

有機薄膜太陽電池の光電変換機構の理論研究

Theoretical Study of Photovoltaic Mechanisms of Organic Photovoltaics

○田村宏之 (東北大 AIMR)

○Hiroyuki Tamura (Tohoku university)

E-mail: hiroyuki@wpi-aimr.tohoku.ac.jp

本講演では最近の有機薄膜太陽電池に関する理論研究として、ドナー/アクセプター界面での電荷分離機構[1]、及び励起子のシングレット・フィッション機構[2]について報告する。

ドナー/アクセプター界面での電荷分離と電子・正孔再結合の競合は太陽電池の内部量子効率を左右する。有機半導体は誘電率が低いため、静電引力が電子・正孔対を界面にトラップさせる傾向があり (CT 状態)、引力に打ち勝ってフリー電荷が生成する要因が議論の的となっている。

本研究では、有機薄膜太陽電池のフリー電荷の生成機構を解明するため、第一原理計算と量子ダイナミクス計算による理論解析を行った (図1) [1]。界面で電荷が単分子に局在している場合には解離障壁は 0.4eV 程度あり、効率的なキャリア生成は困難と考えられる。界面のドナー分子の有効 π 共役長が長くフラレンの結晶性が高いとき、電子・正孔が多分子に非局在化し静電障壁が下がる傾向が見られ、ダイナミクス計算で数百フェムト秒のキャリア生成が再現された。これはアニールしたポリマー/フラレン界面等で観察される超高速キャリア生成の要因と考えられる。さらに、励起子の電荷分離に伴う振動励起エネルギーが緩和する前にフリーキャリアが生成する“ホットエキシトン機構”の重要性が示された。

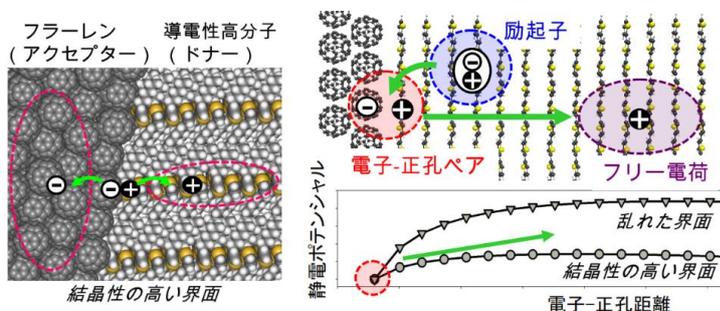


図1. 有機薄膜太陽電池のドナー - アクセプター界面と CT 状態を経たキャリア生成の概念図。

光吸収した有機結晶や導電性高分子中で一重項励起子が二つの三重項励起子に分裂する「シングレット・フィッション」は、一つの光子から二倍の電子・正孔対を生成できることから太陽電池への利用が期待されている。本研究では、第一原理的な量子ダイナミクス計算で、代表的なアセン系有機結晶についてシングレット・フィッション機構を理論解析した[2]。TIPS ペンタセンの超高速シングレット・フィッションとルブレンの熱活性過程の違いが π 共役分子のスタッキング構造に起因し、また CT 中間状態の役割が異なることが示された。

[1] H. Tamura and I. Burghardt, J. Am. Chem. Soc. **135**, 16364 (2013).

[2] H. Tamura et al. Phys. Rev. Lett. **115**, 107401 (2015).