

## 研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB	色素増感太陽電池における高効率・低コスト化を目指した光反応ダイナミクスの解明				
研究テーマ (欧文) AZ	Dynamic investigation of photoreaction in dye-sensitized solar cell for high-efficiency and low-cost				
研究氏 代 表 名 者	カカナ CC	姓)ノザワ	名)シュンスケ	研究期間 B	2010 ~ 2012 年
	漢字 CB	野澤	俊介	報告年度 YR	2012 年
	ローマ字 CZ	Nozawa	Shunsuke	研究機関名	高エネルギー加速器研究機構
研究代表者 CD 所属機関・職名	高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 准教授				
概要 EA (600字~800字程度にまとめてください。)					
<p>無限にある太陽光を利用する太陽電池などを高効率化、長寿命化する開発は、エネルギー問題や環境問題の観点から喫緊の課題である。その鍵となっているのが、これらのデバイス全てに共通する、光照射による物質内の電子移動である。しかし、最も基本的な反応要素でありながら、従来の研究手法では、光照射直後に起こるメカニズムを原子レベルで分子構造も含めて詳細に明らかにすることは困難であり、新しい測定法による研究が必要とされていた。光励起による電子状態の変化は、分子構造と結びついており、電子移動過程を包括的に理解するには、電子状態の変化だけではなく、原子レベルの分解能で分子構造と関連付けて議論することが重要である。本研究では主に、色素増感太陽電池において増感剤として使われている Ru 金属錯体の励起状態について、パルス X 線を用いたダイナミクス研究を行った。光照射後と照射前の電子状態の変化を調べた結果、光を照射することによって、100 億分の 1 秒以内にルテニウムからビピリジン分子へ電子が移動し、ルテニウムのイオンが II 価(2+)から III 価(3+)へと変化している様子を観測した。また、この高速の電子移動に伴い、ビピリジン分子がルテニウム原子に 0.04Å(オングストローム)近づき、ルテニウム-ビピリジン間の分子構造に乱れが生じることも判明した。本研究は、太陽電池や光触媒などの基礎反応である電子移動過程の詳細や、その際に生じる分子構造の変化を明らかにしたものである。これは太陽電池を設計する上で重要な情報になると考えられ、更なるデバイスの高効率化などの進展が期待できる。</p>					
キーワード FA	色素増感太陽電池	金属錯体	放射光	分子動画	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>	Coordination and Electronic Structure of Ruthenium(II)-tris-2,2'-bipyridine in the Triplet Metal-to-Ligand Charge-Transfer Excited State Observed by Picosecond Time-Resolved Ru K-Edge XAFS							
	著者名 <sup>GA</sup>	T. Sato, S. Nozawa, A. Tomita, M. Hoshino, S. Koshihara, H. Fujii, and S. Adachi	雑誌名 <sup>GC</sup>	J. Phys. Chem. C					
	ページ <sup>GF</sup>	14232~14236	発行年 <sup>GE</sup>	2	0	1	2	巻号 <sup>GD</sup>	116
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>		発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>		発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	

欧文概要<sup>EZ</sup>

Time-resolved X-ray absorption spectra of photoexcited ruthenium(II)-tris-2,2'-bipyridine ([Ru(II)(bpy)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup>) in the triplet metal-to-ligand charge transfer (3MLCT) state are measured and analyzed to investigate transient structural changes directly related to the photophysical properties of the complex. The results from visible (400 nm) and UV (267 nm) excitation indicate that electrostatic interaction between the oxidized Ru atom and the reduced bipyridine ligand is the dominant factor affecting the Ru-N bond contraction. This thus leads to two groups of Ru ligand distances, one exhibiting the ground-state Ru-N distance and another yielding a slightly decreased Ru-N distance due to the localized MLCT excited state. The EXAFS analysis of the photoexcited complex was analyzed toward one single Ru-N distance, yielding a contraction of 0.04 (0.01) Å with an increased DW factor (corresponding to a 0.05 Å mean increase).