

塗布型有機薄膜太陽電池の高効率化技術の開発に成功
～低コストで環境にも優しい次世代太陽電池の実用化に一步～

広島大学の尾坂 格教授、大阪大学、京都大学、千葉大学、高輝度光科学研究センターの共同研究チームは、フッ素原子を有する独自の半導体ポリマーを開発しました。この半導体ポリマーを塗布して作製した有機薄膜太陽電池は出力電圧が高まり、エネルギー変換効率（太陽光エネルギーを電力に変換する効率）が向上することを発見しました。また、半導体ポリマーの化学構造におけるフッ素原子の位置が、半導体ポリマーの性質や OPV の特性にどのように影響を与えるかを解明しました。

OPV は半導体ポリマーをプラスチック基板に塗って薄膜化することで作製できるため、コストや環境負荷を抑えることができ、大面積化が容易です。また、軽量で柔軟、透明にすることが可能であり、室内光下で変換効率が高いという特長を持つことから、IoT センサー、モバイル・ウェアラブル電源や窓、ビニールハウス向け電源など、現在普及している無機太陽電池では実現が難しい分野への応用を切り開く次世代太陽電池として注目されています。しかし、OPV の実用化にはエネルギー変換効率の向上が最重要課題であり、そのためには新しい半導体ポリマーの開発が不可欠です。

共同研究チームは、広島大学のグループが以前に開発した、当時世界最高レベルの変換効率を示した「PNTz4T」という半導体ポリマー（図 1A）へフッ素を導入することを検討しました。すでに PNTz4T の A の位置（図 1A）にフッ素を導入することはできていたものの、量子化学計算からより有効であると予想される B の位置へのフッ素導入はできていませんでした（図 1B）。今回、大阪大学のグループが別の化合物を用いて開発した、フッ素を導入する最新の技術を組み合わせた結果、A の位置に加えて、B の位置（図 1A）にもフッ素を導入することに成功しました。

OPV の変換効率向上には、半導体ポリマーとフラレン誘導体の分子軌道エネルギーのマッチングが非常に重要です。量子化学計算によると、A の位置にのみフッ素を導入すると、分子軌道の HOMO が低いエネルギー準位に移動するため、OPV の電圧に相当する分子軌道エネルギーの準位差（ ΔEHL ）が大きくなるため、高効率化に有効であることが分かっていました（図 2）。しかし、電流に相当するエネルギー（ E_g ）が大きくなることが問題でした（ E_g が小さい方が電流は高い）。一方、B の位置にフッ素を導入すれば、分子軌道の LUMO が低い準位に移動することが予想されていました。そこで、A だけでなく B の位置にもフッ素を持つ半導体ポリマー（F2-F2）を開発し、千葉大学の研究グループが持つ独自の光電子分光測定装置を用いて精密に分子軌道エネルギー準位を解析したところ、HOMO と

LUMO がともに低い準位に移動しており、 ΔE_{HL} は大きくなり、 E_g が保持されていることが分かりました (図2)。

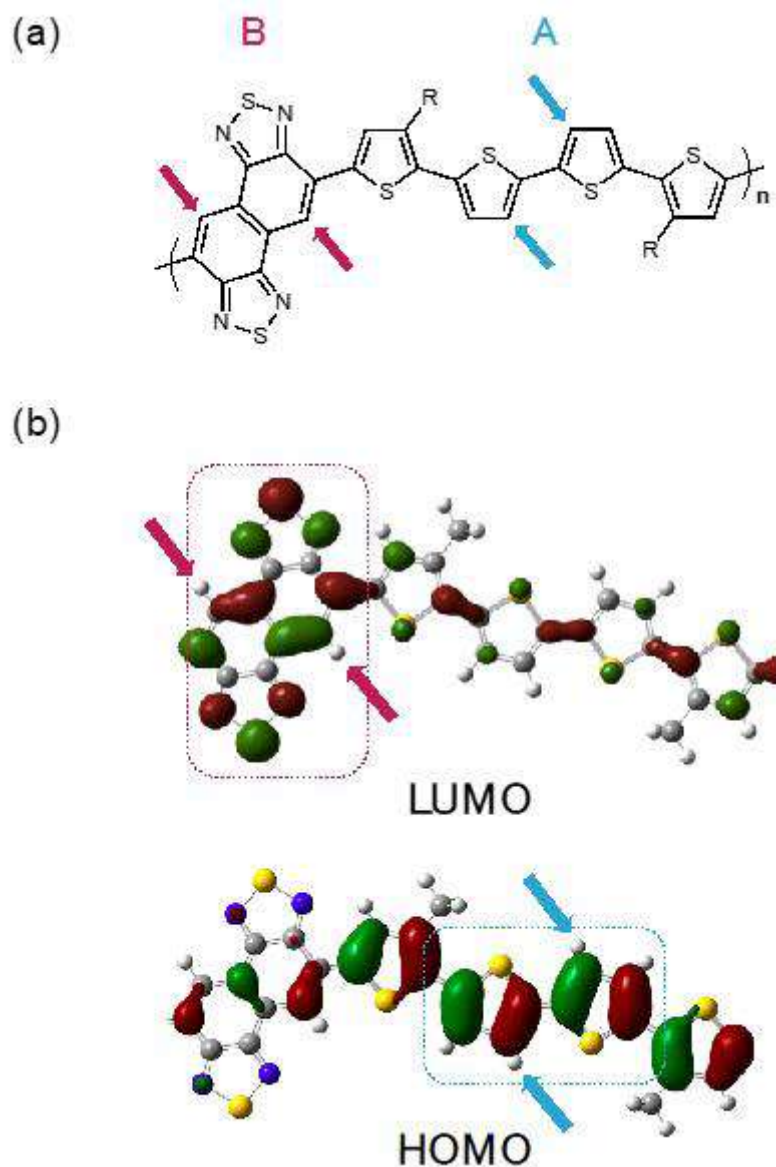


図1

(A) PNTz4T の化学構造とフッ素導入位置。

(B)量子化学計算により解析したPNTz4T の分子軌道の分布(上がLUMO、下がHOMO)。

LUMO は比較的 B の位置に存在し、HOMO は A の位置に存在する。

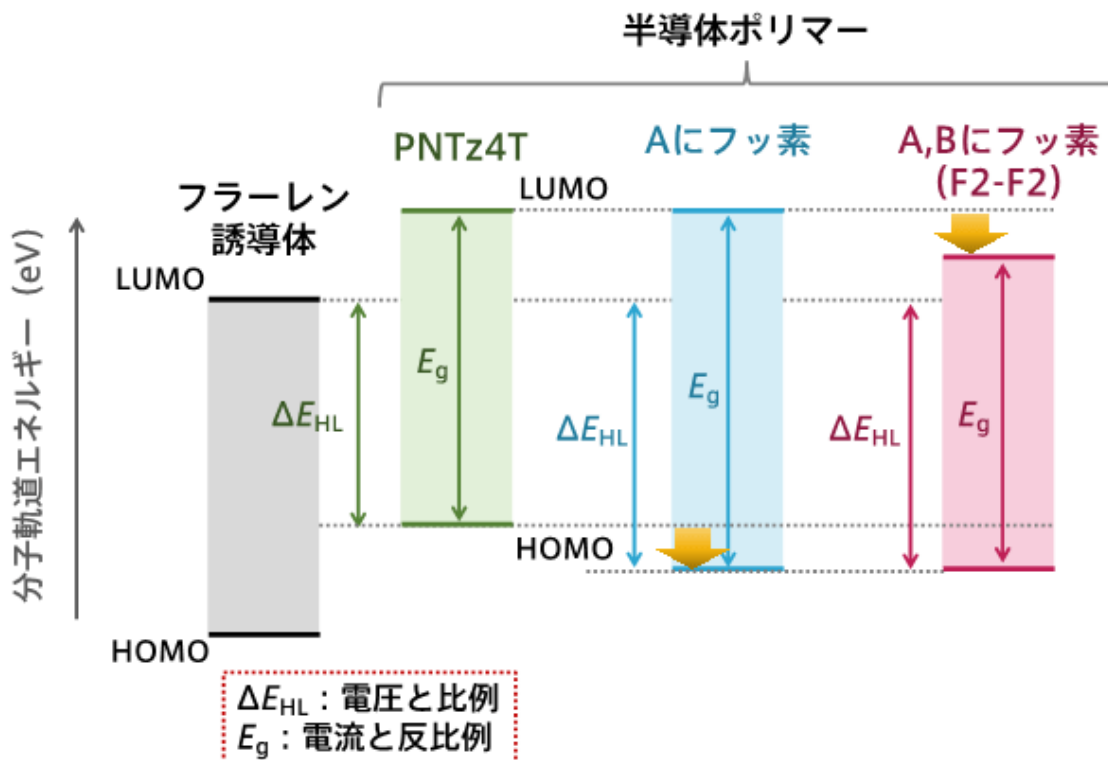


図2 半導体ポリマーとフラレン誘導体における分子軌道 (HOMO と LUMO) が持つエネルギー準位の関係

PNTz4T にフッ素を導入すると HOMO と LUMO のエネルギー準位が変化する。A の位置にフッ素を導入すると HOMO の準位のみ低下し、 ΔE_{HL} は大きくなるため電圧は向上するが、 E_g も大きくなるため電流は低下する。A と B 両方にフッ素を導入すると HOMO と LUMO が低下し、 ΔE_{HL} は大きくなり、 E_g は保持される。

論文情報

タイトル ImpAct of Non-CovAlent Sulfur-Fluorine InterAction Position on Properties, Structures, And PhotovoltAic PerformAnce in NAphtHoBisthiAdiAzole-BASed Semiconducting Polymers

雑誌 AdvAnced Energy MAteriAls

DOI : 10.1002/Aenm.201903278

日文发布全文 <https://www.jst.go.jp/pr/announce/20200114/index.html>

文: JST 客观日本编辑部翻译