

近赤外領域に強い吸収を有するマグネシウムジエチニルポルフィリン誘導体の合成と有機薄膜太陽電池への応用

(都産技研¹・名大院工²・金大院理工³・名大未来社会⁴) ○小汲 佳祐^{1,2}・中野 正浩³・松尾 豊^{2,4}

Magnesium Diethynylporphyrin Derivatives with Strong Near-infrared Absorption for Solution-process Bulk Heterojunction Organic Solar Cells (¹TIRI, ²Graduate School of Engineering, Nagoya University, ³Graduate School of Nature Science and Technology, Kanazawa University, ⁴Institutes of Innovation for Future Society, Nagoya University) ○ Keisuke Ogumi,^{1,2} Masahiro Nakano,³ Yutaka Matsuo^{2,4}

Magnesium diethynylporphyrin derivatives with strong near-infrared absorption were obtained. These derivatives possess electron rich units directly introduced to the porphyrin core. The electron rich units caused strong absorption on the near-infrared region due to an intramolecular charge transfer. Theoretical calculation also proved that those derivatives showed large oscillator strength at the Q band. As a donor material, such large absorption coefficient in the range of long wavelength region is a desirable characteristic for organic solar cells. Organic photovoltaic devices using these diethynylporphyrin derivatives gave a PCE of 2.91% in optimal conditions.

Keywords : Porphyrin; Organic Solar Cells; Intramolecular Charge Transfer; Intermolecular Interaction

本研究では、優れた溶解性のポルフィリン材料の実現のため、従来のテトラエチニル型から対称性を下げたジエチニル型マグネシウムポルフィリン誘導体を合成した。

本研究で合成したポルフィリン誘導体は、電子豊富なユニットをポルフィリン環に直接導入することにより、分子内電荷遷移に由来する近赤外領域の強い光吸収特性を実現した。Gaussian プログラムを用いた量子化学計算により、本研究のポルフィリン誘導体が、先行研究の類似体よりも溶解性に優れていることを明らかにした。また、TD-DFT 計算により、本研究のポルフィリン誘導体が長波長領域に強い光吸収特性を有しており、実測の結果と対応していることを確認した。Q バンドピークはスペクトル全体を通して最も強く、振動子強度は 2.30 であった。本研究のポルフィリン誘導体をドナー材料として用いた有機太陽電池は、最高効率 2.91% を記録した。

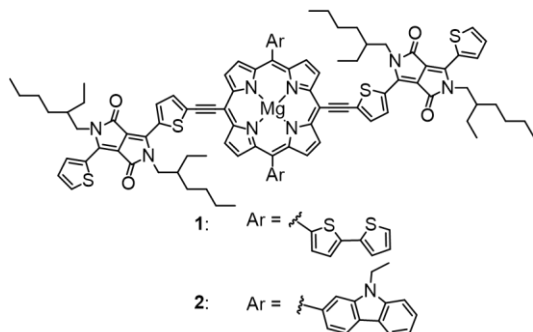


図 1. 新規ジエチニル型ポルフィリン誘導体

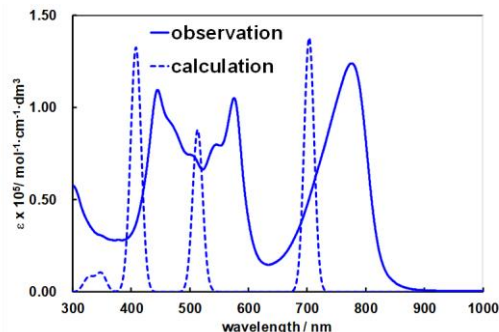


図 2. 化合物 2 の UV-vis スペクトル