

投稿類:化學類

篇名：

染料敏化太陽能電池分子結構與轉換效率的關係

作者：

湯雨誼。桃園市立大園國際高中。高二 9 班

葉珮婷。桃園市立大園國際高中。高二 9 班

李奇萱。桃園市立大園國際高中。高二 9 班

指導老師：

邱志強老師

壹●前言

一、研究動機

近年來，隨著科技的進步，人類的需求也日益漸增，生活中無不用到各種能源，但人類在地球上過度的開發，資源早已不敷使用，尤其是在 1970 年的石油危機，讓全球警覺到石油、電力或其他自然資源短缺的現象，也發現大量使用化石燃料造成全球暖化的環境問題。為了解決能源與環境問題，除了節約能源，各國也開始研究既環保又永續的新能源來滿足人類各種需求。台灣能源仰賴進口，經濟成長與人民生活每每受到國際能源價格波動的衝擊，因此開發自給自足的新能源是必要的選項。

除了火力發電以外，台灣目前的發電方式還有核能、水力和風力等，然而核能的存廢沒有共識，水力因季節豐竭不均，風力也隨天氣強弱不定。所幸台灣地處亞熱帶地區，一年太陽照射到地球表面的能量為 32×10^{24} 焦耳，換句話說，假設地球表面被太陽能電池覆蓋 0.1%，並以 10% 的轉化效率運轉，產生出來的能量就能滿足人類目前的需求。太陽能為人類創造了一種新的生活型態，使社會及人類進入一個節約能源減少污染的時代。

二、研究目的

太陽能電池主要分成結晶系太陽能、薄膜型太陽能電池、染料敏化太陽能電池(有機太陽能電池的一種)、半導體太陽能電池。目前以結晶太陽能電池為主流，然而矽晶太陽能電池不論在原料矽的純化或者後續的半導體製程，都會消耗大量能源並產生毒物污染，因此，便開啟了以純有機物質為主要成分的染料敏化太陽能電池 (dye-sensitized solar cells, 簡稱 DSSCs) 的研究。

目前 DSSCs 仍有許多發展的空間，例如不同的染料分子結構，都有可能影響光電轉換的效率，本論文即是探討染料分子結構與 DSSCs 轉換效率的關係。

貳●正文

這個部分我們首先簡單地介紹 DSSCs 的基本組成與工作原理，再論述 DSSCs 的優缺點，最後探討染料分子結構與 DSSCs 光電轉換效率的關係。

一、DSSCs 的基本組成與工作原理

染料敏化太陽能電池的基本組成有工作電極、二氧化鈦、染料分子、電解質和對

電極等五部分（圖 1a），各有不同的能量層級，其光電轉換原理可以簡單歸納為下列五步驟（圖 1b）：

- （1）當染料分子吸收光子後，其電子從 HOMO（highest occupied molecular orbital，最高填有電子分子軌域）被激發到 LUMO（lowest unoccupied molecular orbital，最低未填電子分子軌域）。
- （2）電子注入到二氧化鈦的傳導帶，此時染料分子被氧化。
- （3）電子流經工作電極、外電路、負載到對電極。
- （4）對電極將電子傳遞給電解質。
- （5）電解質再把電子給染料分子，將染料分子還原。

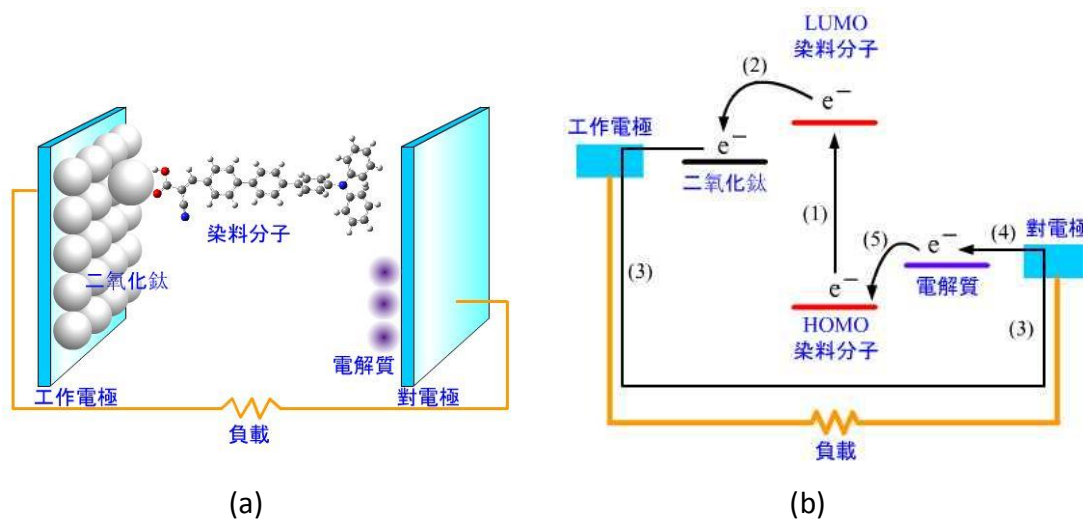


圖 1 DSSCs 的基本組成(a)及其能量層級與光電轉換原理(b)

二、DSSCs 的優點與缺點

DSSCs 的基本組成只有導電玻璃、二氧化鈦、碘液和染料分子，製程容易與低成本是它的優點之一，其它優點還有分子吸光係數高，所以低照度仍具有光電轉換功能；此外，二氧化鈦的物理、化學性質穩定又無毒性，無污染環境之虞；最不同於矽晶太陽能電池的是染料分子可以印刷在可撓曲且透明的基板上，使 DSSCs 具有可撓曲性也兼具透明度。然而 DSSCs 也並非完美，其目前的光電轉換效率不佳，以及染料分子容易分解等等性質，便是最為詬病的缺點（表 1）。

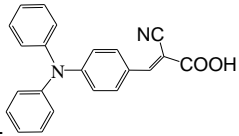
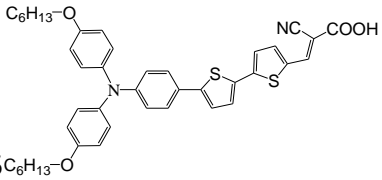
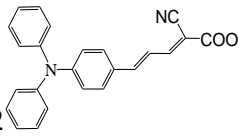
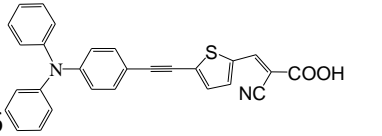
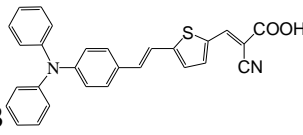
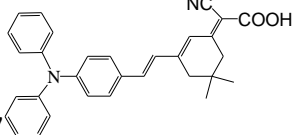
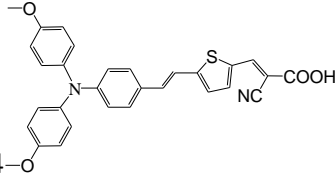
表 1 DSSCs 的優點與缺點比較表

優點	缺點
1. 製程容易，成本低。	1. 光電轉換效率不佳。
2. 高吸光度，低照度仍可光電轉換。	2. 染料容易分解。
3. 二氧化鈦物性化性穩定無毒。	
4. 具有可撓曲與透明特性。	

三、染料分子結構與 DSSCs 光電轉換效率的關係

經過文獻的蒐查，我們選定七個三苯基胺 (triphenylamine, 簡稱 TPA) 的衍生分子 (表 2)，用以探討染料分子結構對於光電轉換效率 (photoelectric conversion efficiency, 簡稱 PCE) 有何影響。

表 2 三苯基胺衍生分子名稱、結構及其光電轉換效率

名稱 / 結構	PCE (%)	名稱 / 結構	PCE (%)
 <p>TPA1</p>	3.3	 <p>TPA5</p>	7.3
 <p>TPA2</p>	5.3	 <p>TPA6</p>	5
 <p>TPA3</p>	5.1	 <p>TPA7</p>	5.7
 <p>TPA4</p>	6.9		

(一) 染料分子長度對 PCE 的影響

依照表 2 所示，染料分子長度的大小依序是: TPA5 > TPA4 > TPA7 > TPA3 > TPA2 > TPA6 > TPA1。首先，由分子短到長來比較 PCE 的差值：

1. TPA1 到 TPA6 增加 1.7；
2. TPA6 到 TPA2 增加 0.3；
3. TPA2 到 TPA3 減少 0.2；
4. TPA3 到 TPA7 增加 0.6；
5. TPA7 到 TPA4 增加 1.2；
6. TPA4 到 TPA5 增加 0.4。

可以從每組差值發現大部分的染料分子增長，其 PCE 都會增加，尤其是 TPA1 到 TPA6 增加 1.7，是 PCE 差值最大，同時也是染料分子增長最明顯的一組。TPA6 到 TPA2 的 PCE 只有增加 0.3，長度差相對 TPA1 到 TPA6 沒有特別明顯。但是，唯獨 TPA2 到 TPA3 的 PCE 減少 0.2，這部分可能就要探討到分子結構內部的關係。其中還藏著一個特別的因素，TPA1 到 TPA6 多了一個雙鍵 PCE 增加 1.7，而 TPA4 到 TPA5 少了一個雙鍵 PCE 只增加 0.4。

所以我們推論以上分子長度增長越多、結構緊密，PCE 值也增加越多。表示分子之間作用力強，染料轉換效率相對提高。

(二) 分子中噻吩個數對 PCE 的影響

參考表 2，TPA1 到 TPA6 多了一個雙鍵和一個噻吩 PCE 增加 1.7；TPA3 到 TPA2 少了一個噻吩 PCE 增加 0.2；TPA7 到 TPA4 把二甲基環己烯改成噻吩再加上 2 個 O-CH₃PCE 增加 1.2；TPA4 到 TPA5 把雙鍵改成噻吩在加上 2 個 O-C₆H₁₃ 增加 0.4。這三組差距的 PCE 都是增加，最關鍵是 TPA3 到 TPA2 這組，染料分子結構中只少了噻吩，PCE 卻增加 0.2，我們推論噻吩會減少 PCE 值 0.2。所以 TPA1 到 TPA6 增加雙鍵及噻吩 PCE 增加 1.7 扣除噻吩 0.2，可以推論雙鍵增加 PCE 值 1.5。除同時也可以發現 TPA7 到 TPA4 這組 PCE 增加 1.2，如果扣除一個噻吩 PCE 值 0.2，那麼剩下 PCE 值 1 就是 O-CH₃ 所增加的值。

(三) 接 O-CH₃ 和 O-C₆H₁₃ 對 PCE 的影響

表 2 顯示，唯有接 O-CH₃ 的 TPA4 與接 O-CH₃ 的 TPA5 的 PCE 值比較高。接有 O-CH₃ 和 O-C₆H₁₃ 分別在 TPA4、TPA5 染料分子中出現，其中 TPA4 在第二點有討論到我們猜測 O-CH₃ 增加的 PCE 值是 1，接下來我們討論 TPA5 中的 O-C₆H₁₃，TPA4 到 TPA5 的 PCE 增加 0.4，其中它把雙鍵換成噻吩，前面一、二點討論提到雙鍵會增加 PCE 值 1.5、噻吩會減少 0.2，加起來 PCE 值會增加 1.3，但加進 O-C₆H₁₃ PCE 值變成增加 0.4，所以我論 O-C₆H₁₃ 減少 PCE 值 0.9，O-C₆H₁₃ 的碳數是 O-CH₃ 的 6 倍，PCE 並沒有因此而增加，所以我們推論碳數與 PCE 成負關係。

參●結論

目前地球面臨能源不足的問題，為了讓地球能永續發展而研發太陽能電池，必須用最節省材料且達到最高的轉換效率。我們針對染料敏化太陽能電池來做討論，其成本低，相較於其他電池材料無污染環境。關鍵在於轉換效率，我們以 7 個不同的三苯胺基來做為探討染敏分子與 PCE 之間的關係。歸納出三個影響 PCE 的因素：分子長度、分子中噻吩個數以及有無環氧烷及碳數的差異。發現長度越長、結構緊密以及含有雙鍵的染敏分子，染料轉換效率提高；分子中有噻吩的染敏分子，PCE 相對會減少；有環氧烷的染敏分子 PCE 值高，但碳數增加 PCE 減少，所以推論氧原子也會使 PCE 增值。這些足以證明染敏的分子結構與轉換效率有緊密的關係，找出正確的數據，以最低成本，達到最高的轉換效率。

只要能解決光電轉換效率的問題，以 DSSCs 具備可撓性、多彩性與可透光性等特性來看，將能大幅擴展 DSSCs 的應用範圍。相信不久的將來，建築窗材、屋頂與外牆、大樓的玻璃帷幕，都有機會使用上 DSSCs，不僅具有遮陽、絕熱、發電的功能，也兼具美化建築物的外觀。

肆●參考資料

註一、林思妤(2009)。有機染料分子結構對染敏化太陽能電池效能的影響。國立中正大學化學暨生物化學系:碩士論文。

註二、陳映竹(2009)。奈米複合類固態染料敏化太陽能電池。國立中央大學化學學系:碩士論文。

註三、L. Alibabaei *et al.* (2010). Molecular design of metal-free D- π -A substituted sensitizers for dye-sensitized solar cells. *Energy Environ. Sci.*, 3, 1757 – 1764.

註四、Elena Longhi. (2010). Molecular Design and Synthesis of Dyes For Dye-Sensitized

Solar Cells (DSSCs). Universita Degli Studi Di Milano Dipartimento di Chimica Organica e Industriale: Doctoral dissertation.

註五、Wai-Yeung Wong, & Alaa S Abd-El-Aziz. (2012). **Molecular Design and Applications of Photofunctional Polymers and Materials.** Cambridge: The Royal Society of Chemistry.

註六、科學 Online

<http://highscope.ch.ntu.edu.tw/wordpress/?p=8467>

註七、維基百科

<http://zh.wikipedia.org/wiki/%E6%9F%93%E6%96%99%E6%95%8F%E5%8C%96%E5%A4%AA%E9%98%B3%E8%83%BD%E7%94%B5%E6%B1%A0>

註八、財經知識庫

<http://www.moneydj.com/KMDJ/Wiki/WikiViewer.aspx?keyid=dc1dc110-eaff-4a2a-8f5b-81f0654aed21>