

1P131

## 有機薄膜太陽電池の高効率化に向けた高比誘電率電子供与体の理論設計

(東大院工<sup>\*</sup>、JST-CREST<sup>\*\*</sup>) ○三嶋謙二<sup>\*,\*\*</sup>、山下晃一<sup>\*,\*\*</sup>

### Theoretical modelling of high-dielectric constant donors for high-conversion organic film solar cells

(The Univ. of Tokyo<sup>\*</sup>、JST-CREST<sup>\*\*</sup>) ○Kenji Mishima<sup>\*,\*\*</sup>、Koichi Yamashita<sup>\*,\*\*</sup>

【序】近年、再生可能エネルギーへの需要が高まるにつれ、太陽電池が注目を集めている。バルク・ヘテロ結合構造に基づく有機薄膜太陽電池は、比較的容易な加工、機械的柔軟性、低価格などの利点により、特に注目を浴びている。光変換効率を有効に高めることが最重要課題であるために、様々な実験的・理論的試みが盛んに行われている。その結果、現在、最大約 10% の光変換効率が達成されている。様々な化学的因子が光変換効率を左右することが既に実験的・理論的に確認されているが、特に、光吸収によって生成したドナー・アクセプター間のエキシトンを効率的に分離するためには、比誘電率の高い有機材料を開発することが、光変換効率向上に不可欠であることが明らかになりつつある[1-5]。[5]においては、比誘電率が光変換効率を左右する最大要因であることが指摘され、比誘電率 10 を超えると、光変換効率は 20% に近づくことが理論的に予測された。比誘電率が光変換効率を決定することを理解する最も直感的な物性的原因は、電流を生成するためには、ドナー・アクセプター間で光生成されたエキシトンが効率的に解離することが前提となるが、電子—正孔間のクーロン則

$$V(r) = -q^2 / (\epsilon_r \epsilon_0 r) \quad (1)$$

から予測されるように、比誘電率  $\epsilon_r$  が大きいほど電子—正孔間引力は小さくなり、解離が容易になることである。現在、最も実用的に使用されている P3HT(ドナー)、PCBM(アクセプター)の比誘電率は約 4 であり、より比誘電率の高い分子を用いれば、現在の光変換効率を向上させることが可能であると予想される。そこで、本研究では、量子化学に基づく第一原理計算に基づいて、高比誘電率(約 10)ドナー分子の理論設計を行い、その分子物性・光物性・実現可能性について議論する。

【計算方法】ドナー分子の構造最適化・分子軌道・HOMO-LUMO ギャップ、分極率、屈折率計算には、密度汎関数法 B3LYP/6-31g<sup>\*</sup>、ドナー・アクセプター間 binding energy、吸収スペクトル計算には、密度汎関数法 CAM-B3LYP/6-31g<sup>\*</sup>を用いた。比誘電率  $\epsilon_r$  は、分極率  $\alpha$  から、Clausius-Mossotti 公式

$$(\epsilon_r - 1) / (\epsilon_r + 2) (M/d) = (4/3) \pi N \alpha \quad (2)$$

により算出した。密度  $d$  は、原子団寄与法により求めた。また、屈折率は、真空の透磁率を仮定して、

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (3)$$

から計算した。量子化学計算には、Gaussian09 を用いた。

【結果と考察】本研究で求めた最適化分子構造・HOMO・LUMO の一例を、図 1 に示す。一般的な法則として、 $\pi$  共役系を長くするほど、比誘電率  $\epsilon_r$  は増大することが知られている。実

際、図1の分子では、この法則と一致して、分子のユニット数が増大するほど、比誘電率  $\epsilon_r$  も増大することがわかる。この mol9 系列は、現在までの我々の計算の中で、最大の比誘電率を示すドナーである。図2には、様々なドナーの HOMO-LUMO ギャップと binding energy を示す。

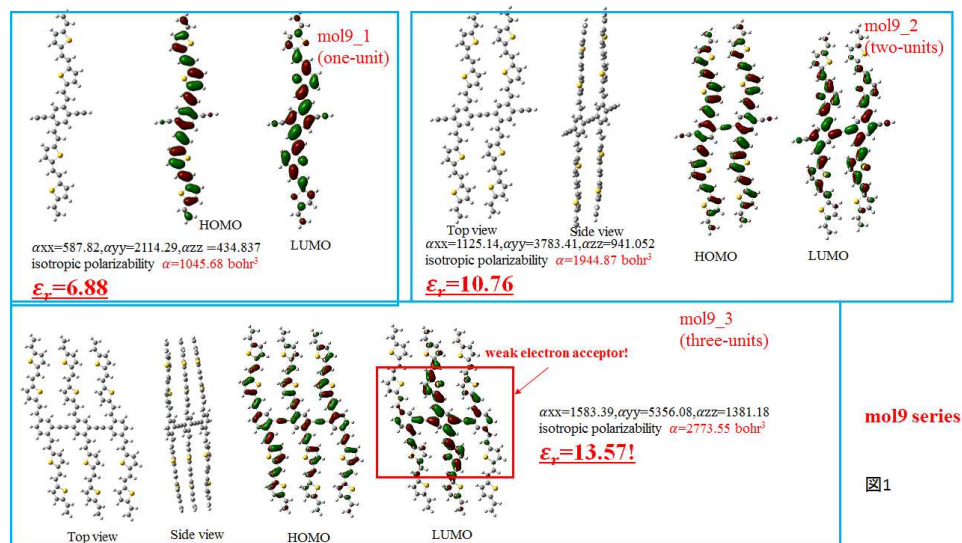


図1

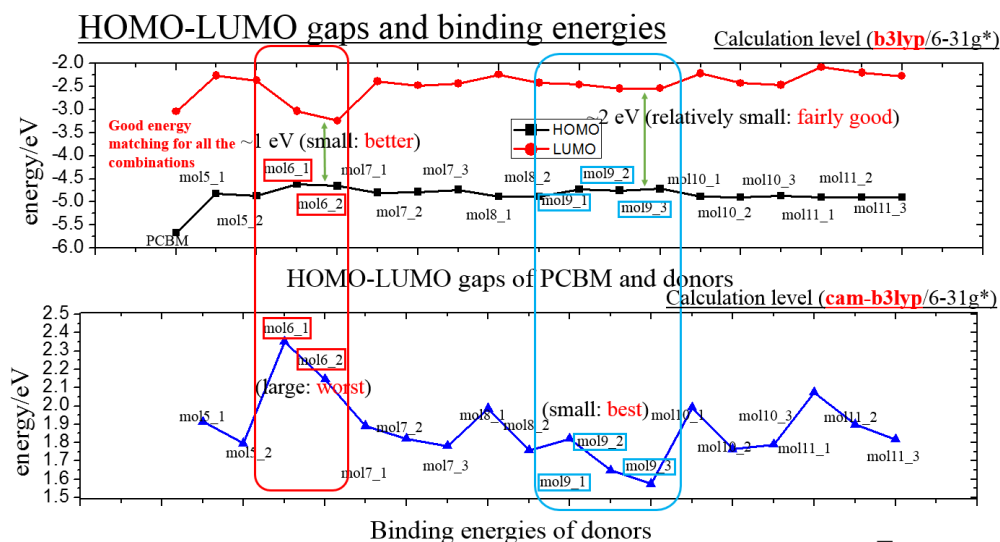


図2

比誘電率が最も大きな mol9 系の HOMO-LUMO ギャップは比較的小さく、また、binding energy も最小であることから、mol9 系のドナーは、高光変換効率有機材料としての候補であると考えられる。屈折率、実験可能性などの詳細については、当日、報告する予定である。

[1] X.-Y. Zhu, Q. Yang, and M. Muntwiler, *Acc. Chem. Res.*, **42**, 1779 (2009).

[2] M. Lenes, F. B. Kooistra, J. C. Hummelen, I. Van Severen, L. Lutsen, D. Vanderzande, T. J. Cleij, and P. W. M. Blom, *J. App. Phys.*, **104**, 114517 (2008).

[3] N. Cho, C. W. Schlenker, K. M. Knesting, P. Koelsch, H. L. Yip, D. S. Ginger, and A. K.-Y. Jen, *Adv. Ene. Mater.* **4**, 1301857, (2014).

[4] N. Camaioni and R. Po, *J. Phys. Chem. Lett.*, **4**, 1821 (2013).

[5] L. J. A. Koster, S. E. Shaheen, and J. C. Hummelen, *Adv. Ene. Mater.* **2**, 1246, (2012).