

高分子フラーレン太陽電池の分子構造と効率の統計解析

Statistical Analysis on a Correlation between Chemical Structures and Efficiencies of Polymer-Fullerene Solar Cells

阪大院工¹, JST さきがけ² ○長澤慎司¹, 佐伯昭紀^{1,2}

Osaka Univ.¹, JST-PRESTO², Shinji Nagasawa¹, Akinori Saeki^{1,2}

E-mail: saeki@chem.eng.osaka-u.ac.jp

近年の急速な人工知能 (AI) の発展と共に、材料開発におけるマテリアルズ・インフォマティクス (MI) が注目を集めている。第 5 期科学技術基本計画 (Society5.0) では、計算科学・データ科学を駆使した革新的な機能性材料の創製と新規物質の予測を掲げており、ベイズ推定やスパースモデル、モンテカルロといった手法により材料探索研究が進められている。有機薄膜太陽電池 (OPV) は低毒・軽量である反面、光電変換効率は他の競合太陽電池と比べると低い。通常、高分子設計は電子供与基・電子求引基・スペーサー・アルキル鎖を組み合わせて行われるが、それぞれ 10~20 種類のコンポーネントを単純に組み合わせると 100 万通り以上考えられ、通常は実験者の勘・経験・こだわりを軸に、量子化学計算 (主に DFT) を参考にして構造を絞る。

一方で、世界では MI を用いた材料探索研究が早くから進められている。例えば米国では 2012 年に Materials Genome Initiative (MGI) がスタートし、熱電変換材料やリチウムイオン電池に対して膨大な第一原理計算と MI による統計解析が行われている。また、Harvard Clean Energy Project (CEP) では、230 万種類の OPV 分子の計算結果が公開されている^[2]。しかし、実際の OPV 素子は多くの因子が複雑に関与しているため、未だ MI から材料の逆問題解決は成功していない。

本研究では OPV 評価と MI の概念を融合させ、材料の構造と変換効率の関係を見出し、ひいては高効率材料を提案することを目指している。まずは、約 500 種類の p 型高分子のデータ (J_{sc} , V_{oc} , FF, 重量平均分子量: M_w , バンドギャップ: E_g , π 共役に関与する原子数) の間の相関を検討した。しかし、それぞれ単体では、変換効率との明確な相関は見られない (Figure 1a-1c)。そこでそれらを組み合わせた経験的パラメータを作製し、変換効率との相関を検討した (Figure 1d)。また、我々は時間分解マイクロ波伝導度法 (TRMC) を用いた OPV の高速スクリーニング法を提案しており^[3]、統計結果の補正項として考慮する。

当日は MI による解析と、TRMC などの実験データを基に、変換効率と p 型材料の構造との関係について議論する。

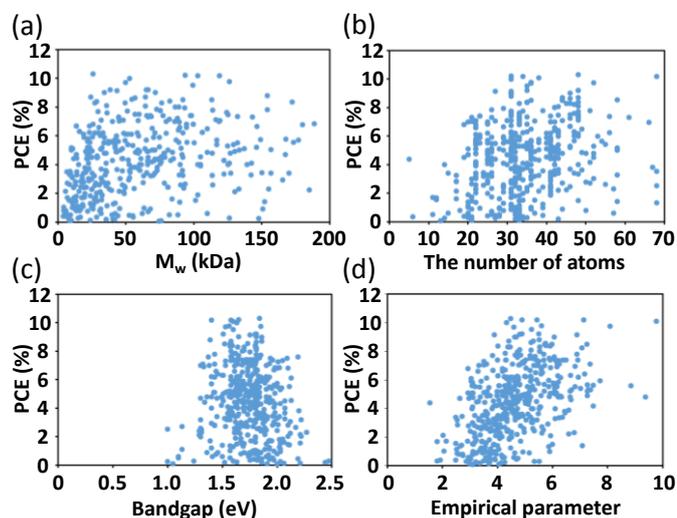


Figure 1. Plots of the PCEs of reported polymer:fullerene solar cells as a functions of (a) M_w , (b) bandgap, (c) the number of atoms, and (d) empirical factor.

[1] MGI home page. <https://www.mgi.gov/>

[2] CEP home page. <http://cleanenergy.molecularspace.org/>

[3] a) A. Saeki *et al.*, *Adv. Energy Mater.* **2011**, *1*, 661. b) A. Saeki, S. Yoshikawa *et al.* *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 19035. c) S. Yoshikawa, A. Saeki *et al.* *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 17778.