

計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の
開発と応用

2018 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書

玉井 康成

京都大学 大学院工学研究科

助教

スパース解析と遺伝的アルゴリズムの融合による新奇スペクトル分離手法の開発

§ 1. 研究成果の概要

有機薄膜太陽電池は安価・軽量・フレキシブルといった特長のため次世代太陽電池として注目されている。現在の課題は光電変換効率がまだシリコンほど高くないという点である。この問題を解決するために本研究では過渡吸収分光法という手法を用いて有機薄膜太陽電池の内部で起こる電荷生成・再結合ダイナミクスの解明を目指している。

有機物の過渡吸収測定ではスペクトル形状が時々刻々変化することがよくあり、このようなスペクトルシフトは素子内部で何が起きているのかを知る上で非常に重要な情報である。一方、データを解析する上ではスペクトルシフトが存在することで既存のスペクトル分離手法が役に立たなくなるという問題も発生する。

本研究ではスペクトルシフトも含めて分離するアルゴリズムの構築を行なっている。本研究で開発したアルゴリズムを用いて有機薄膜太陽電池のベンチマーク材料である P3HT/ICBA ブレンド膜の過渡吸収スペクトルを P3HT の励起子と正電荷に分離したところ、正電荷の吸収スペクトルが経時変化していることがわかった。これは、有機薄膜太陽電池では電子ドナー/アクセプターの相分離界面においてのみ電荷生成するため、界面近傍の非晶 P3HT ドメインで正電荷が生じ、時間と共にエネルギー的に安定な P3HT の結晶ドメインへとダウンヒル緩和していることを示していると考えられる。

さらに、現在報告されている材料の中でトップクラスの光電変換効率を示す PM6/Y6 ブレンド膜についても過渡吸収測定を行ったところ同様の電荷シフトが観測されたことから、ダウンヒル緩和に誘起されて電荷解離が進行することで高効率自由電荷生成を実現しているものと考えられる。また、その際スペクトルシフトの量と時間スケールを評価することが、材料探索において注目すべきポイントであると考えられる。

【代表的な原著論文情報】

1. T. Umeyama, K. Igarashi, [Y. Tamai](#), T. Wada, T. Takeyama, D. Sasada, K. Ishida, T. Koganezawa, S. Ohtani, K. Tanaka, H. Ohkita, H. Imahori, “Prolongation of the singlet exciton lifetime of nonfullerene acceptor films by the replacement of the central benzene core with naphtharene”, *Sustain. Energy Fuels*, 5, 2028–2035 (2021)

DOI: 10.1039/C9SC06456G

2. M. Saito, [Y. Tamai](#), H. Ichikawa, H. Yoshida, D. Yokoyama, H. Ohkita, I. Osaka, “Significantly Sensitized Ternary Blend Polymer Solar Cells with a Very Small Content of the Narrow-Band Gap Third Component That Utilizes Optical Interference”, *Macromolecules*, 53, 10623–10635 (2020)

DOI: 10.1021/acs.macromol.0c01787

3. Y. Sakamoto, [Y. Tamai](#), H. Ohkita, “Sensitizer-Host-Annihilator Ternary-Cascaded Triplet Energy Landscape for Efficient Photon Upconversion in the Solid State”, *J. Chem. Phys.*, 153, 161102_1-7 (2020)
DOI: 10.1063/5.0025438
4. T. Saito, S. Natsuda, K. Imakita, [Y. Tamai](#), H. Ohkita, “Role of Energy Offset in Nonradiative Voltage Loss in Organic Solar Cells”, *Sol. RRL*, 4, 2000255_1-9 (2020)
DOI: 10.1002/solr.202000255
5. Y. Murata, T. Takeyama, Y. Sakamoto, K. Yamaguchi, [Y. Tamai](#), H. Ohkita, “Two-Dimensional Exciton Diffusion in an HJ-Aggregate of Naphthobisoxadiazole-based Copolymer Films”, *J. Phys. Chem. C*, 124, 13063-13070 (2020)
DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c04057