

ドナーアクセプター型ポリチオフェンに関する理論的研究

Theoretical Study on Donor-Acceptor-Type Thiophene

○今村 穰¹、松井 亨²、尾坂 格³、瀧宮 和男³、中嶋 隆人²

(1. 首都大院、2. 理研 AICS、3. 理研 CEMS)

○Yutaka Imamura¹, Toru Matsui², Itaru Osaka³, Kazuo Takimiya³, Takahito Nakajima²

(1.Tokyo Metropolitan Univ., 2.RIKEN AICS, 3.RIKEN CEMS)

E-mail: yimamura@tmu.ac.jp

有機薄膜太陽電池は、低コストや低環境負荷を特長とする新しいエネルギー源として注目されている。現在高い光電変換効率を示す有機薄膜太陽電池では、電子供与体としてポリチオフェンが、電子受容体としてフラーレン誘導体がよく用いられている。しかし、実用性の基準である光電変換効率 15%にはまだ達しておらず、今後更なる有機薄膜太陽電池材料の設計・開発が必要である。材料の設計・制御に必要なフロンティア軌道に関する情報は、理論的なアプローチで得ることができる。そこで、本研究では、詳細な電子状態を得ることができる理論的アプローチを用いて、特にフロンティア軌道の制御が実験的にも検討[1]されているドナーアクセプター型ポリチオフェンに関して検討を行った。

ポリチオフェンである TzTz 及び NTz の軌道エネルギーの振る舞いを Hückel 近似に基づく解析式を用いて検討した。解析式のパラメータは、PBE1PBE/6-31G*レベルで計算した軌道エネルギーを再現するように決定した。図 1 に、モノマーからポリマーまでの場合の最高占有軌道(HOMO)及び最低非占有軌道(LUMO)のエネルギーを示した。TzTz ポリマーの場合には、モノマーからポリマーに変化するにつれ、HOMO エネルギーは不安定化し、LUMO エネルギーは安定化した。一方、NTz の場合は、HOMO エネルギーは類似した傾向を示したが、LUMO エネルギーは変化が少なかった。

LUMO エネルギーの変化の振る舞いの違いを詳細に検討するため、TzTz、NTz のモノマー、ダイマーの LUMO を描いた(図 2)。モノマーの LUMO を検討すると、TzTz では分子全体に広がっているが、NTz では LUMO が分子の中心に局在していることがわかった。次にダイマーの LUMO を検討すると、TzTz ではモノマーの結果を反映し分子全体に広がるが、NTz では局在することがわかった。このことから、モノマーの LUMO が広がっている場合は、ポリマーのユニット間の相互作用が大きくなるため、重合化する場合軌道エネルギーが大きく変化することがわかった。この解析は他のポリマーにも適用可能であり、設計・制御に重要な知見を与える。講演では、その他のポリチオフェンの結果や光吸収スペクトルについても議論する予定である。

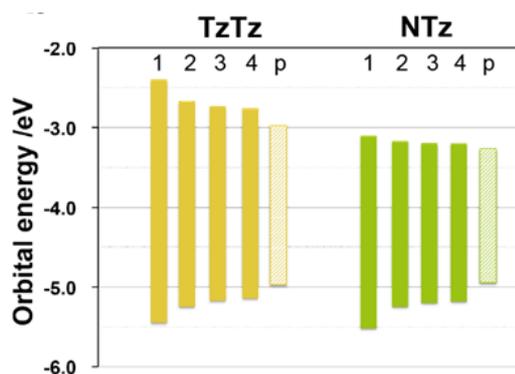


図 1 TzTz、NTz のフロンティア軌道エネルギー 1,2,3,4,...,p(∞)は、重合度をあらわす。

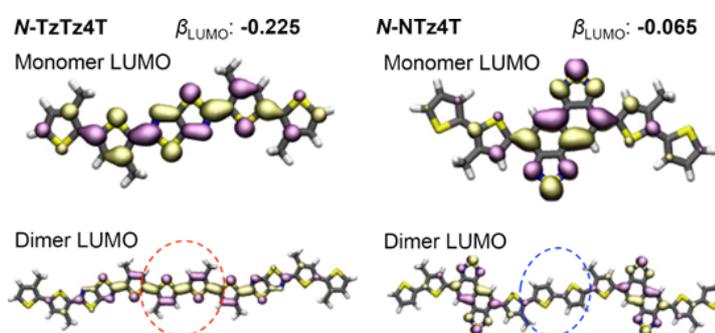


図 2 TzTz、NTz のモノマー、ダイマーの LUMO 分布

[1] K. Takimiya, I. Osaka, M. Nakano, Chem. Mater. 26 (2014) 587.