

未来社会創造事業 探索加速型
「地球規模課題である低炭素社会の実現」領域
年次報告書(探索研究期間)

令和2年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名:尾坂 格]

[広島大学大学院先進理工系科学研究科・教授]

[研究開発課題名:革新的有機半導体の開発と有機太陽電池効率20%への挑戦]

実施期間 : 令和4年4月1日～令和5年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1)「材料開発」グループ(広島大学)

① 研究開発代表者:尾坂 格 (広島大学大学院先進理工系科学研究科、教授)

② 研究項目

- ・p型(ドナー性)半導体ポリマー材料の開発
- ・n型(アクセプター性)半導体分子およびポリマー材料の開発
- ・有機薄膜太陽電池素子の作製・評価

(2)「発電機構解析」グループ(京都大学)

① 主たる共同研究者:大北 英生 (京都大学大学院工学研究科、教授)

② 研究項目

- ・電荷生成ダイナミクスの解析
- ・電圧損失機構の解析

(3)「電子構造解析」グループ(千葉大学)

① 主たる共同研究者:吉田 弘幸 (千葉大学大学院工学研究院、教授)

② 研究項目

- ・精密電子構造解析
- ・励起子束縛エネルギー解析
- ・電荷解離エネルギー解析

§2. 研究開発成果の概要

塗布型有機薄膜太陽電池(OPV)は、軽量、フレキシブル、光透過性など従来のシリコン太陽電池にはない特長を有する重要な次世代太陽光発電技術である。本研究では、合理的かつ精密な分子設計に基づき、革新的有機半導体材料を開発することで、OPV未踏のセル変換効率20%達成に挑む。材料開発の指針として、電荷分離効率を向上するため、電荷非局在化を促進しうる剛直な分子構造をもつ高結晶性有機半導体の開発を推進している。今年度、研究代表者Gにて開発した、新規平面ロッド型骨格を有するp型ポリマー材料であるPTNTBDT-Fについて、セルの作製条件を最適化したところ、16%から17%まで変換効率が向上した。さらに、昨年度開発したPTBTz2について、さらに高電圧化に向けて置換基を変更し、新規誘導体材料PTBTzEを開発した。その結果、セルの開放電圧は0.87Vから0.91Vまで大きく向上し、変換効率も15.8%から17.4%まで向上した。一方、研究代表者Gで以前から研究開発をしてきた高結晶性ポリマー材料は、現在高性能化が進む非フラーレン系n型材料と混合すると結晶性が低下し、高い変換効率が得られないことが問題であった。今回、独自開発の高結晶性ポリマーPTzBTやPTzBTEと種々のn型材料を組み合わせた混合系を系統的に調査することで、溶解性や結晶性、凝集力などがうまく親和するn型材料を組み合わせれば、ポリマーが結晶化し、高い変換効率が得られることを見出した。さらに共同研究者Gにおいて発電機構の解析を進めたところ、PTNTBDT-Fは、OPVのボトルネックである無輻射再結合に由来する電圧損失が極めて低いことや、結晶性やポリマー主鎖の共役長が電荷解離に大きく影響することが明らかとなった。また、有機半導体材料のバンドギャップと励起子束縛エネルギーとの関係性が明らかとなり、従来予測よりも小さいバンドギャップが高効率化に有効であることが示唆された。これらの成果は、変換効率20%を目指す上で、重要な知見となる。

【代表的な原著論文情報】

- [1] Naoya Nakao, Masahiko Saito, Tsubasa Mikie, Takumi Ishikawa, Jihun Jeon, Hyung Do Kim, Hideo Ohkita, Akinori Saeki, Itaru Osaka, “Halogen-Free π -Conjugated Polymers Based on Thienobenzobisthiazole for Efficient Nonfullerene Organic Solar Cells: Rational Design for Achieving High Backbone Order and High Solubility” *Advanced Science*, **2023**, *10*, 2205682.
- [2] Kodai Yamanaka, Masahiko Saito, Tomoyuki Koganezawa, Hayato Saito, Hyung Do Kim, Hideo Ohkita, Itaru Osaka, “Interplay Between π -Conjugated Polymer Donors and Acceptors Determines Crystalline Order of Their Blends and Photovoltaic Performance” *Advanced Energy Materials*, **2023**, *13*, 2203443.