



大阪大学
OSAKA UNIVERSITY

国立大学法人 大阪大学

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 1-1

TEL: 06-6877-5111 (代)

www.osaka-u.ac.jp

Press Release

研究成果



2024年9月11日

分野: 工学系

キーワード: 有機太陽電池、有機半導体、励起子束縛エネルギー、非フラレンアクセプター材料、SDGs

有機太陽電池の性能向上に成功！

—有機半導体の励起子束縛エネルギー低減に向けた新指針—

【研究成果のポイント】

- ◆ 有機半導体を発電層に利用した有機太陽電池で、光から電流への変換過程で妨げとなる励起子束縛エネルギー※1を低減できる新分子設計指針を実証
- ◆ 有機太陽電池のエネルギー変換効率の向上や、単成分の有機半導体での光電変換を実現
- ◆ 将来的に、新駆動原理・新デバイス構造に基づいた高性能太陽電池や波長選択型透明太陽電池などの光・電子デバイスの開拓に期待

❖ 概要

大阪大学産業科学研究所の陣内青萌助教、家裕隆教授は、岡山大学環境生命自然科学学域の山方啓教授、神戸大学分子フォトサイエンス研究センターの小堀康博教授、名古屋大学情報学研究科の東雅大教授らと共同で、有機半導体分子のフロンティア軌道※2を空間的に分離させる分子設計を取り入れることで、有機半導体の励起子束縛エネルギーを低減することに成功しました(図1)。

新たに開発した有機半導体材料を使用してバルクヘテロジャンクション※3型の有機太陽電池を作製したところ、小さな励起子束縛エネルギーを反映して従来材料よりも優れた太陽電池特性を示しました。さらに本材料は、単一の有機半導体を発電層とする単成分型有機太陽電池材料としても機能することを見出しています。本研究成果によって、本研究分野の重要課題の一つである「励起子束縛エネルギーの低減」に効果的な分子デザイン指針の一端が明らかとなり、新駆動原理に基づく新たな光・電子デバイスの創出に繋がるのが期待されます。

本研究成果は、2024年8月12日(現地時間)にドイツ化学会誌『Angewandte Chemie International Edition』にオンライン速報版として掲載されました。

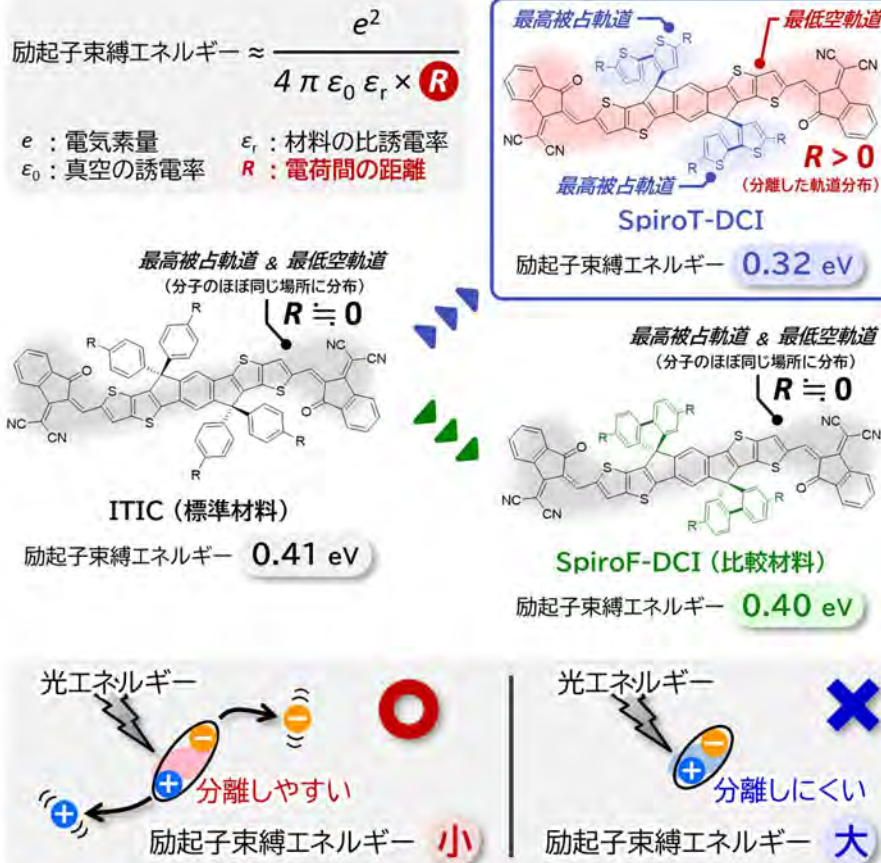


図1 本研究で開発した有機半導体分子の概要

❖ 研究の背景

有機半導体は炭素を基盤とした π 共役系^{※4}の有機分子で構成され、柔軟性や軽量性といった利点のほか、ロール・ツー・ロールなどの印刷プロセスを利用した大面積デバイスの製造が可能であるなど、従来の無機系半導体にはない機能的特徴を有しており、研究グループではこの有機半導体を発電層に利用した有機太陽電池の開発に取り組んでいます。

有機太陽電池のエネルギー変換効率は、「有機半導体が光エネルギーを受け取って、電流の源である自由電子と正孔を生成する効率」に大きく左右されますが、一般的に有機半導体はシリコンなどの無機半導体と比較して比誘電率(ϵ_r)^{※5}が小さいため、光エネルギーを受け取っても負電荷と正電荷がクーロン引力(=励起子束縛エネルギー)で互いに強く束縛されて、自由電荷への変換過程が進行しにくいことが課題の一つとなっています。この課題を克服するために、発電層に使用する有機半導体の励起子束縛エネルギーを低減させるための分子デザイン指針の開拓が望まれていました。

❖ 研究の内容

励起子束縛エネルギーは古典的に、クーロンの式(図1左上)によって表現できることが知られています。研究グループでは、有機半導体の比誘電率^{※5}(ϵ_r)を増加させる分子デザインを取り入れることによって、励起子束縛エネルギーを低減できることを見出していました(2024年8月8日プレスリリース)。一方、クーロンの式に含まれる R (=励起状態^{※6}での正電荷と負電荷の距離)を増加させることでも励起子束縛エネルギーを低減可能と期待されますが、励起状態での電荷間距離に着目した有機半導体材料は未開

拓でした。

通常、光エネルギーを受け取った励起状態の有機半導体分子では、電子によって占有されている分子軌道のうち、最もエネルギーの高い軌道(最高被占軌道、以下 HOMO)に存在していた電子が、電子によって占有されていない分子軌道のうち、最もエネルギーの低い軌道(最低空軌道、以下 LUMO)に移った状態となります。すなわち、分子内で HOMO の存在する場所が正電荷、LUMO の存在する場所が負電荷を帯びた状態となります。本研究では分子内での HOMO と LUMO の空間的配置を分離させる設計(*R* が大きくなる設計)を実現することで、従来材料である ITIC よりも、励起子束縛エネルギーが小さい有機半導体分子(SpiroT-DCI)を開発しました。

開発した有機半導体分子をアクセプター材料(光を受け取る材料)として、また PBDB-T (CAS 登録番号 1415929-80-4) をドナー材料(電子を放出する材料)として使用したバルクヘテロジャンクション型の有機太陽電池を作製したところ、小さな励起子束縛エネルギーを反映して、従来材料(ITIC)や比較材料 (SpiroF-DCI) よりも優れた太陽電池特性を示しました。さらに、今回開発した SpiroT-DCI の単一成分膜を発電層とする太陽電池を試作した結果、最大で 3.6%の量子効率^{※7}を示し、エネルギー変換効率は小さいものの単成分型有機太陽電池としても機能する事を見出しました。

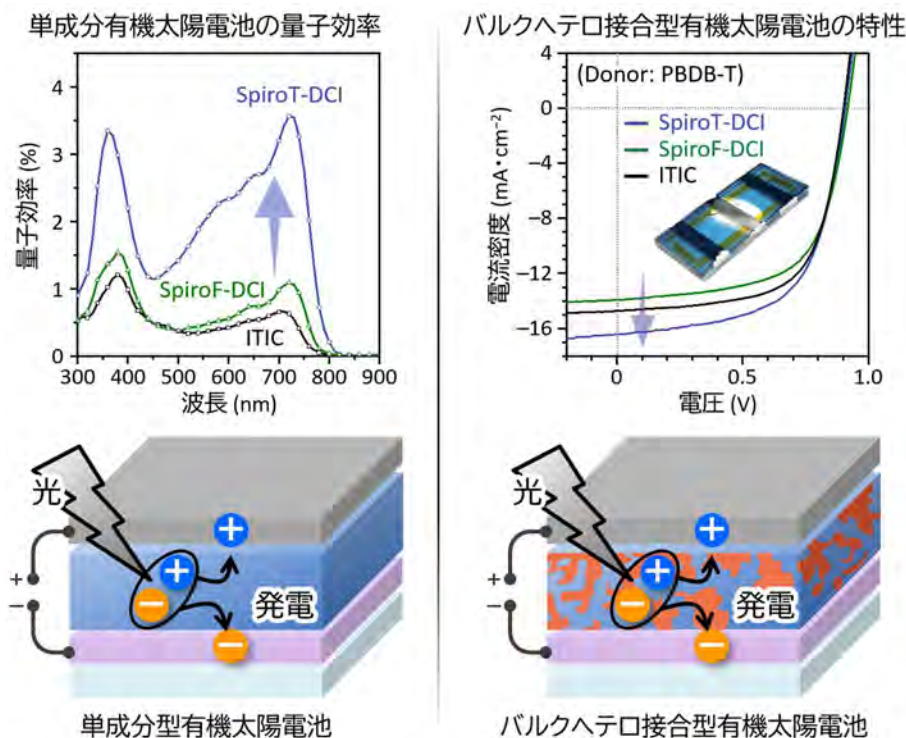


図 2 単成分型有機太陽電池の量子効率 (左)、バルクヘテロジャンクション型有機太陽電池の特性 (右)

❖ 本研究成果が社会に与える影響(本研究成果の意義)

本研究成果は、有機半導体におけるフロンティア軌道の空間的配置が励起子束縛エネルギーに及ぼす影響の一端を明らかとし、励起子束縛エネルギーの低減に向けた材料デザイン指針を提案する先駆的研究といえます。新知見に基づく材料開拓の展開を通じて、バルクヘテロジャンクション型有機太陽電池の性能向上や、単成分型有機太陽電池の実現が期待されます。

また本研究グループでは、新駆動原理・新デバイス構造に基づいた半透明有機太陽電池や有機系光触媒

Press Release

の開拓を推進します。

❖ 特記事項

本研究成果は、2024年8月12日(現地時間)にドイツ化学会誌『Angewandte Chemie International Edition』にオンライン速報版として掲載されました。

タイトル: “Nonfullerene Acceptors Bearing Spiro-Substituted Bithiophene Units in Organic Solar Cells: Tuning the Frontier Molecular Orbital Distribution to Reduce Exciton Binding Energy”

著者名: Kai Wang, Seihou Jinnai, Takumi Urakami, Hirofumi Sato, Masahiro Higashi, Sota Tsujimura, Yasuhiro Kobori, Rintaro Adachi, Akira Yamakata and Yutaka Ie

DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.202412691>

なお、本研究は、日本学術振興会(20H02814, 20H05841, 20KK0123, 23K17947, 20K15352, 23H02064, JP20H05839, JP22H00344, JP20H05835, 24H00482, 20H05838, 24H00485)、科学技術振興機構(JPMJMI22I1, JPMJSF23B3, PMJCR20R1, JPMJCR23I6)、新エネルギー・産業技術総合開発機構(21500248-0)、三菱財団研究助成の一環として行われました。

❖ 用語説明

※1 励起子束縛エネルギー

クーロン力によって束縛された電子と正孔の対(励起子)を解離して、自由電荷に変換するために必要なエネルギー。有機太陽電池におけるエネルギー変換効率低下の原因の一つ。

※2 フロンティア軌道

分子に広がる電子軌道のうち、電子によって占有されている軌道のなかで最もエネルギーの高い軌道(最高被占軌道、または HOMO)と、電子によって占有されていない軌道のなかで最もエネルギーの低い軌道(最低空軌道、または LUMO)の2つを合わせてフロンティア軌道という。

※3 バルクヘテロジャンクション

電子供与性分子(ドナー)と電子受容性分子(アクセプター)が薄膜全体でナノスケールの混合状態となっている接合構造のこと。

※4 π 共役系

二重結合と一重結合が交互に連なっている分子構造のこと。

※5 比誘電率

※6 励起状態

量子力学的な系(分子や原子など)の状態のうち、エネルギー的に最も安定な状態(基底状態)よりもエネルギーが高い状態。ここでは、有機半導体分子が光エネルギーを受け取ることで生成される高エネルギー状態を指す。

※7 量子効率

照射された光(光子)が電流として取り出される割合。

【家教授のコメント】

励起子束縛エネルギーは、デバイス・触媒性能向上の鍵となる物理的なパラメーターの一つですが、実験的に正確に見積もることが難しいため、研究開発が遅れていました。本研究成果を通じて新たな有機半導体の分子設計指針の提案がでてくることが期待されます。

❖ SDGs目標



❖ 参考 URL

陣内青萌 助教 研究者総覧

<https://rd.iai.osaka-u.ac.jp/ja/2136e351e120e473.html>

家裕隆 教授 研究者総覧

<https://rd.iai.osaka-u.ac.jp/ja/3cc5087df5e9219c.html>

家研究室 WEB サイト

<https://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/omm/>

山方研究室 WEB サイト

<https://okadaichem.jp/surface/members/yamakata/>

小堀研究室 WEB サイト

<https://www2.kobe-u.ac.jp/~ykobori/frame.html>

東研究室 WEB サイト

<https://sites.google.com/view/higashi-group/home>



国立大学法人 大阪大学

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 1-1

TEL: 06-6877-5111 (代)

www.osaka-u.ac.jp

Press Release

❖ 本件に関する問い合わせ先

<研究に関すること>

大阪大学 産業科学研究所 教授 家 裕隆 (いえ ゆたか)

TEL:06-6879-8475 FAX:06-6879-8479

<プレスリリースに関すること>

大阪大学 産業科学研究所 広報室

TEL:06-6879-8524 FAX:06-6879-8524

岡山大学総務・企画部広報課

電話番号:086-251-7012 FAX:086-251-7294