

令和4年度 学内研究助成金 研究報告書

| | | |
|----------|---|--------------------------------------|
| 研究種目 | <input type="checkbox"/> 奨励研究助成金 | <input type="checkbox"/> 研究成果刊行助成金 |
| | <input checked="" type="checkbox"/> 21世紀研究開発奨励金 (共同研究助成金) | <input type="checkbox"/> 国際共同研究推進助成金 |
| | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 研究課題名 | 高効率三元系有機薄膜太陽電池の実現に向けた材料開発 | |
| 研究者所属・氏名 | 研究代表者：理工学部エネルギー物質学科・大久保貴志 共同研究者：理工学部エネルギー物質学科・須藤 篤 ：情報学部情報学科・半田 久志 ：理工学部エネルギー物質学科・田中 仙君 ：理工学部理学科化学コース・松本 浩一 | |

1. 研究目的・内容

半透明有機薄膜太陽電池はビルの窓ガラスやブラインド、マンションのベランダの手摺、ビニールハウスなど従来のシリコン太陽電池では設置が困難であったあらゆる場所への応用が可能であり、光電変換効率の更なる向上が実現すれば、再生可能エネルギーの普及に大きく貢献する可能性がある。今後の有機薄膜太陽電池の高効率化における一つの鍵は非フラーレンアクセプター (non-fullerene acceptor) を用いた太陽電池であり、もう一つは三元系有機薄膜太陽電池であると考えている。本研究では計算科学を活用した分子設計と、材料合成、デバイス開発・評価を融合することで実用可能な高効率有機薄膜太陽電池を実現するとともに、高効率有機薄膜太陽電池開発のためのマテリアルズ・インフォマティクスの基礎を構築することを目的として研究を行う。

2. 研究経過及び成果

本研究では計算科学を活用した分子設計と、材料合成、デバイス開発・評価を融合することで実用可能な高効率有機薄膜太陽電池を実現するとともに、高効率有機薄膜太陽電池開発のためのマテリアルズ・インフォマティクスの基礎を構築することを目的として研究を行っている。具体的には以下のそれぞれの研究テーマについて研究を行った。

(a) 新規非フラーレンアクセプターの開発

有機薄膜太陽電池のアクセプター材料としては従来よりPCBMに代表されるフラーレン誘導体が用いられてきた。しかし、最近では可視領域に強い吸収を示す非フラーレンアクセプターが注目され、有機薄膜太陽電池の光電変換効率は大幅に向上している。本研究では、これまで主に新規非フラーレンアクセプターとしてベンゾトリチオフェン誘導体およびベンゾチアジノフェノチアジン誘導体の合成を行ってきたが、令和4年度は更にπ拡張ジケトピロピロール誘導体の開発を行った。ジケトピロピロールは有機薄膜多様電池のアクセプターユニットとして使われる発光性色素であり、本研究ではこの骨格を更に拡張した発光性色素を合成し、それらを様々な置換基と組み合わせることで様々な非フラーレンアクセプターを合成した。次年度はそれらを用いた薄膜太陽電池の作製と評価を行う予定である。また、高効率有機薄膜太陽

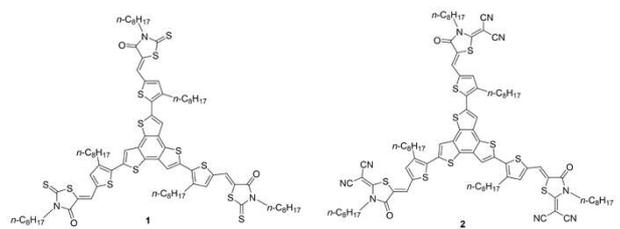


図1, ベンゾトリチオフェン誘導体

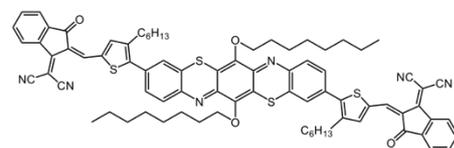


図2, ベンゾチアジノフェノチアジン誘導体

電池材料開発のためのマテリアルズ・インフォマティクスの基礎を構築することを目的に、本研究ではモンテカルロツリーサーチと量子化学に基づく深層学習モデル(QDF)を組み合わせた機械学習による進化的な方法を利用した新規非フラーレンアクセプターの設計に取り組んでいる。図3は有機薄膜太陽電池の非フラーレンアクセプター材料として現在最も有望なY6の骨格を用いて分子探索を行った結果であり、図3の左下に示す Y6 よりも長波長側に吸収帯を持ち、更に吸収係数の高い分子が提案された。

(b) 狭バンドギャップポリマーの開発

従来 P3HT の様なチオフェン誘導体が有機薄膜太陽電池の p 型半導体として利用されていたが、PTB7 に代表される狭バンドギャップポリマーが開発されると 10% の光電変換効率がターゲットになり始めた。ドナー分子とアクセプター分子の共重合体である狭バンドギャップポリマーは、近赤外領域まで広がる幅広い吸収を有することから太陽光を有効に活用することが可能である。これまで主に、発光性分子であるキナクリドン誘導体を骨格に含む新たな狭バンドギャップポリマーの合成を行ってきたが、令和4年度は更に π 拡張ジケトピロロピロール誘導体を含有する狭バンドギャップポリマーの合成を行った。また、得られた狭バンドギャップポリマーを用いて薄膜太陽電池を作製し、その光電変換特性を評価した。

(c) 三元系有機薄膜太陽電池の高効率化

三元系有機薄膜太陽電池は従来のドナー性ポリマーとアクセプターに更にもう一成分加え相補的な光吸収を可能とすることで高効率化を実現しようという取り組みであり、近年、三元系有機薄膜太陽電池に関する報告が増えてきている。令和4年度は、有機溶媒に可溶性金属ポルフィリンを合成し、三元系太陽電池の添加剤としての特性を評価した。その結果、有機薄膜太陽電池に添加する金属ポルフィリンの中心金属の原子量を増やすにつれ、その光電変換特性が増大することを見いだした。

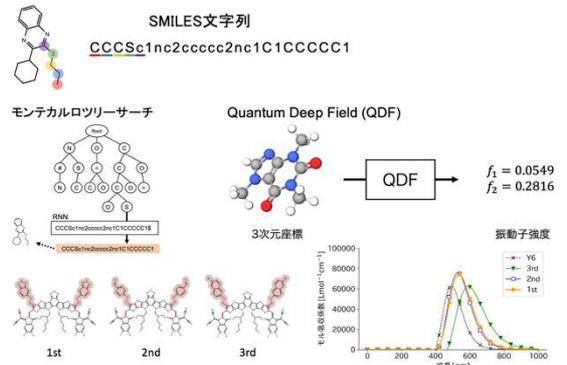


図3. 進化的な方法を利用した非フラーレンアクセプターの探索

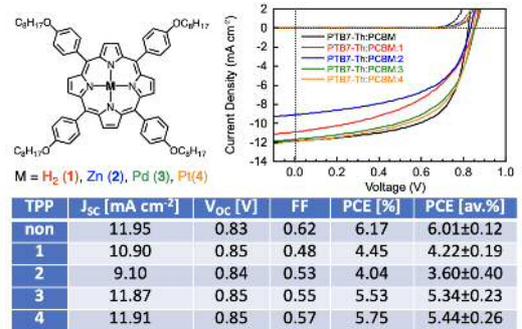


図4. 有機太陽電池への金属ポルフィリン添加効果

3. 本研究と関連した今後の研究計画

本研究では有機薄膜太陽電池の高効率化に向けて(a)新規非フラーレンアクセプターの開発、(b)狭バンドギャップポリマーの開発、(c)三元系有機薄膜太陽電池の高効率化の研究テーマを実施してきた。特に、これまでの研究で、ベンゾトリチオフェン誘導体、ベンゾチアジノフェノチアジン誘導体、キナクリドン誘導体に加えて、 π 拡張ジケトピロロピロール誘導体などを骨格に含む様々な非フラーレンアクセプターや狭バンドギャップポリマーの合成に成功している。今後は有機薄膜太陽電池の高効率化に向けて、更なる非フラーレンアクセプター、狭バンドギャップポリマーの合成を行うとともに、機械学習によって得られた分子を実際に合成することで、有機薄膜太陽電池の高効率化を目指す。

4. 成果の発表等

| 発表機関名 | 種類(著書・雑誌・口頭) | 発表年月日(予定を含む) |
|-------|--------------|--------------|
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |