

有機太陽電池の駆動に必要なエネルギーを解明  
—有機半導体の効率的な開発へ指針—

理化学研究所（理研）、千葉大学の国際共同研究グループは、有機太陽電池における効率的な光電流生成に必要な、有機半導体の電子エネルギー差を明らかにした。

本研究成果は、有機太陽電池の発電メカニズムの解明につながるとともに、高効率化に向けた新しい材料開発に貢献すると期待できる。

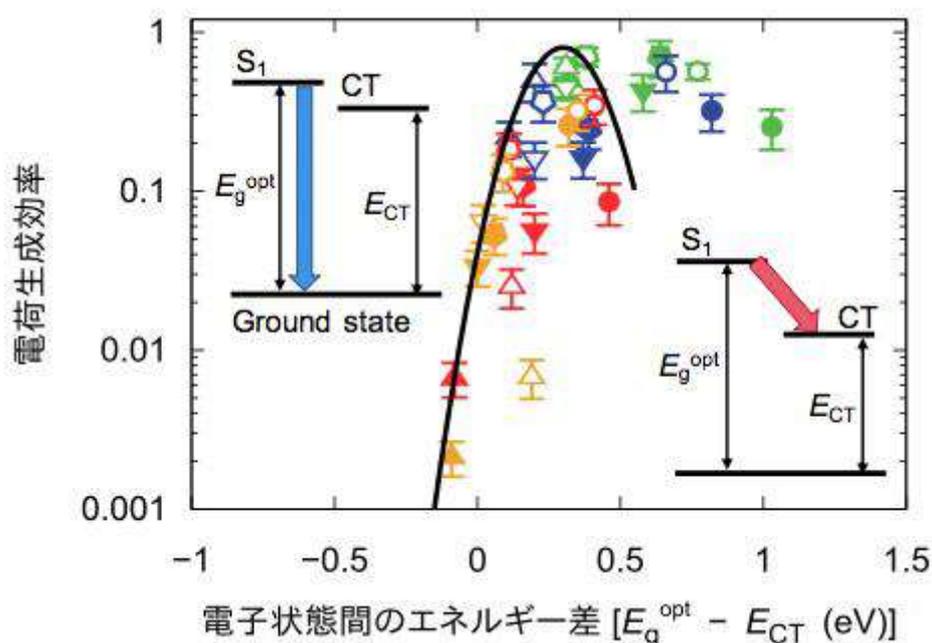


図 平面ヘテロ接合界面の電子状態間のエネルギー差と電荷生成効率の相関

今回、国際共同研究グループは、異なる分子構造と電子エネルギーを持つ電子供与性と電子受容性の有機半導体を4種類ずつ用いて、合計16個の平面ヘテロ接合構造を持つ有機太陽電池を作製し、材料の電子エネルギーと電流発生効率の相関を系統的に調べた。その結果、有機半導体の励起状態と界面での電荷移動状態の間に0.2~0.3eVのエネルギー差があるときに、最も効率的に光を電流に変換できることを見いだした。一方で、これまで重要と考えられてきた電荷移動状態と自由電荷状態のエネルギー差は、電荷生成効率（太陽電池が吸収した光子に対して生成する電子の割合）との明確な相関が見られなかった。この結果は、これまでの有機半導体開発の指針に修正を迫るものです。

本研究は、英国のオンライン科学雑誌『Nature Communications』（6月7日付け）に掲載された。

国際共同研究グループは、光電変換効率と有機半導体の電子エネルギー差の関連を定量的に評価することを目的として、以下の戦略に従って研究を行った。①バルクヘテロ接合ではなく、平面ヘテロ接合を使う（図 1a,b）、②ヘテロ接合界面近傍の電子エネルギーを実験的に正確に評価する、③電子供与性材料 4 種類と電子受容性材料 4 種類の組み合わせで、合計 16 個の素子を系統的に評価する（図 1c）。

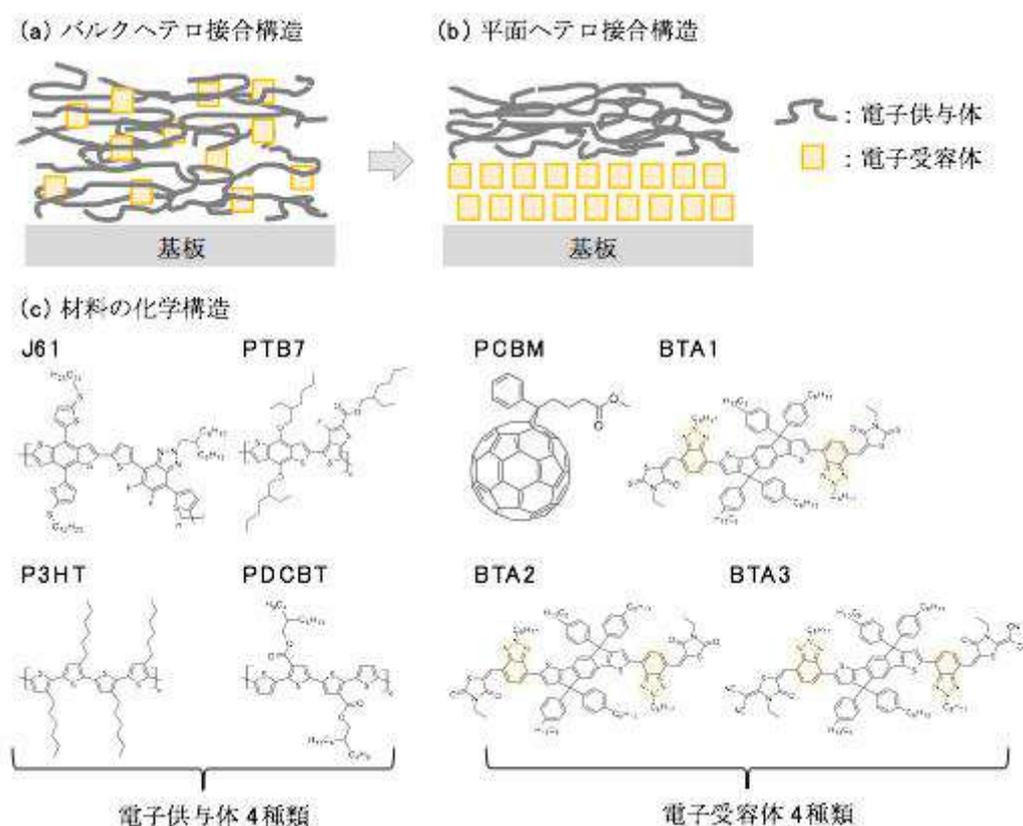


図 1 有機太陽電池の代表的な素子構造と本研究で用いた材料の化学構造

有機太陽電池中の電子状態の概略を図 2a に、光電変換における電荷生成効率（太陽電池が吸収した光子に対して生成する電子の割合）を、励起状態と電荷移動状態の電子エネルギー差（ $E_{\text{gopt}} - E_{\text{CT}}$ ）および自由電荷状態と電荷移動状態の電子エネルギー差（ $E_{\text{CS}} - E_{\text{CT}}$ ）に対してプロットしたものを図 2b,c に示す。

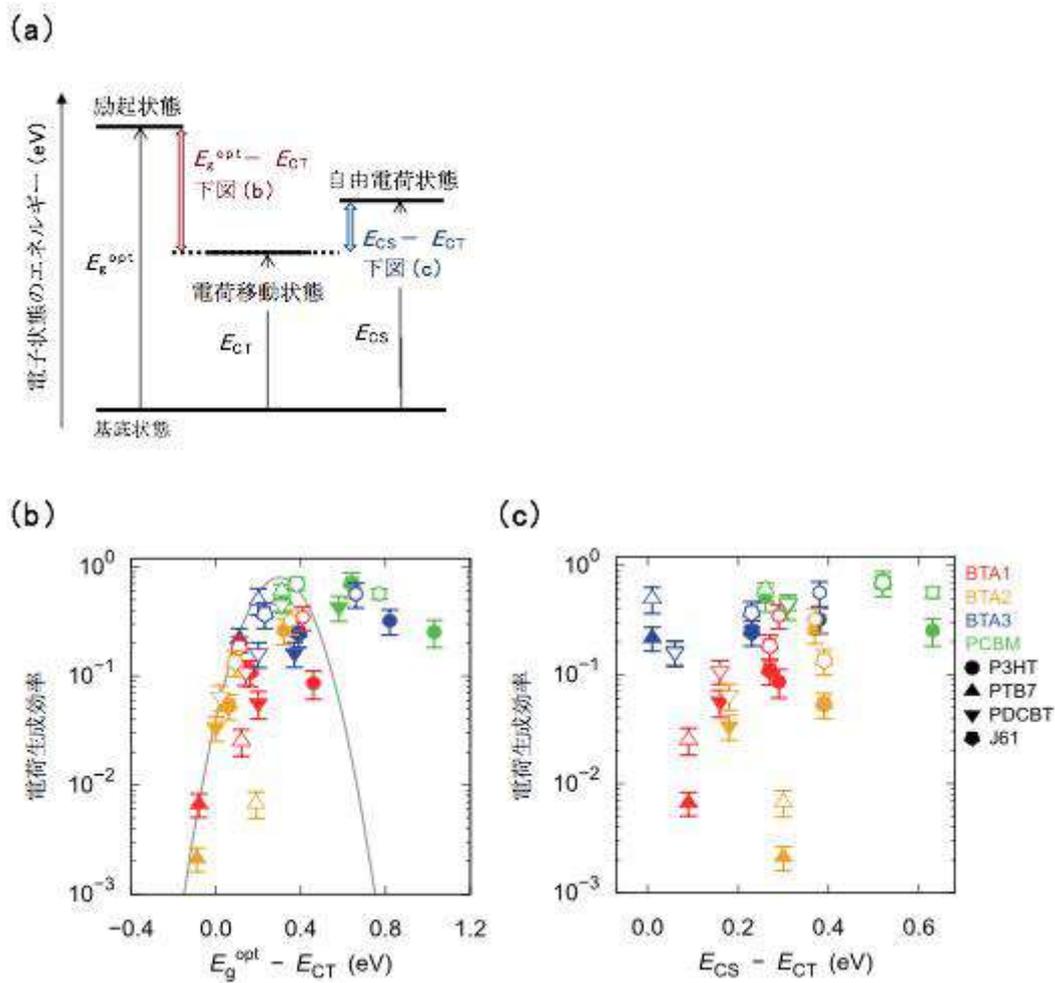


図2 電子状態の概念図、電荷生成効率と電子エネルギー差の相関

電荷生成効率は、励起状態と電荷移動状態の電子エネルギー差に相関を示した。図 2b の曲線は、Marcus 電子移動理論[10]から計算される電荷移動確率です。電荷生成効率の最大値はこの理論曲線を超えず、励起状態から電荷移動状態への遷移過程が有機光電変換を律速（制約）することを示している。効率的な電荷生成に必要な電子エネルギー差は  $0.2 \sim 0.3 \text{ eV}$  と見積もられた。一方、電荷移動状態の束縛エネルギーに対応する  $E_{CS} - E_{CT}$  が小さくなると、電荷生成効率は高くなると予測されていたが、図 2c にはそのような相関はなかった。これまでの予想に反して、 $E_{CS} - E_{CT}$  のエネルギー差が電荷生成に与える影響は小さいことを意味している。

(日文发布全文 [http://www.riken.jp/pr/press/2019/20190607\\_1/](http://www.riken.jp/pr/press/2019/20190607_1/))