

## 太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と 変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算

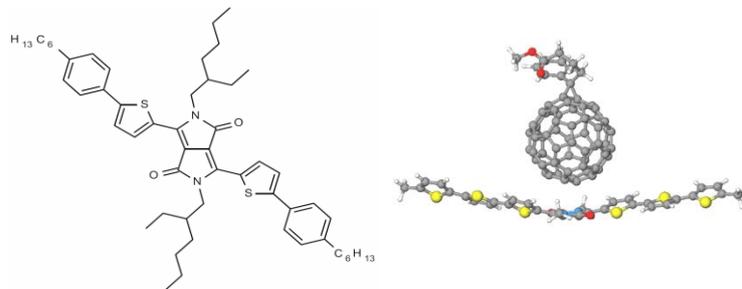
東大院工 山下晃一

本研究は、有機薄膜太陽電池における光エネルギー変換の高効率化を目指し、電荷対生成過程の初期過程であるドナー分子からアクセプター分子への電荷分離過程を高効率に起こす有機物材料を探索することを目的として行った。

有機系太陽電池では、まず①太陽光によって、②エキシトン（クーロン相互作用した電子-正孔対）が生成し、③有限の寿命で相界面を拡散し、④ドナー・アクセプター異種界面で電荷分離し、⑤電荷移動（キャリア輸送）される。光照射時に両端子を解放した場合の出力電圧を解放電圧  $V_{oc}$ 、短絡した場合の電流を短絡電流  $I_{sc}$ 、最大出力と  $V_{oc} \cdot J_{sc}$  の比を FF とすると、変換効率は  $V_{oc} \cdot J_{sc} \cdot FF$  で与えられる。単結晶シリコンでは Shockley-Queisser の熱力学的理論限界値 30% に迫るデータもあるが、現在、最も効率の高い有機系太陽電池でも 10% 以下である。このように有機系太陽電池の変換効率が低い原因として、まず有機物材料の誘電率が小さく、光吸収により生成した電子-正孔対がドナー・アクセプター界面へ拡散する過程で容易に再結合することが上げられる。また界面での電荷移動状態の再結合 (Geminate Recombination) や電荷分離後の自由な電子と正孔の再結合が電荷分離確率を下げる主要な素過程として考えられる。

具体的にアクセプター分子を PCMB とし、ドナー分子を種々の Diketopyrrolopyrrole 誘導体 [1] として、これらエキシトンの界面での再結合、電荷分離後の再結合といった光エネルギー変換効率を律する重要な素過程について、電子カップリングの量子化学計算と量子ダイナミクス計算 [2, 3] に基づく計算化学の観点から理解し、変換効率 IPCE を予測した結果について報告する。

図 Diketopyrrolopyrrole  
誘導体と PCMB との分子界面



また、最近 15% の変換効率を達成した有機無機ペロブスカイト [4, 5] の電子物性と光電荷移動の機構に関する理論的解析の結果について報告する。

### 文献

- [1] W. Sung, T. Yasuda, G. Watanabe, Y. S. Yang, C. Adachi, *Chem. Mater.*, **25**, 2549 (2013).
- [2] M. Fujii and K. Yamashita, *Chem. Phys. Lett.*, **514**, 146-150 (2011).
- [3] S. Manzhos, H. Segawa and K. Yamashita, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **15**, 1141-1147 (2013).
- [4] M. M. Lee *et al.* *Science* **338**, 643 (2012).
- [5] J. H. Heo *et al.* *Nature Photon.*, **7**, 486 (2013).