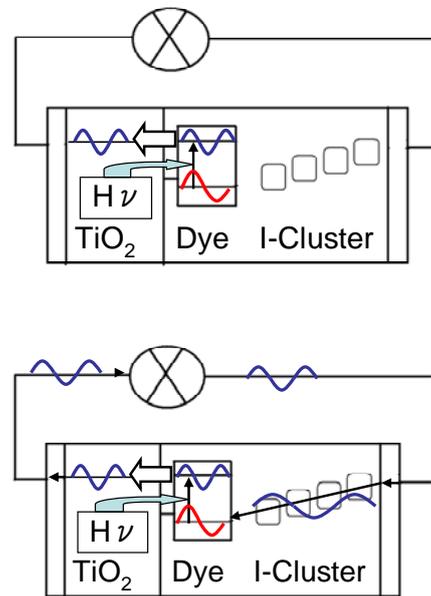
磁場印加の設計は、将来的には計算化学で取り組むことが望ましい。「cm サイズの材料」に内

在する電子固有状態間のエネルギー差(磁束密度で1単位)を定量的議論に足る精度で計算するには、理論、高速計算プログラム、ならびに計算機環境の更なる大きな発展が必要である。

[1]産業技術総合研究所、「太陽光発電技術研究開発 革新的次世代太陽光発電システム技術研究開発 大面積・集積型色素増感太陽電池の研究開発4」、新エネルギー・産業技術総合開発機構 平成16年度～17年度成果報告書(2006)。

[2]杉本学、「色素増感太陽電池に用いられる色素材料の励起状態と励起スペクトル」、ファインケミカル、34(2)、38-58(2005)(シーエムシー)。

[3]北尾修、「太陽電池」、日本国特許庁、特開2006-156245。



図。(上) 界面光誘起電子移動 (下) 色素増感太陽電池全体に渡る電子定在波

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

「nm サイズの分子」に内在する電子励起固有状態を定量的議論に足る精度をもって「パソコンで計算を可能」とする理論とその理論に基づいた計算プログラムの開発。

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

「cm サイズの材料」に内在する電子励起固有状態を定量的議論に足る精度をもって計算を可能とする理論とその理論に基づいた計算プログラムの開発。

キーワード

色素増感太陽電池、太陽光エネルギー、電子励起固有状態、光、磁場

(執筆者：北尾 修)