

## 分子・物質合成プラットフォームにおける利用成果

## 光電子分光装置AC-2による配位高分子の物性評価

近畿大学 大久保貴志

## 【目的】

我々はジチオカルバミン酸という含硫黄有機配位子を用いた金属錯体と種々のハロゲン化銅を反応させることで配位高分子の合成を行い、これらを用いた太陽電池の開発を行っている。太陽電池の設計にとって非常に重要なパラメータである配位高分子のHOMOのエネルギー準位を光電子分光装置 (AC-2) により測定し、基礎的な電池特性を調べる事を目的とする。

## 【成果】

図1に混合原子価一次元配位高分子 $[\text{Cu}_2\text{Cu}^{\text{II}}\text{X}_2(\text{Pip-dtc})_2(\text{CH}_3\text{CN})_2]_n$  (Pip-dtc<sup>-</sup> = piperidine dithiocarbamate; X = Br (1) and I (2))の結晶構造を示す。図2はAC-2によって得られた配位高分子の光電子強度である。配位高分子1、2のHOMOのエネルギーは、それぞれ5.14、5.20 eVである。これらの値は電解液 (4.8 eV) から十分電子を受け取れる範囲である。LUMOの値は吸収スペクトルの吸収端より見積もり、それぞれ3.81、3.91 eVであった。この事から、色素から配位高分子へ電子注入が可能である事が示唆される。図3 (a) は配位高分子1、2を用いた色素増感太陽電池 (DSSCs) の光電流密度-電圧 ( $J-V$ ) の曲線である。得られた太陽電池の特性パラメーター、 $J_{\text{sc}}$ 、 $V_{\text{oc}}$ 、フィルファクター ( $FF$ ) および光電変換効率 (PCE) を表1に示す。配位高分子1を用いたDSSCsの $J_{\text{sc}}$ 値は、配位高分子2のDSSCsのものより高い値を示し、配位高分子1を用いたDSSCの方が高い光電変換効率を示す事が分かった。

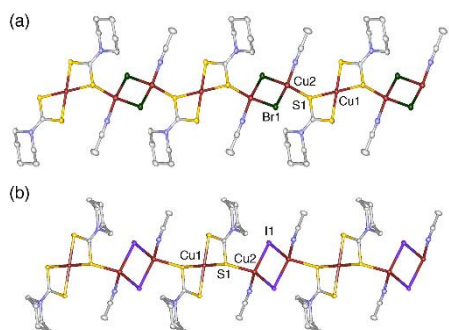


図1. 配位高分子1 (a) および2 (b) の結晶構造

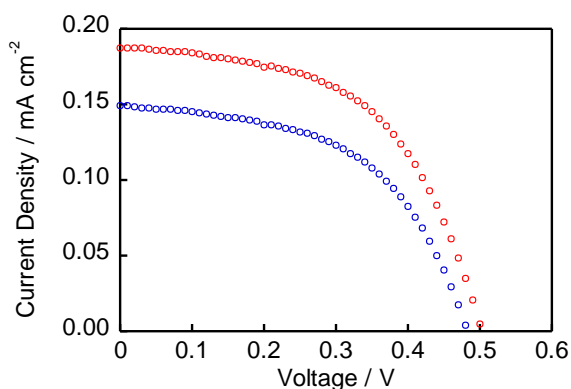


図3. 配位高分子1 (赤丸) および2 (青丸) を用いたDSSCsの光照射下での電流密度-電圧曲線

表1. 配位高分子1および2を用いた色素増感太陽電池の特性パラメータ及び光電変換効率

Complex	$J_{\text{sc}}$ (mA/cm)	$V_{\text{oc}}$ (V)	FF	PCE (%)
1	0.19	0.50	0.54	0.051
2	0.15	0.50	0.52	0.038

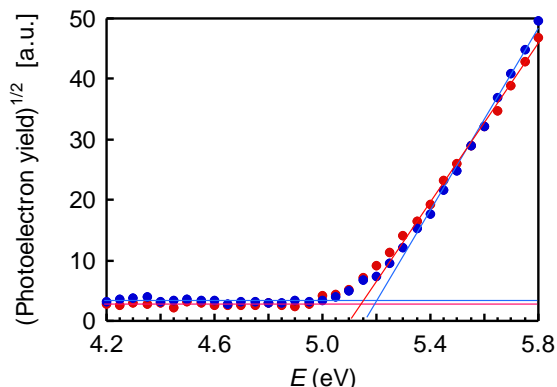


図2. 配位高分子1 (赤丸) および2 (青丸) の光電子スペクトル