

次世代有機太陽電池に関する自動材料探索スキーム

¹首都大院理工, ²東洋大, ³理研AICS
○今村穰¹, 田代基慶², 河東田道夫³

Automatic Search Scheme for Next-generation Organic Solar Cells

○Yutaka Imamura¹, Motomichi Tashiro², Michio Katouda³

¹ Graduate School of Science and Engineering, Tokyo Metropolitan University, Japan

² Department of Applied Chemistry, Toyo University, Japan

³ Advanced Institute for Computational Science, RIKEN, Japan

【Abstract】 Organic photovoltaic cells consisting of electron donor materials, usually semiconducting polymers, and electron acceptor materials, usually fullerene derivatives, are one of promising solar cells since organic photovoltaic cells have good features of low cost and flexibility. However, organic photovoltaics has not reached the practical power conversion efficiency, 15% and, therefore, new organic photovoltaic materials should be developed. This study searches for novel organic photovoltaic materials by computational science. Specifically, we examine new donor-acceptor type polythiophene used as a donor material in organic photovoltaics.

Unit structures for the polythiophene are automatically generated using libraries for donor and acceptor units. Using frontier orbital levels, photovoltaic characteristics such as short-circuit current densities J_{sc} , open-circuit voltage V_{oc} , and power conversion efficiencies (PCEs), were estimated. The results of photovoltaic characteristics are consistent with experimental results.

【序】次世代有機太陽電池である有機薄膜太陽電池は、低コストや低環境負荷を特長とする新しいエネルギー源として注目されている。有機薄膜太陽電池では、電子供与体と電子受容体から形成されている。これまで、電子供与体としてポリチオフェン誘導体、電子受容体としてフラーレン誘導体が頻繁に用いられてきたが、最近ではすべてポリマーから形成される有機薄膜太陽電池も開発されている。しかし、実用化の基準である光電変換効率 15%にはまだ達しておらず、今後更なる有機薄膜太陽電池材料の開発・設計が必要である。本研究では、ライブラリから自動でポリマーを生成し、太陽電池の特性を検討するスキームの開発を行った[1,2]。

【結果と議論】本研究では、ドナー・アクセプター型の新規ポリチオフェン(図 1)に関して検討を行った。ドナー・アクセプター型ポリマーは、最高占有軌道(HOMO)-最低非占有軌道(LUMO)のエネルギー準位の設計が容易であるため新規材料に最適であり、実際に高い光電変換効率が報告されている。

有機半導体材料でよく用いられるドナーおよびアクセプター部位のライブラリを作成し、それに基づきポリチオフェンの単位ユニットを自動生成した。得られた軌道エネルギーから、太陽電池特性で

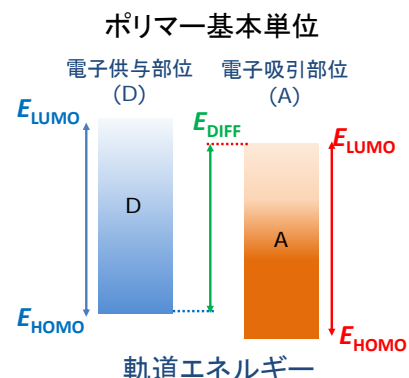


図1 ドナー・アクセプター型ポリマーの軌道エネルギー

ある短絡電流(J_{sc})、開放電圧(V_{oc})、光電変換効率(PCE)を計算した。短絡電流は、以下の式を用いて見積もった。

$$J_{sc} = \int EQE(\omega) * \Phi_{AirMass1.5}(\omega) d\omega, \quad (1)$$

$$EQE(\omega) = 0.65 * \Theta(\hbar\omega - \varepsilon_{Gap}^{Polymer}) d\omega, \quad (2)$$

Air Mass 1.5 の太陽光を用いた。EQE のパラメータは標準的な 0.65 とした。次に開放電圧は、Scharber のモデルを用いて見積もった。

$$eV_{oc} = \varepsilon_{LUMO}^{Acceptor} - \varepsilon_{HOMO}^{Polymer} - 0.3 \text{ eV}, \quad (3)$$

電子受容体として PCBM を仮定し、 $\varepsilon_{LUMO}^{Acceptor}$ は、以前の研究で用いられていた -4.3 eV を採用した。光電変換効率は、以下の式で求めた。

$$PCE = \frac{V_{oc} J_{sc} FF}{P_{in}}, \quad (4)$$

曲線因子 FF は、0.7 とした。

図 2 に 420 ポリマーの短絡電流を示した。点線および実線で囲ったポリマーグループは、それぞれジケトピロロピロール(DPP)およびジアジン(Diazine)のユニットを含んでおり、高い短絡電流を示した。特に、ジアジンを含むポリマーでは、 40 mA cm^{-2} 程度の短絡電流を示した。一方、 V_{oc} に関しては、実線で囲ったナフトビスチアジアゾール(NTz)およびナフトビスオキサジアゾール(NOz)を含むポリマーが、1.5 eV を超える大きな V_{oc} を示し、HOMO 準位が他のポリマーより低いことが示唆された。

PCE に関しては、それぞれ点線および実線で囲まれた DPP, NOz および NTz のアクセプター単位を含む 3 つのポリマーグループが 10% 程度を示し、OPV 材料として適していることが示された。実際、NOz, NTz, DPP 骨格を含むポリマーは高い光電変換効率を示すことが知られており、実験結果と矛盾しない。このことから、軌道エネルギーを用いて、有望なポリマーの太陽電池特性を予測することが可能なことがわかった。

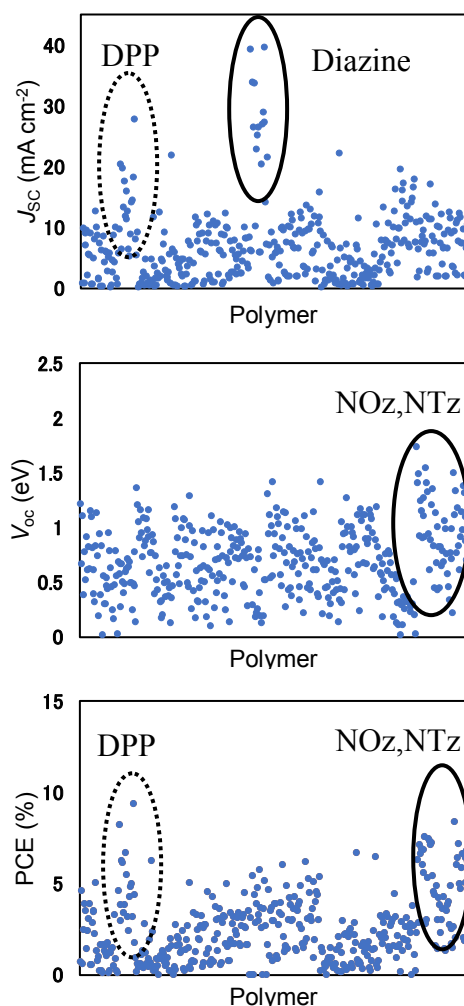


図 2 ポリマー毎の J_{sc} , V_{oc} , PCE

[1] T. Matsui, Y. Imamura, I. Osaka, K. Takimiya, and T. Nakajima, *J. Phys. Chem. C*, **120**, 8305 (2016)

[2] Y. Imamura, M. Tashiro, M. Katouda, and M. Hada, *J. Phys. Chem. C*, to be submitted.