

## 有機薄膜太陽電池に関する理論的研究

(理研・計算科学研究機構<sup>1</sup>, 首都大<sup>2</sup>) ○田代 基慶<sup>1</sup>, 今村 穰<sup>2</sup>, 河東田 道夫<sup>1</sup>, 中嶋 隆人<sup>1</sup>

### Theoretical Study on Organic Photovoltaics

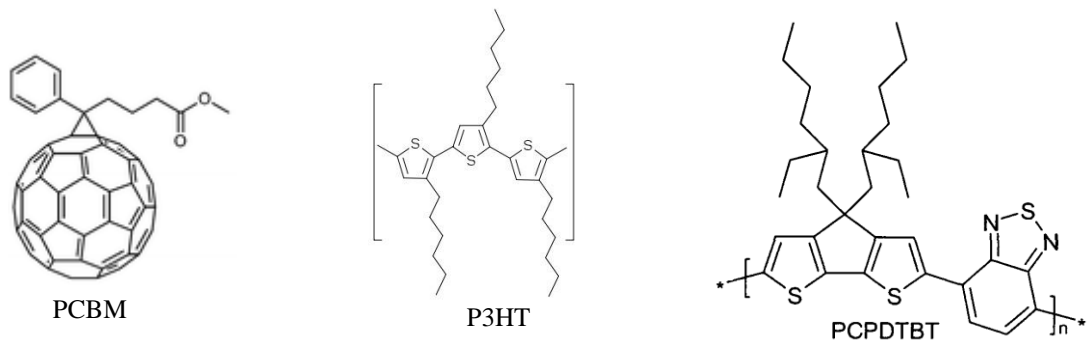
(RIKEN AICS<sup>1</sup>, Tokyo Metro. Univ.<sup>2</sup>) ○Motomichi TASHIRO<sup>1</sup>, Yutaka Imamura<sup>2</sup>,

Michio Katouda<sup>1</sup>, Takahito Nakajima<sup>1</sup>

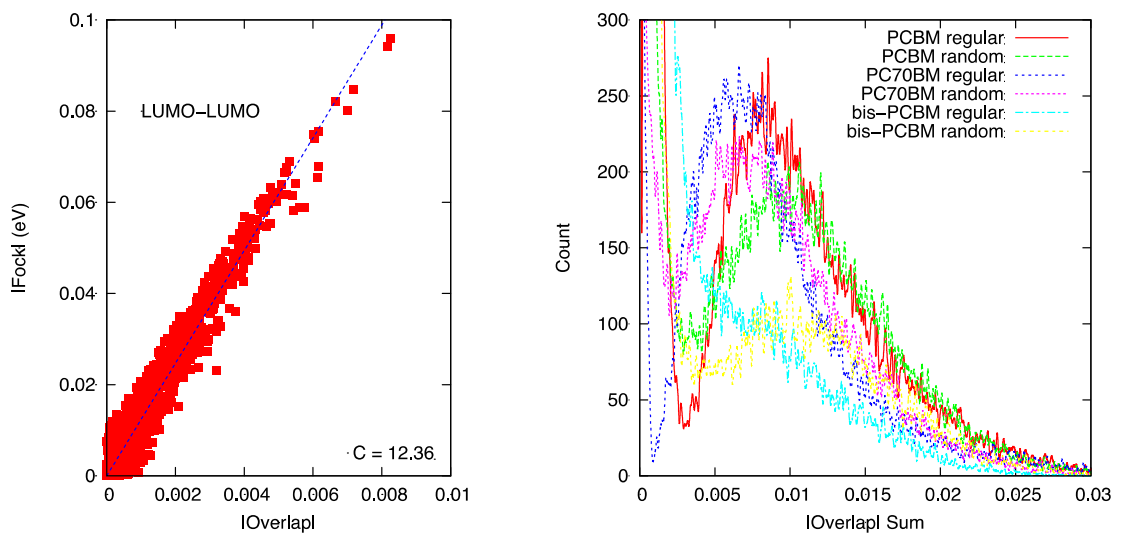
有機薄膜太陽電池は従来の太陽電池に比べ比較的製造コストが掛からず、軽量・折り曲げ易い、複雑な形状の物体へも塗布的手法で貼り付けることが可能などの特徴を持っているため、次世代太陽電池の1つとして注目を集めている。一方で、シリコン系太陽電池と比べると変換効率・耐久性などの面で改善の余地があるため、製品レベルでの開発・素過程に関する基礎的研究などが多くの企業・研究機関で盛んに行われている。

多くの場合、有機薄膜太陽電池は2つの電極の間に電子供給体(ドナー)・電子受容体(アクセプター)からなる発電層(有機分子薄膜)が挟まれた構造を持ち、発電層はバルクヘテロジャンクションと呼ばれるドナー・アクセプター領域が入り混じった特徴的な構造を持っている。また、ドナー材料としては $\pi$ 共役高分子が、アクセプター材料としてはフラーレン誘導体が良く用いられている。光が照射された際は、1. ドナー領域での励起子(電子・正孔対)生成・拡散、2. ドナー・アクセプター領域境界における励起子の電子・正孔への分離、3. 分離した電子・正孔それぞれがドナー・アクセプター領域を通過して電極に到達する、という仕組みで電荷生成・電荷取り出しが実現していると考えられているが、その詳細な機構については議論が続いている[1]。

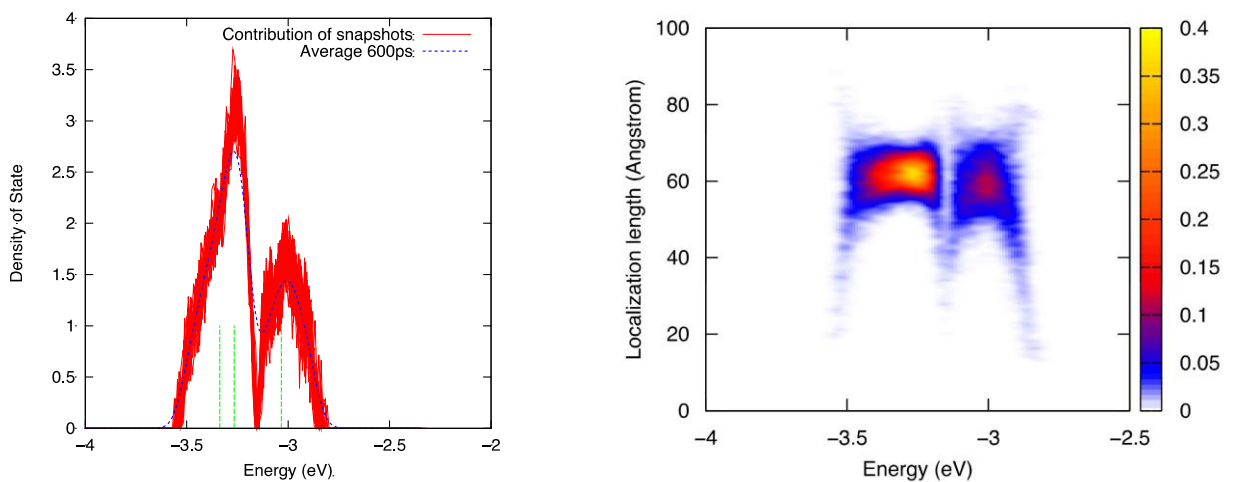
我々は有機薄膜太陽電池での電荷分離・移動等の微視的機構の理解を目的としてP3HT・PCPDTBT(下図)などの $\pi$ 共役高分子からなるドナー、PCBM(下図)などのフラーレン誘導体からなるアクセプターを対象とした研究を行っているが、特に、励起子が正孔と電子に分離する際に生成される電荷移動状態や関与する分子軌道の性質などに着目している。電荷分離過程においてはアクセプター領域での電子の非局在性を考慮することが重要だとする議論があるものの、対象とする分子が大きいこともあって系統的な計算の例はそれほど多くはない。今回、分子動力学計算で取得した構造をもとにしてアクセプター領域におけるフラーレン誘導体同士の電子カップリングを求め、軌道の非局在化の程度・軌道エネルギーの変化等を調査した。電子カップリングに関しては、Fock行列から求める方法と軌道の重なりから推定する方法の2通りについて比較している。分子としてはPCBM, bis-PCBM, PC70BMを考慮した。本発表では、これらの電子カップリングを計算する手法の比較検討・分子種・構造などが結果に与える影響などを中心に報告する。以上に加えて、ドナー・アクセプター界面における励起子から電荷移動状態への遷移・再結合に関しても議論する予定である。



PCBM LUMO-LUMO 電子カップリングと軌道の重なり (左)  
MD 配置に対して得られた軌道の重なるの頻度分布(右).



PCBM LUMO~LUMO+2 軌道エネルギーの変化 (左)、各状態(軌道)の非局在性の程度(右).  
両方とも MD 計算(216 PCBM)で得られた構造に対する結果.



[1] Few, Frost and Nelson, Phys.Chem.Chem.Phys. **17** 2133 (2015).