

未来社会創造事業 探索加速型
「地球規模課題である低炭素社会の実現」領域
年次報告書(探索研究期間)

令和3年度 研究開発年次報告書

令和2年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：尾坂 格]

[広島大学大学院先進理工系科学研究科・教授]

[研究開発課題名：
革新的有機半導体の開発と有機太陽電池効率20%への挑戦]

実施期間：令和3年4月1日～令和4年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1)「材料開発」グループ(広島大学)

① 研究開発代表者:尾坂 格 (広島大学大学院先進理工系科学研究科、教授)

② 研究項目

- ・p型(ドナー性)半導体ポリマー材料の開発
- ・n型(アクセプター性)半導体分子およびポリマー材料の開発
- ・有機薄膜太陽電池素子の作製・評価

(2)「発電機構解析」グループ(京都大学)

① 主たる共同研究者:大北 英生 (京都大学大学院工学研究科、教授)

② 研究項目

- ・電荷生成ダイナミクスの解析
- ・電圧損失機構の解析

(3)「電子構造解析」グループ(千葉大学)

① 主たる共同研究者:吉田 弘幸 (千葉大学大学院工学研究院、教授)

② 研究項目

- ・精密電子構造解析
- ・励起子束縛エネルギー解析
- ・電荷解離エネルギー解析

§2. 研究開発成果の概要

塗布型有機薄膜太陽電池(OPV)は、従来のシリコン太陽電池にはない特長を有する重要な次世代太陽光発電技術である。本研究では、合理的かつ精密な分子設計に基づき、革新的有機半導体材料を開発することで、OPV未踏のセル変換効率20%達成に挑む。材料開発の指針として、電荷分離効率を向上するため、電荷非局在化を促進しうる剛直な分子構造をもつ高結晶性有機半導体の開発を推進する。今年度、研究代表者Gにて、平面ロッド型構造を有する非フラレン材料(NFA)として、NTP4Xについて検討を進めたところ、16%を超える変換効率が得られた。一方、平面ロッド型骨格を有する新規p型ポリマー材料として、PNBTz1やPTBTz1について、セルの最適化を進めたところ、16%程度変換効率が得られた。また、新規ポリマー材料として開発したPTNTBDT-Fにおいても16%を超える変換効率が得られるとともに、この材料がOPV最大の課題である電圧損失と電荷生成のトレードオフを解消しうる特性を有することが分かった。さらに、共同研究者Gにおいて、フラレンアクセプターとNFAを用いた薄膜の解析を進めたところ、NFAにおける分子の四重極が電荷生成促進に大きく影響を与えることが示唆された。これらの成果は、変換効率20%を目指す上で、重要な知見となる。

【代表的な原著論文情報】

1. M. Saito, S. Ogawa, and I. Osaka, “Contrasting Effect of Side-Chain Placement on Photovoltaic Performance of Binary and Ternary Blend Organic Solar Cells in Benzodithiophene-Thiazolothiazole Polymers” *ChemSusChem*, **2021**, *14*, 5032–5041.
2. Naoya Nakao, Soichiro Ogawa, Hyung Do Kim, Hideo Ohkita, Tsubasa Mikie, Masahiko Saito, and Itaru Osaka, “Pronounced Backbone Coplanarization by π -Extension in a Sterically Hindered Conjugated Polymer System Leads to Higher Photovoltaic Performance in Non-Fullerene Solar Cells” *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2021**, *13*, 56420–56429.
3. Li-Hui Chou, Tsubasa Mikie, Masahiko Saito, Cheng-Liang Liu, and Itaru Osaka, “Naphthobisthiadiazole-Based π -Conjugated Polymers for Nonfullerene Solar Cells: Suppressing Intermolecular Interaction Improves Photovoltaic Performance” *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2022**, *14*, 14400–14409.