熱活性化遅延蛍光分子における光電荷分離過程と単一成分薄膜太陽電池への応用

Photodissociation process of thermally activated delayed fluorescence molecules and its application to single component organic solar cells

阪大院工　°有泉 恒亮，村上 敬祐，末延 知義，鈴木 充朗，中山 健一

Osaka Univ., °Kosuke Ariizumi, Keisuke Murakami, Tomoyoshi Suenobu, Mitsuharu Suzuki, Ken-ichi Nakayama

E-mail: nakayama@mls.eng.osaka-u.ac.jp

有機太陽電池において現在主流であるバルクヘテロ接合（BHJ）型太陽電池では、ドナー(D)・アクセプター(A) 相分離構造の精密な制御が必要であり、D-A 界面でのエネルギー緩和が光起電力ロスの原因となる（**Fig. 1a**）[1]。我々はその問題を解決するため、有機半導体材料の膜バルクでの光電荷分離挙動に着目し、単一化合物のみの有機膜からなる薄膜太陽電池の可能性を検討している（**Fig. 1b**）。一般的に有機半導体は誘電率が低く励起子束縛エネルギーが大きいため、膜バルクでの光電荷分離は難しい。これまでに我々は、分子内 D-A 共役構造を有し電荷移動吸収を示す分子が、励起状態で大きな分極を持つことにより比較的高い光電荷分離能力を示すことを報告してきた[2]。本研究では、膜バルクでの光電荷分離確率を向上させるためのもう一つのファクターである、光励起寿命を延ばすことを企図し、熱活性化遅延蛍光（TADF）分子に着目した。TADF 分子は一重項励起状態（S_1）と三重項励起状態（T_1）のエネルギー差 （ΔE_{ST}）が小さく逆項間交差が起こりやすいため励起寿命が長くなる（**Fig. 2**）。その中でも特に可視域まで吸収を持つ TADF 分子を活性層に用いることで PCE の向上が期待できる。

本発表では、TADF 分子を用いた単一成分太陽電池の V_{OC} および J_{SC} の支配因子、そして量子化学計算に基づいた分子設計指針について述べ、単一成分太陽電池の可能性と問題点について考察する。

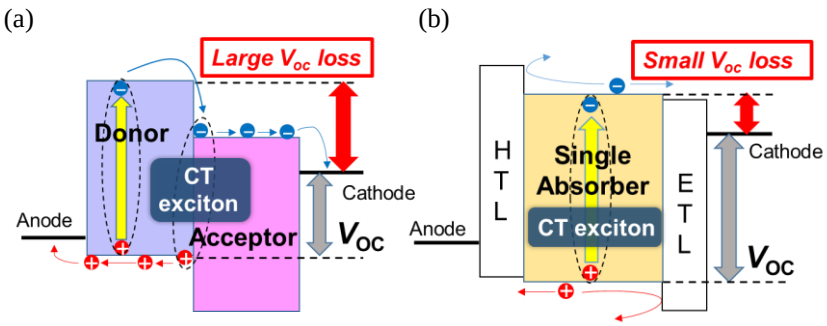

Fig. 1. Charge separation process at (a) BHJ OSCs, and (b) single component OSCs.

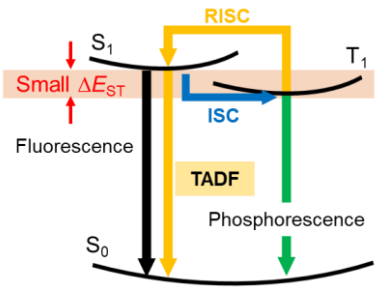

Fig. 2. Jablonski diagram for TADF molecules.

[1] K. Vandwal et al., *Nat. Mater.*, **13**, 63 (2014).
[2] 奥田侑希ほか, 2019 年 第 66 回応用物理学会春季学術 (12a-S221-2).