

有機薄膜太陽電池のキャリア発生機構の検討と試作

(宇部高専) ○成島和男、原岡壮馬、福田七夕、藤井萌乃、藤笠舜大、伊東快嶺

1. 緒言

昨今、地球環境の悪化の影響を受けて、再生可能エネルギーの積極的な利用が国際的に図られている。再生可能エネルギーとは、太陽光、水力、風力、地熱、バイオマスなど様々な種類があるが、この中でも太陽光を利用した太陽光発電は、最も利用されている発電形式である。太陽光発電の中にも、有機半導体を用いた、有機半導体薄膜太陽電池は、軽く、フレキシブル、安価で、資源がほぼ無尽蔵であるという利点を持つ。

有機薄膜太陽電池は、一般に「プラス電極/正孔輸送層/光活性層/電子輸送層/マイナス電極」の構造を有している。以前、著者らは、光活性層内の電子状態について量子化学計算を行った[1][2]。今回我々は、正孔輸送層と光活性層界面間の電子状態について、詳細に調べた。さらにこの計算結果を基に、有機薄膜太陽電池を試作したので、その結果を紹介する。

2. 計算方法と計算結果・考察

Gaussian09 (Gaussian Inc.) を用いて、Hartree-fock 法を用いて、導電性高分子 PEDOT:PSS (p 型半導体) と C_{60} (n 型半導体) からなる 2 分子系の構造最適化を行った後、PEDOT:PSS モノマーと C_{60} 分子間の電荷密度分布を計算した。配置と分子間距離を変えた時にどのような作用の変化が起きるのかを調査した。これらに分子は、実際の素子上では光活性層と正孔輸送層界面に相当する。基底関数は 6-31G 系を用いた。分子間距離は、PEDOT:PSS と C_{60} 各々の中心から約 12 [Å] と 24 [Å]、36 [Å] とした。

C_{60} の電荷密度の結果に注目すると、基底状態と励起状態で電荷密度分布に変化が見られた。先行研究で行われたメタルフリーフタロシアニン (H_2Pc) と C_{60} 間の計算でも同様な結果が得られた[2]。従って、光活性層と正孔輸送層の界面においても伝導電子発生の可能性が十分に考えられる。また、分子間距離が近くなることにより、相互作用が強くなることがわかった。さらに、PEDOT:PSS モノマーの配置を変えて、検討した結果、 C_{60} 分子の電子の偏りが PSS 側に集中したことから、PEDOT に比べて PSS の作用が強いことが推定できる。

これらの計算結果から、正孔輸送層に PEDOT:PSS を、光活性層において H_2Pc と C_{60} からなるバルクヘテロ構造を採用した場合、光活性層と正孔輸送層の界面にも、光活性層とは別の電流が発生する可能性があることがわかる。しかも、PEDOT:PSS とメタルフリーフタロシアニンは、異なった波長の光を吸収することから、PEDOT:PSS を正孔輸送層に用いると太陽光エネルギーをより有効に活用できる。このため、実際に素子を試作すると光照射時の電流が増加する可能性がある。

3. 有機薄膜太陽電池の試作とその結果

以上の計算結果を踏まえて、試作する有機薄膜太陽電池の構造を「ITO ガラス (プラス電極) / PEDOT:PSS 層 / $CuPc$ と C_{60} からなるバルクヘテロ層 / C_{60} 層 / Al 層 (マイナス電極)」とした。PEDOT:PSS 層は塗布法で、バルクヘテロ層 / C_{60} 層 / Al 層は、蒸着法で作製した。素子の特性評価は、出力 100[W] の人工太陽照明灯を用いて開放電圧及び短絡電流の測定を行った。測定装置はデジタルマルチメータを使用した。正孔輸送層に PEDOT:PSS を用いた素子は、開放電圧、短絡電流どちらの特性も得ることができた。一方、 $CuPc$ を用いた素子は、どちらの素子も短絡した結果となり、開放電圧と短絡電流を得ることはできなかった。PEDOT:PSS を導入することによって、光照射時の電流が増加する結果が得られた。

参考文献

- [1] 本田真彬、成島和男: *J. Comput. Chem. Jpn.*, **13**, 210 (2014)
- [2] 光井和輝 等: *J. Comput. Chem. Jpn.*, **15**, 235 (2016)