

雙三牙釘金屬錯合物之合成與應用於染料敏化太陽能電池

國立清華大學化學所 博四 周復誠

指導教授：李昶博士



一、研究重點

染料敏化太陽能電池 (dye-sensitized solar cell, DSSC) 於1991年由瑞士科學家Michael Grätzel所發明，是一種薄型太陽能電池，其優勢為製作成本低廉、具柔性特性、低光照的具良好的光電轉換效率；基於以上特點，染料敏化太陽能電池被視為極具潛力的產業。(圖一)為元件基本架構，從左而右分別由導電玻璃、TiO₂、染料分子、電解液、導電玻璃所組成；當照射太陽光時，染料分子吸收光能後，電子從基態躍升至激發態，處於激發態之電子注入TiO₂的導帶後便可傳至外電路，而失去電子的染料分子可由電解液獲得電子而再生。

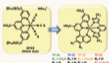
細觀過去染料敏化太陽能電池(DSSC)的研究歷史，為了提升染料敏化太陽能電池(DSSC)的商業應用性，科學家們研究的目標皆朝向增加光子的吸收能力、改善元件上的穩定性、提升太陽能元件的光電轉換效率。本研究主題也朝著上述三項需求著手。以瑞士科學家Michael Grätzel所提出的高效率染料敏化 **black dye(N749)**作為基本架構，針對其現有的缺點進行改良。此分子結構現有的缺點有三項：染料分子吸收係數較低且無法有效吸收較長波長之太陽光，其分子內的單配位基對於金屬的鍵結能力相對較弱，故易於脫落，不利於染料敏化元件商業化，此分子具有異構物，造成合成產率低落。欲改善現有的缺點，本研究設計出新型雙三牙釘配位基金屬錯合物，此設計概念引入兩個三牙釘配位基完全取代原本 **black dye(N749)**的單牙釘配位基，如此不但可以避其異構物的問題，大幅度提升合成的產率，降低成本，更與中心金屬以三牙鍵結的模式提升染料分子的穩定性；此外，雙三牙釘配位基結構大幅提升染料的光吸收係數，使太陽能元件達到極佳的光電轉換效率。

二、研究成果

實驗內容分別設計兩個三牙釘配位基與釘金屬錯物，其中一個pyridine bipyrazole作為輔助配位基，幫助染料吸收太陽光，另一個配位基為 **Qhy anchor**作為主配位基，不但提升吸收太陽光的能力也具有吸附於TiO₂的功用；運用上述兩個配位基順利合成出一系列新型釘金屬錯合物，結構如(圖二)所示，同時我們也嘗試改變配位基的官能化基序，分別使用單環Quinoline基序、Quinoline上衍生物羧基、以及Quinoline不同位置上衍生物(aryl)，再加以比較各官能基對於太陽能電池元件表現的影響。值得一提的是此一系列雙三牙釘配位基金屬錯合物除了有效避免產生異構物的產生，也大幅度提升染料分子的穩定性，並藉由引入再具親氧性的配位基有效提升染料分子的吸收能力。此一現象反應在(圖三)分子吸收光譜上，可清楚發現此一系列新型染料TF-30、TF-33對吸收光能力表現上優於染料N749。另外，製作成太陽能電池元件的相關數據列於(表一)，從元件表現中可發現TF-30與TF-31在整體光電轉換效率上不及N749，這是由於過多平面結構會造成分子間互相堆疊，將配位分子有效吸附於TiO₂表面；為了抑制此現象發生，TF-32與TF-33分別得物立體體積相當於圖(四)所示，有效解決分子間堆疊的現象後，於太陽能電池元件上皆有相當突出的表現，光電轉換效率分別為10.19 %與10.04 %。此一成果不但改變過去染料分子的缺點並在光電轉換效率上有所突破，並發表於知名國際期刊"Angewandte Chemie International Edition"，開創染料敏化太陽能電池另一個研究方向。



〈圖一〉染料敏化太陽能電池工作原理



〈圖二〉N749染料與新型雙三牙釘金屬錯物



〈圖三〉新型染料之吸收光譜圖

Dye (Device)	J_{sc} (mA/cm ²)	V_{oc} (mV)	FF	η (%)
N749	19.6	660	0.71	9.22
TF-30	17.2	670	0.71	8.38
TF-31	19.3	650	0.70	8.76
TF-32	19.2	740	0.72	10.19
TF-33	19.4	730	0.71	10.04

〈表一〉太陽能電池元件表現

三、研究生活與心得

由於近年來能源問題日漸嚴重，因此選擇從事太陽能相關研究，希望能盡一己之力為這個產業帶來貢獻。在研究的過程中時常遭遇挫折，最常經歷的挫折是投入大量的時間與精神在合成新型材料後，發現應用於太陽能電池元件上其光電轉換效率並不理想。每當遇到這種情況就只能從理論檢驗染料分子的設計，並針對存在的缺點改善，再次投入時間重新合成染料分子，並觀察元件表現，就這樣不斷重複改良，直到有所突破為止。雖然過程艱辛，但每當看著自己親手合成出的材料應用於元件上有所突破的表現時，那莫大或就是無法言喻的，甚至可以夢想這些材料未來還能應用於商業產品上，如此便能真正將研發與產業結合，進而改善當前的能源危機。

