

有機薄膜太陽電池界面における励起子分離過程に関する理論的研究

○島崎 智実, 中嶋 隆人

理化学研究所・計算科学研究機構

t-shimazaki@riken.jp

近年、有機薄膜太陽電池はシリコン等の無機系太陽電池を代替・補完するものとして注目を集めている。有機薄膜太陽電池は、シリコンなどの無機太陽電池と比較して簡便かつ安価に作成できることに加え、軽量・フレキシブルな特性を生かした新たな太陽電池デバイスの開発が期待できるためである。ただし、エネルギー変換効率が低い(10%程度)ため、有機薄膜太陽電池の実用化には変換効率の向上が望まれている。エネルギー変換効率を向上させるためには、有機薄膜太陽電池のメカニズムを解明し、開発・設計に生かせるシミュレーション技術が必要不可欠となっている。

有機薄膜太陽電池のメカニズムは大きく分類して、①太陽光吸収(励起子生成)、②生成した励起子のドナー・アクセプター界面への拡散、③アクセプター領域への電子の移動、④電子とホールとの分離からなる。本研究では、特に④の過程に注目して研究を行った。一般的に、有機材料は無機系材料と比較して誘電率が低い。そのため、ホールと電子が強く束縛された励起子が形成される。この強い束縛エネルギーのために、有機材料中では熱エネルギーのみでは、励起子が自由キャリアである電子とホールに完全に分離することは難しい。しかし、実際のデバイス中では比較的高効率にホールと電子が分離している。この詳細な理由は不明であり、そのことが有機薄膜太陽電池のエネルギー変換効率を向上させることを妨げている。そこで、本研究では励起子分離過程の詳細を明らかにすることを目的として研究を行った。

励起子の分離過程の詳細なメカニズムが不明なままに残されてきた要因の1つは、電荷分離過程をシミュレーションするための基礎的な取り扱いが整備されていなかったことにあると考えられる。有機薄膜太陽電池中では、ドナー・アクセプター界面のバンドオフセットから電子に対して過剰なエネルギーが与えられ、電子は過剰エネルギーを持った状態(hot state)になる。この hot state が有機薄膜太陽電池中で電子とホールが分離するために重要な寄与をすると考えられる。しかし、Onsager や Frenkel らの方法では、電荷分離のためのドライビングフォースとして外部電場が仮定されており、hot state を適切に取り扱えていなかった。そこで、本研究では、hot state を扱えるシミュレーション手法を新たに開発することによって、電子とホールとの分離過程を詳細に調べた[1]。当日はその詳細について発表を行う。

[1] T. Shimazaki and T. Nakajima, "Theoretical study of exciton dissociation through hot states at donor-acceptor interface in organic photocell", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **17**, 12538, 2015.