

NTz 系非フラーレン型有機薄膜太陽電池における電荷分離過程

Theoretical Study of Charge Separation Process in NTz-Based Non-Fullerene Organic Solar Cells

日女大院・理¹, 阪大・産研² ○(M1) 蘭 暖佳¹, 陣内 青萌², 家 裕隆², 村岡 梓¹

Japan Women's Univ.¹, Osaka Univ.², °Haruka Araragi¹, Seihou Jinnai², Yutaka Ie², Azusa

Muraoka¹

E-mail: m2016004ah@ug.jwu.ac.jp

近年、非フラーレン型アクセプターはバルクヘテロ接合有機太陽電池 (OSC) の開発における研究において、注目されている。従来のフラーレン型アクセプターとは対照的に、非フラーレン型アクセプターの光学特性や電子エネルギー準位は容易に調整できる^[1]ことに起因する。

本研究で着目する、NTz 基を含むπ共役系アクセプター

分子は、エネルギーギャップが小さく、高い電荷移動度を持つことが特徴である^[2]。さらに強い電子親和力を持つため、励起子生成に効果的であり、ドナー共重合体の電子受容ユニットとして有効に機能する^[3]。Ieらは、NTz にアルキル置換チオフエンを縮環させた TNTz (アルキル置換ジチエノナフトビスアジアゾール) を合成し、TNTz-DCI が従来の NTz 型より短絡電流密度 (J_{sc}) が大きく、高い光電変換効率 (PCE) を示すことに成功した。 J_{sc} の向上は、光吸収やキャリア輸送特性が寄与したものであり、これが PCE に直接影響を及ぼす要因として注目されている^[4]。そこで、本研究では、TNTz-DCI の分子間相互作用に着目し、分子間での電荷移動や励起子の分解メカニズムを解明することで、効率的な電荷輸送のメカニズムを探索する。計算には Gaussian 16 を使用し、密度汎関数法を用いた。計算レベルは B3LYP/6-31G(d,p) である。TNTz-DCI (図 1) の HOMO、LUMO は主鎖全体に広がっており、特に LUMO では TNTz 骨格で局在化が顕著であったことから、分子内 push-pull 型の電子配置が確認された。さらに、ドナー分子に PBTB-T を用いて、PBTB-T/NTz-DCI D/A 複合体に着目した。効率的な電荷分離の要因を明らかにするため、自由キャリア中の励起子を解離させるために必要なエネルギーである励起子束縛エネルギーを計算したところ、TNTz の方が 0.202 eV 小さかった。これは、TNTz の結晶性が向上し、電荷キャリアの移動度が増加した結果、電荷分離効率が向上したことを示している。励起子束縛エネルギーが小さいほど、励起子の分解が促進され、自由キャリアの生成と輸送が効率的に行われるため、TNTz における J_{sc} の向上に寄与したと考えられる。当日は、TNTz-DCI/PBTB-T/D/A 複合体における積層構造、分子間相互作用の観点も併せて光変換効率向上との相関を報告する。

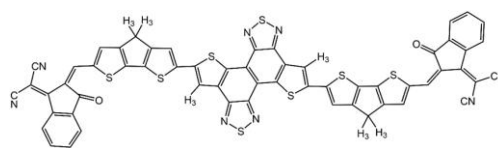


Figure 1
Chemical structure of TNTz-DCI

【参考文献】 [1] C. Yan, et al., *Nat. Rev. Mater.*, **3**, 18003/1-18003/19 (2018). [2] I. Osaka, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **134**, 3498-3507 (2012). [3] S. Chatterjee, Y. Ie, et al., *NPG Asia Mater.*, **10**, 1016-1028 (2018). [4] S. Jinnai et al., *J. Mater. Chem. A*, **10**, 20035-20047 (2022)