

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）

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]

[所属: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 5 年 4 月 1 日～令和 6 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

(4)「素子作製プロセス」グループ(理化学研究所)

① 主たる共同研究者:但馬 敬介 (理化学研究所創発物性科学研究センター、チームリーダー)

② 研究項目

- ・素子作製プロセス
- ・状態密度分布の解析

§2. 研究開発成果の概要

有機薄膜太陽電池のセル変換効率 20%達成に向けて重要な課題は、低電圧損失と高効率電荷生成の両立、すなわち、最小化されたドナー/アクセプター間エネルギーオフセットを有する材料系において効率的な電荷解離を実現することである。そのためには、ドナー/アクセプター界面にて電荷非局在化を促進することが重要との仮説を立て、剛直な平面ロッド型 π 電子系骨格を用いた有機半導体の開発を推進している。この開発指針に基づき、尾坂 G では非フラーレンアクセプター材料およびポリマードナー材料を種々合成した。昨年度、特にポリマードナーPTBTzE および PTNT1-F を用いて 16~17%程度の変換効率を得た。今年度は、これら 2 つのポリマーに焦点を当て、高効率化に向け、分子構造や合成処方について改良を検討した。特に PTNT1-F において、中間体の精製法を変更することで、従来よりも簡便かつ高純度にモノマーを合成することに成功した。さらに、重合方法を最適化することで、重合欠陥が抑制され、従来よりも高分子量であ

りながら高い溶解性を有するポリマーバッチを得た。変換効率は最大で 18.5%まで向上した。また、大北 G および吉田 G 共同で解析を行い、開発した p 型ポリマーは電圧損失が小さい材料としては最も高い電荷生成効率を示すことが明らかになった。これは、従来の電圧と電流のトレードオフが解消し得ることを示しており、今後の高効率化に向けて極めて重要な知見である。また、大北 G および但馬 G (今年度より参画) と共同で再結合解析、光学シミュレーションを行うことで、20%達成に向けた課題と課題解決方法についても明らかにした。

【代表的な原著論文情報】

- (1) “Ordered π -Conjugated Polymer Backbone in Amorphous Blend for High Efficiency Nonfullerene Organic Photovoltaics” Saito, M.; Yamada, H.; Kranthiraja, K.; Mikie, T.; Saeki, A.; Ohkita, H.; Osaka, I. *Commun. Mater.*, **2023**, *4*, 72.
- (2) “Manipulating the Functionality and Structures of π -Conjugated Polymers Utilizing Intramolecular Noncovalent Interactions Towards Efficient Organic Photovoltaics” Kamimura, S.; Saito, M.; Teshima, Y.; Yamanaka, K.; Ichikawa, H.; Sugie, A.; Yoshida, H.; Jeon, J.; Kim, H. D.; Ohkita, H.; Mikie, T.; Osaka, I. *Chem. Sci.*, **2024**, *15*, 6349–6362.
- (3) “Dependence of Exciton Binding Energy on Bandgap of Organic Semiconductors” Sugie, A.; Nakano, K.; Tajima, K.; Osaka, I.; Yoshida, H. *J. Phys. Chem. Lett.*, **2023**, *14*, 11412–11420.