シンポジウム | イノベーション共創プログラム（CIP）：実用化に近づく次世代太陽電池とさらなる基盤技術開発

2025年3月26日(水) 9:00 ~ 11:30 [E]F403(第2学舎 4号館 [4階] F403)

## [[E]F403-1am] 実用化に近づく次世代太陽電池とさらなる基盤技術開発

座長、シンポジウム関係者：松尾 豊、池田 茂

次世代太陽電池の開発は、カーボンニュートラル社会実現、エネルギー自給率の向上、温室効果ガス排出規制対応の鍵となる技術として注目されています。このセッションでは、次世代太陽電池の最新の研究動向とその実用化に向けた取り組み、およびさらなる基盤技術の開発について紹介します。材料開発や基本原理の開拓から、耐久性向上、製造プロセスのスケールアップなど、基礎および実用化に向けて克服すべき課題に焦点を当てます。さらに、現在進行中の実証実験や商業化の進展状況について具体的な事例を紹介し、将来の展望を示します。

**本セッションは午前、午後に実施されます。**
**聴講後のアンケートへのご協力をお願いいたします。**

日本語 依頼講演
9:00 ~ 9:30
[[E]F403-1am-01]
無色透明な近赤外光吸収有機半導体材料の開発
○家 裕隆[1] (1. 大阪大学)

---

日本語 依頼講演
9:30 ~ 10:00
[[E]F403-1am-02]
太陽光エネルギー広帯域・高効率利用を可能とする有機無機ハイブリッドマテリアルの創製
○石井 あゆみ[1] (1. 早稲田大学)

---

英語 依頼講演
10:00 ~ 10:30
[[E]F403-1am-03]
【講演取り下げ】

---

日本語 依頼講演
10:30 ~ 11:00
[[E]F403-1am-04]
シミュレーションとインフォマティクスによる太陽電池材料設計・探索
○中嶋 隆人[1] (1. 理化学研究所)

---

日本語 依頼講演
11:00 ~ 11:30
[[E]F403-1am-05]
バーコート法による有機無機ハライドペロブスカイトの製膜と太陽電池特性
○藤井 彰彦[1,2] (1. 大阪工大、2. 阪大院工)

---

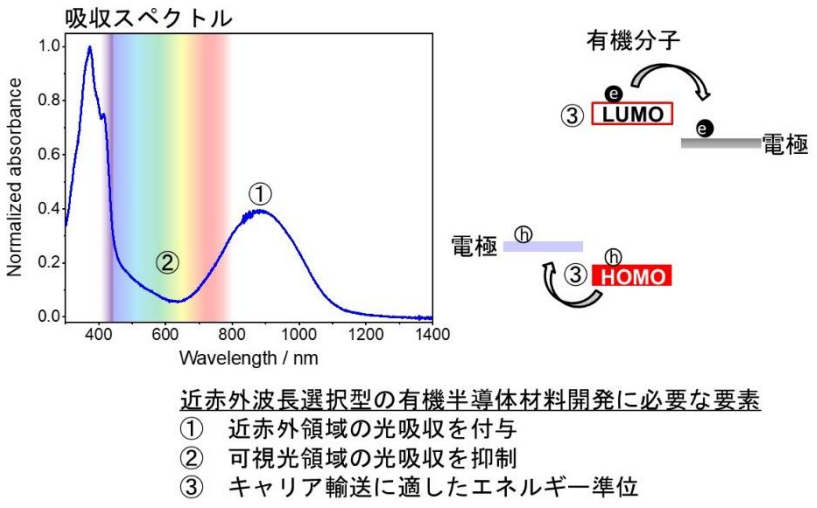
© 2025 公益社団法人日本化学会

# 無色透明な近赤外光吸収有機半導体材料の開発

（阪大産研[1]・阪大 ICS-OTRI[2]）○家 裕隆[1,2]
Development of NIR Absorbing Organic Semiconductors Bearing Colorless and Transparent Characteristics ([1]*SANKEN, Osaka University*, [2]*ICS-OTRI, Osaka University*)
○Yutaka Ie[1,2]

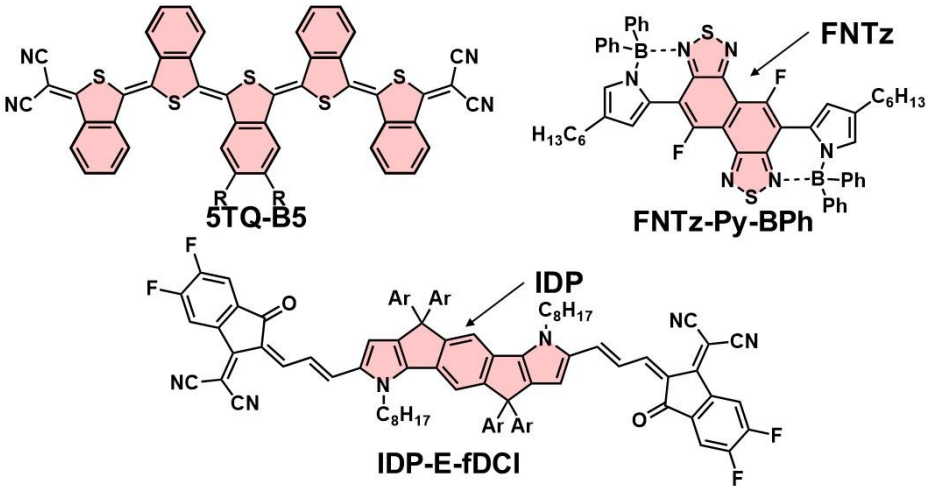
Near-infrared (NIR) organic semiconductors have attracted significant interest for applications in photodetectors and organic solar cells within the field of organic electronics. The development of organic semiconducting materials with NIR absorption properties requires the molecular design of compounds with a narrow energy gap between the highest occupied molecular orbital and the lowest unoccupied molecular orbital. Furthermore, achieving wavelength selectivity in the NIR region could enable new applications in colorless and transparent organic electronics. In this study, we discuss the molecular design and synthesis of novel π-conjugated molecules exhibiting selective light absorption in the NIR region. Additionally, we present preliminary results from NIR wavelength-selective photodetectors and solar cells based on these molecules.
*Keywords : NIR-Absorbing Dyes; Organic Electronics; Organic Solar Cells; Organic Semiconductor; Photodetector*

近赤外（NIR）領域の波長に選択的な光吸収特性を有する有機半導体材料は、無色透明な構造を活かすことができることから、フォトトランジスタ、有機太陽電池、フレキシブルな生体センサーなどの幅広い応用が期待される。このような有機半導体材料を実現するためには、NIR 領域まで吸収波長を伸ばす分子設計として、バンドギャップを劇的に狭めることが不可欠である。この際に、狭バンドギャップ化に伴う酸素や水に対する化学的安定性の低下を抑制することも考慮しないといけない。また、無色透明性を付与するためには、可視光領域の光吸収特性を精密に抑制することも不可欠である。さらに、有機半導体材料として機能させるためには、電極へのキャリア伝達を効率的に行うため、最高占有軌道（HOMO）および最低非占有軌道（LUMO）のエネルギー準位の調節も重要となる。これらを満たす分子の開発は遅れており、分子設計指針の確立が求められる。




© The Chemical Society of Japan

これらの要件を満たす有効な手法として、キノイド構造や、ドナー（D）とアクセプター（A）の組み合わせによる分子構造の狭バンドギャップ化と、分子構造修飾による HOMO および LUMO 準位の精密制御が挙げられる。我々は、ベンゼン縮環させて安定化させたキノイド構造チオフェンを 5 量体 5TQ-B5 や 6 量体まで鎖長を伸長させることで、近赤外吸収特性を付与することに成功し、[1,2] 近赤外応答型のフォトトランジスタとして機能することを見出している。[1]また、後者のアプローチからは、アクセプター性を高めるためにナフトビスチアジアゾール（NTz）にフッ素原子を導入した新規ユニットのフッ素化ナフトビスチアジアゾール（FNTz）を開発し、FNTz の強力なアクセプター性が NIR 領域への長波長化に有効であるとの作業仮説のもと、ドナーユニットとしてピロール誘導体を組み合わせた D-A-D 構造を構築した。また、D-A 間に LUMO 準位を選択的に低下させるホウ素架橋を導入することで、NIR 領域波長選択的に光吸収を持つ共役分子 FNTz-Py-BPh を分子設計・合成した。[3] さらに、最近では、ドナー性を高めたインダセノジピロール (IDP) を中心骨格として、アクセプターユニットと組み合わせた近赤外光波長選択的な共役分子 IDP-E-fDCI を開発し、近赤外応答型のフォトトランジスタや有機太陽電池として機能することを見出している。本研究では、これらの分子構造を通じて、近赤外波長選択的な有機半導体材料の分子設計、光学的および電気化学的特性、結晶構造などの基礎物性を評価するとともに、分子構造と半導体特性の相関について議論する。




1) K. Yamamoto, S. M. Quintero, S. Jinnai, E. Jeong, K. Matsuo, M. Suzuki, H. Yamada, J. Casado, Y. Ie, *J. Mater. Chem. C* **2022**, *10*, 4424.
2) K. Yamamoto, S. Jinnai, Y. Ie, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2024**, *97*, uoae036.
3) S. Yokoyama, S. Utsunomiya, T. Seo, A. Saeki, Y. Ie, *Adv. Sci.* **2024**, *11*, 2405656.

© The Chemical Society of Japan

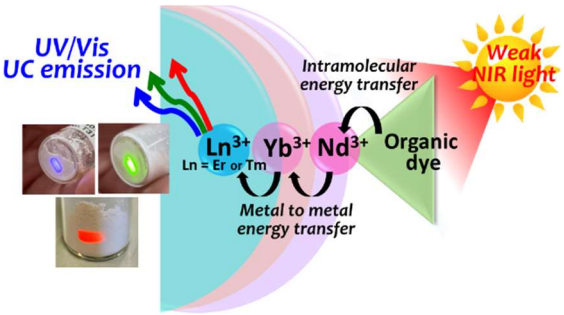
# 太陽光エネルギー広帯域・高効率利用を可能とする有機無機ハイブリッドマテリアルの創製

（早稲田大学先進理工[1]）○石井あゆみ[1]

Organic-Inorganic Hybrid Materials for Broadband and High-Efficiency Solar Energy Utilization

([1]*School of Advanced Science and Engineering, Waseda University*) ○Ayumi Ishii[1]

Detection of near-infrared (NIR) light is essential for photoenergy conversion systems, such as solar cells and photodetectors. In this study, we propose a novel NIR detection method utilizing lanthanide-based up-conversion (UC) materials, which can convert NIR light into visible or ultraviolet light through a highly efficient energy transfer process from organic dyes to lanthanide ions. We report the development of energy-converting organic-inorganic hybrid materials and their application in highly efficient, broadband photoenergy conversion systems.
*Keywords : Photoenergy conversion, Organic-inorganic hybrid, Near-infrared light, Up-conversion, Lanthanide*




光触媒や太陽電池などを効率よく駆動させるために必要な太陽光は、晴天時における紫外～可視領域の限られた光である。つまり、「使われていない」太陽光は非常に多い。「使われていない」波長の光を「使える」波長の光に変換できれば、理論限界を超えるエネルギー変換効率の実現が可能となる。本研究では、既存の太陽電池や光触媒材料の高効率・広帯域な光利用を可能とする新技術を創出すべく、太陽光における近赤外領域の光を可視・紫外光に変換する有機無機ハイブリッドアップコンバージョン（UC）材料の開発と新しい光エネルギー変換システムの構築を進めている。本講演では、希土類系ナノ材料が示す UC 機能と有機色素の高い光吸収能を融合した新材料の開発と太陽光広帯域利用に向けた応用展開について紹介する。

希土類元素を含む UC 材料は、レーザなどの強い励起光源を必要であり、太陽光レベルの微弱な光源では発光を観測することが困難とされてきた。この問題に対し、本研究では、近赤外領域に高い光吸収能を持つ有機色素から希土類イオンへのエネルギー移動を利用し UC 発光を促す手法を用いている[1)]。有機色素をナノ粒子表面で希土類イオンと錯形成させたコアシェル構造の形成により、近赤外領域の太陽光を可視光（青～赤）に変換することが可能である。これらの高輝度 UC 材料を用いた光電変換素子の開発をおこなった。例えば、次世代太陽電池（ペロブスカイト、$CsPbI_3$）に開発した色素増感型 UC ナノ粒子を組み込むことで、従来利用できなかった近赤外領域の太陽光での発電に成功した[2,3)]。

1) A. Ishii, *Electrochemistry*, **89**, 544-551 (2021).
2) A. Ishii, T. Miyasaka, *Adv. Photon. Res.* **2023**, *4*, 2200222.
3) A. Ishii, S. Matsumura, M. Ota, R. Mizoguchi, *in review.*

© The Chemical Society of Japan

# シミュレーションとインフォマティクスによる太陽電池材料設計・探索

（理研）○中嶋 隆人
Solar Cell Materials Design and Exploration by Simulation and Informatics (*RIKEN*) ○ Takahito Nakajima

We aim to realize material and molecular designs and exploration of next-generation solar cell materials by integrating materials simulation and informatics using the supercomputer “Fugaku” and HPC and to demonstrate the proposed novel materials in collaboration with industry and experimental groups for social implementation. In my presentation, I will introduce our recent efforts for this goal.
*Keywords : Quantum Chemistry Simulation;Materials Informatics; Perovskite Solar Cells; Fugaku*

計算機の性能が上がるのに伴って，シミュレーション技術を活用し，合成に先立った分子設計や材料設計が可能になってきている．様々な分子や材料に対して精度の高い量子化学計算に基づき網羅的かつ系統的なハイスループット・シミュレーションを実施することで，大規模な材料データベースを構築し，所望の機能に対する発現原理や動作原理が良くわかっている場合は，それらの原理に基づいて構築したデータベースの中からスクリーニングすることで所望の性質を持つ最適な分子や材料の候補を提案することが今後ますます増えてくるだろう．

一方で，発現原理や動作原理が確立されていない場合は，シミュレーションだけで膨大な分子や材料の中から所望の性質を与え得る化合物を見つけ出すことは困難である．しかしながら，そのような場合でも実験による実測データと量子化学計算や分子動力学計算で得られた膨大なシミュレーションデータに基づいてインフォマティクスを使って分析すれば，未知の化合物の性質を予測することができて，より高性能・高機能な新しい分子や材料を発見することができる．また，所望の性質に関連が高い物性が何かも見つけることができて，そこから設計指針を確立することも可能となる．

われわれは，これらの両方のアプローチに基づき，「富岳」に代表されるスーパーコンピュータを利用した材料シミュレーションとインフォマティクスを活用することで，次世代に向けた太陽電池材料の材料・分子設計と探索を実現し，さらに，産業界や実験グループと連携することで提案した新材料を実証し社会実装につなげることを目標にしている．本講演ではそのためのわれわれのこれまでの取組みを紹介する．

© The Chemical Society of Japan

# バーコート法による有機無機ハライドペロブスカイトの製膜と太陽電池特性

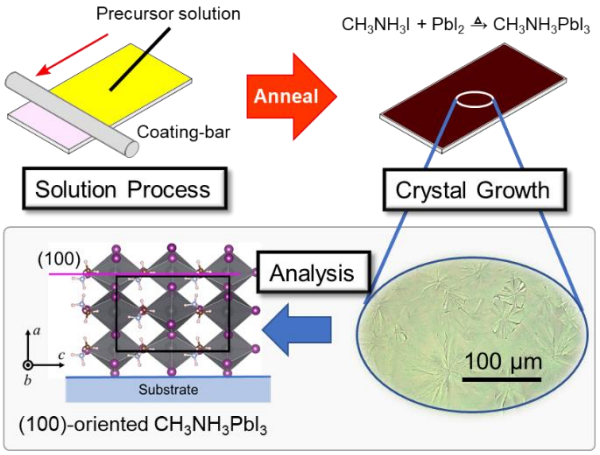
（大阪工大[1]・阪大院工[2]）○藤井 彰彦[1,2]

Film Fabrication of Organic-inorganic Halide Perovskite by Bar-coating Method and its Solar Cell Properties ([1] *Osaka Institute of Technology*, [2]*Graduate School of Engineering, Osaka University*) ○Akihiko Fujii[1,2]

Organic-inorganic halide perovskites attract much attention as candidate materials to realize printed and low-cost solar cells, because their source materials are soluble in a typical organic solvent and the conventional coating processes including the thermal reaction under low temperature at around 100 ℃ are available. Here, the bar-coating technique was utilized as a practical uniaxial coating process, and the thin film characteristics of a typical organic-inorganic halide perovskite, $CH_3NH_3PbI_3$ ($MAPbI_3$) were investigated. By using the bar-coating process, the 100-μm-size crystal grains appeared and the plane orientation [100] of $MAPbI_3$ was vertically aligned in the thin film on the substrate.[1] The film thickness could be controlled by adjusting the sweep speed of the coating bar.[2] In the solar cells with the bar-coated $MAPbI_3$ thin film, the carrier transport material and device structure were carefully selected, then the high power conversion efficiency of 17.2% was achieved.[3]
*Keywords : Organic-inorganic Halide Perovskite, Bar-coating, Solar Cell*

光電変換特性に優れた有機無機ハイブリッドペロブスカイト材料は、その原料が可溶性を有し、塗布製膜技術が活用可能であることから太陽電池材料として注目されている。本研究では、印刷製膜の基盤技術であるバーコート法に着目し、代表的なペロブスカイト材料である $CH_3NH_3PbI_3$ ($MAPbI_3$)についての製膜と薄膜特性について調べた。$MAPbI_3$ 薄膜は 100 μm 程度の結晶粒で構成され、[100]方向が基板に垂直配向する特徴がある。この薄膜を活性層とする太陽電池を作製したところ、17.2%の光電変換効率が得られた。

本研究の一部は、科学研究補助金（23K26140）、能村膜構造技術振興財団、八洲環境技術振興財団、及び池谷科学技術振興財団の援助の下に行われた。




1) M. Murata, T. Oizumi, M. Gi, R. Tsuji, M. Arita, A. Fujii, M. Ozaki, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **2020**, 208, 110409.
2) A. Fujii, T. Oizumi, N. Kuwahara, G. Uzurano, T. Saito, Y. Yabuuchi, M. Ozaki, Jpn. *J. Appl. Phys*. **2022**, 61, SB1032.
3) G. Uzurano, N. Kuwahara, T. Saito, A. Fujii, M. Ozaki, *ACS Mater. Lett*. **2022**, 4, 378.

© The Chemical Society of Japan