

# ナノグラフェン含有非フラーレンアクセプターにおける 縮環ヘテロ芳香環の影響

工学研究科 応用化学専攻

教授 うめやまともかず 梅山有和、◎M2 くぼたもとひさ 窪田資久

## キーワード

有機薄膜太陽電池、非フラーレンアクセプター、セレンフェン、一重項励起子寿命

## 研究概要

有機薄膜太陽電池 (organic photovoltaics, OPVs) は軽量で柔軟性に富み、安価に生産が可能であるといったシリコン太陽電池には見られない利点を有する一方、変換効率 (power conversion efficiency, PCE) や耐久性の向上が求められている。近年、従来型の電子アクセプター材料であるフラーレンを用いない非フラーレンアクセプター (non-fullerene acceptor, NFA) が、10%以上の PCE を示す高効率な OPV 材料として数多く開発されている。その代表例として、アルキルフェニル基などの嵩高い置換基を導入した電子豊富なドナーユニット (D) を中心骨格とし、その両末端に電子不足なアクセプターユニット (A) が結合した A-D-A 型構造を有する ITIC (Fig. 1 上) が挙げられる。

当研究室では、チエノアザコロネン (TAC) を D 骨格、A 骨格に 1,1-ジシアノメチレン-3-インダノン (IC) を用いた A-D-A 型 NFA である S-TACIC (Fig. 1 下) が、比較的小さなバンドギャップ (1.59 eV) と、長い一重項励起子寿命 (1.6 ns) を両立できることを報告している。この要因として、薄膜状態の S-TACIC における強い分子間相互作用による振動緩和の抑制が考えられているが、詳細は不明であった。

そこで本研究では、チエノアザコロネンに結合した縮環チオフェンを異なるヘテロ芳香環に置き換えた Se-TACIC (E = Se, Fig. 1 下) を開発した。異なるヘテロ環の導入により、薄膜中での分子間相互作用が変化すると考えられ、OPV 性能の制御要因の解明が期待できる。

## アピールポイント

一般的な有機半導体は、低バンドギャップになると、太陽光吸収能は向上するが、吸収したエネルギーが分子の運動エネルギーに変換されて熱的失活しやすく、一重項励起子の寿命が短くなる (エネルギーギャップ則) ため、高い PCE の達成が困難となる。本研究では、薄膜中での特異な分子間相互作用により分子運動を抑制できれば、一重項励起子が長寿命化し、太陽光から得たエネルギーを効率よく自由電荷の発生に使うことができると考えた。このような考え方は、凝集誘起発光 (AIE) として有機発光材料へ適用する研究が近年注目を集めているが、OPV に適用された例は当研究室の TACIC に関する報告のみである。本研究は、TAC に縮環したヘテロ芳香環の構造を変化させ、その影響を調べるものであり、エネルギーギャップ則から生じるジレンマを克服する電子アクセプター材料の設計指針を得ることができる。それにより、一重項励起子の拡散距離が増加し、ナノスケールで相分離したバルクヘテロ接合構造を形成しなくとも、変換効率の高い OPV の構築が可能となる。

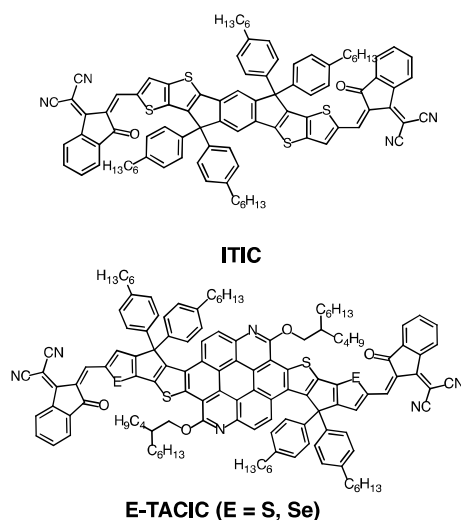


Fig. 1 ITIC および E-TACIC の化学構造