

研究開発プロジェクト名:「次世代材料評価基盤技術開発」
研究開発項目②「有機薄膜太陽電池材料の評価基盤技術開発」

「提案内容の概要」 および 「質問事項への回答」

共同提案

Advanced Algorithm & Systems

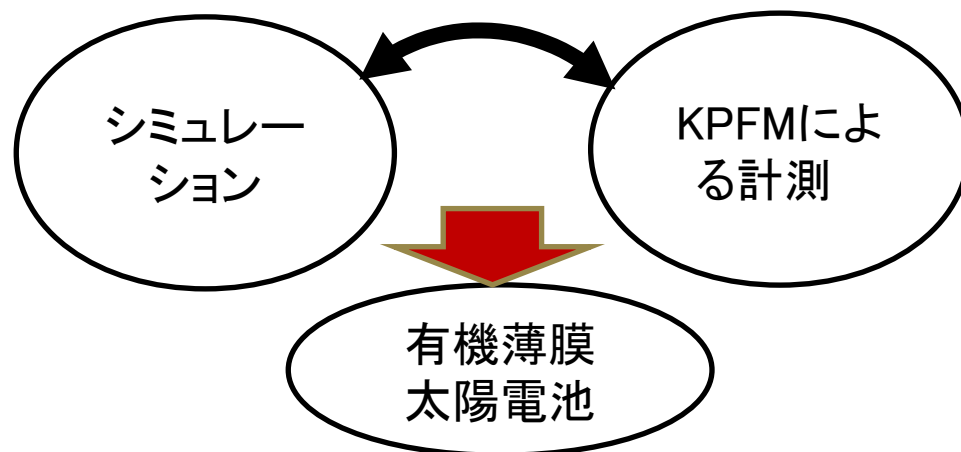
独立行政法人 物質・材料研究機構

提案内容の概要

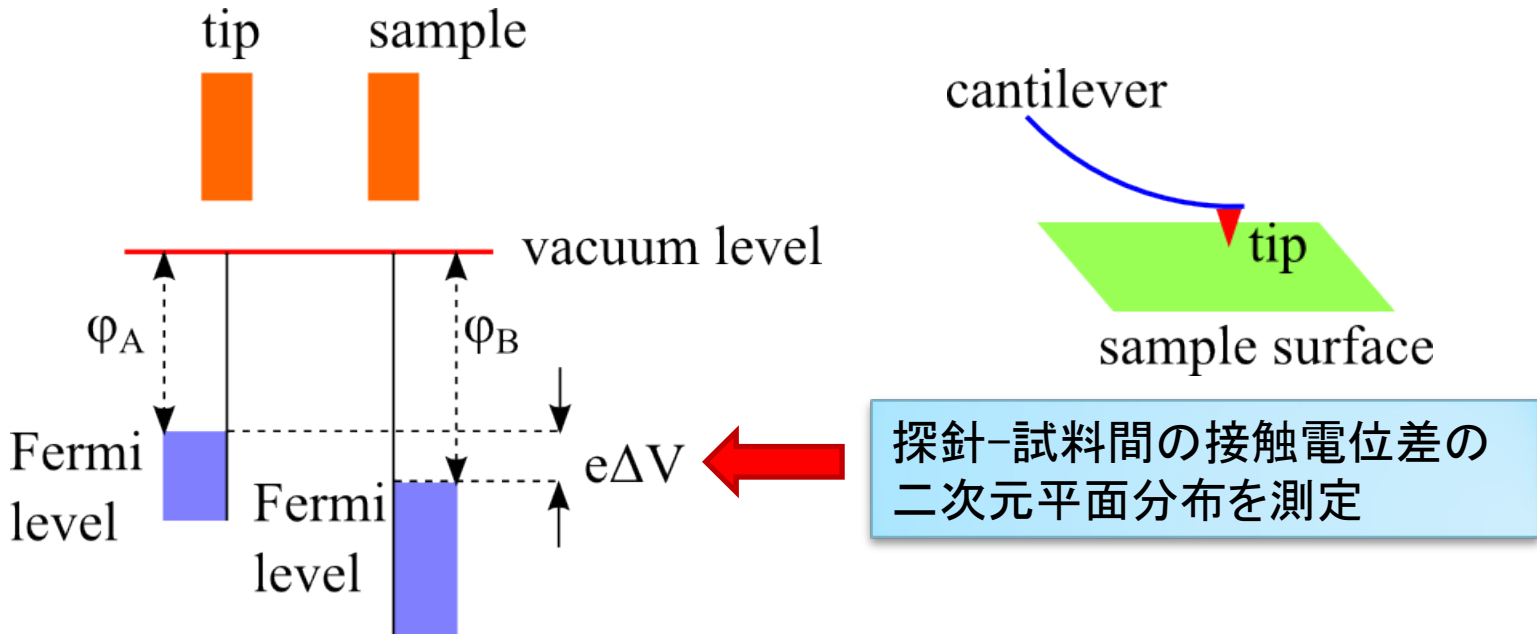
- 有機薄膜太陽電池材料解析用ケルビンプローブフォース顕微鏡 (KPFM)シミュレータの開発
- KPFM実験画像解析ソフトの開発
- 有機薄膜内励起子拡散シミュレータの開発
- ケルビンプローブフォース顕微鏡(KPFM)による計測と技術の確立

ユーザーフレンドリーなGUIの開発

- 有機薄膜デバイスのナノ構造界面に関する解析情報を共有
- 両者の間で、双方向の円滑なコミュニケーション
- 開発プロセスの加速



KPFM(ケルビンプローブフォース顕微鏡)とは？



- 試料表面の仕事関数の二次元分布が測定可能
- 試料表面の異なる材料の分布が分かる
- 異なる材質のナノ構造が判別可能 (AFM, TEMでは困難)

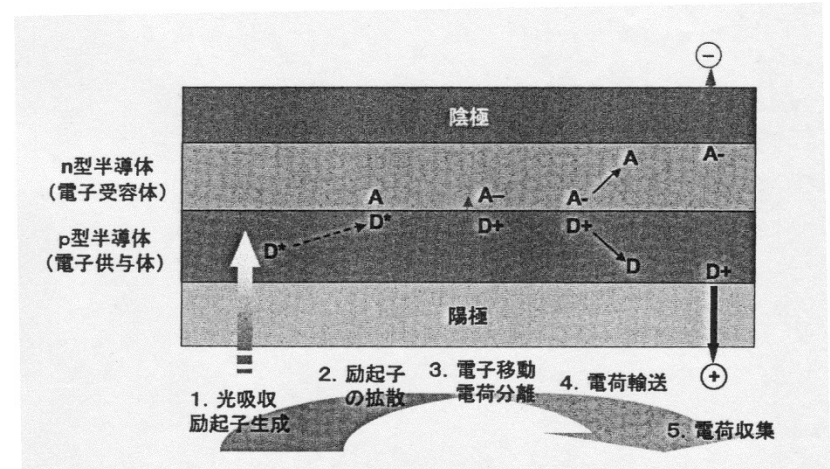
質問1:基本計画の目標、及びその内容との整合性に欠けた提案(一部の提案であり全体の技術開発を網羅する提案となっていない。)ですが、どのように本事業に参画したいのか、お考えをお示してください。

- 本提案では、**KPFMによるナノメートルスケールの構造観察と解析用シミュレータの開発**を両輪とする研究を進め、有機薄膜太陽電池の理解を深めるとともに材料開発の指針を得ることを目的とする。その知見を踏まえ、有機薄膜太陽電池の効率向上につなげていく。
- 加えて、走査型プローブ顕微鏡の一種であるKPFMによる計測技術の確立とその高度化も目標である

質問2: 本提案で開発するシミュレータの電子供与体, 受容体の材料パラメータは具体的に何を考えられているのか教えてください。(材料メーカーは構造パラメータよりも材料物性がパラメータであることが望ましいと思われます)

物性パラメータ

- 励起子の拡散長
- キャリア移動度

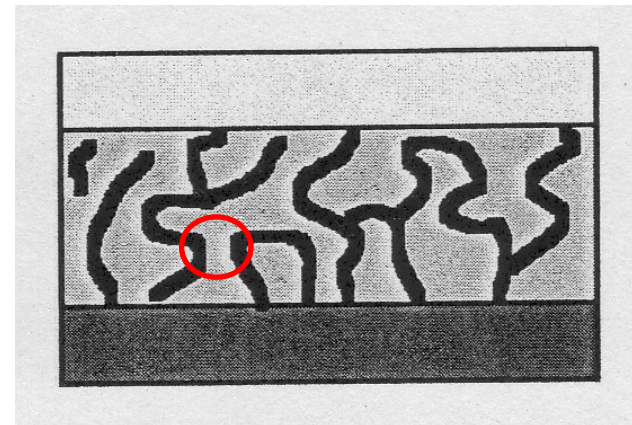


有機太陽電池における発電メカニズム

構造パラメータ

- ナノ界面構造部分のサイズ
- ナノ界面構造部分の形状

特にキャリアの輸送効率に連続性パラメータ(η_{CP})を導入し、バルクヘテロ構造の連続性をパラメータ化



バルクヘテロ構造の例

質問3: 本提案で開発するシミュレータの精度を上げるための準備があれば教えてください。

有機薄膜太陽電池材料解析用ケルビンプローブフォース顕微鏡(KPFM)シミュレータ

KPFM実験画像解析ソフト

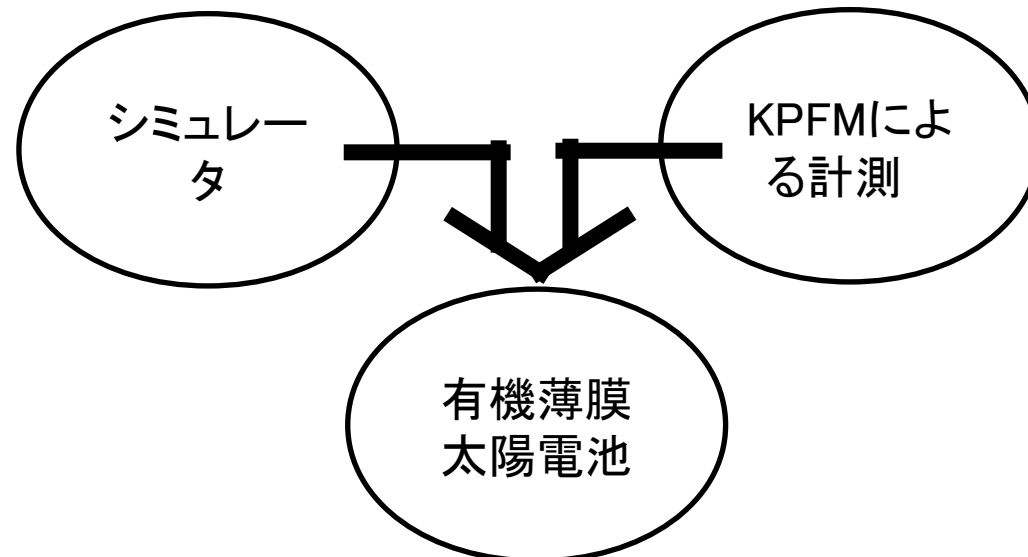
➡ これら二つのシミュレータは、**二次元平面でのデータ**を処理するものであり、**ソルバーの並列化**が比較的容易。従って、計算時間を気にせず、ソルバーをコーディングしても構わない。例えば、**KPFMシミュレータ**において、**密度汎関数法**を使用する場合、**精度の高い複雑な近似法**を採用することが可能となる。

有機薄膜内励起子拡散シミュレータ

➡ 電子供与体分子、電子受容体分子の分布、励起子の拡散は、**モンテカルロ法**によってシミュレートされる。**乱数発生源を複数、並列的に準備**することにより、**並列化**が可能。**限られた時間で、乱数試行回数を増加**させることにより、計算精度を高める。

質問4: 本提案で開発するシミュレータの結果をどう材料メーカーにフィードバックするか具体的な構想があれば紹介ください

- シミュレーションとKPFMの相互補完による、構造理解と最適化
- 上記の物性パラメータの結果を材料開発メーカーに開示し、有機薄膜材料選定のヒントにしてもらう
- 上記の構造パラメータの結果を材料開発メーカーに開示し、界面構造決定のヒントにしてもらう



質問5:シミュレータから得られた「あるべき構造」を具現化して検証する組織は実施体制の中ですか外ですか？

- シミュレーションに適した標準試料

たとえば、n, p層がきれいに分離しているもの、p, n層がよくわかっているものなど

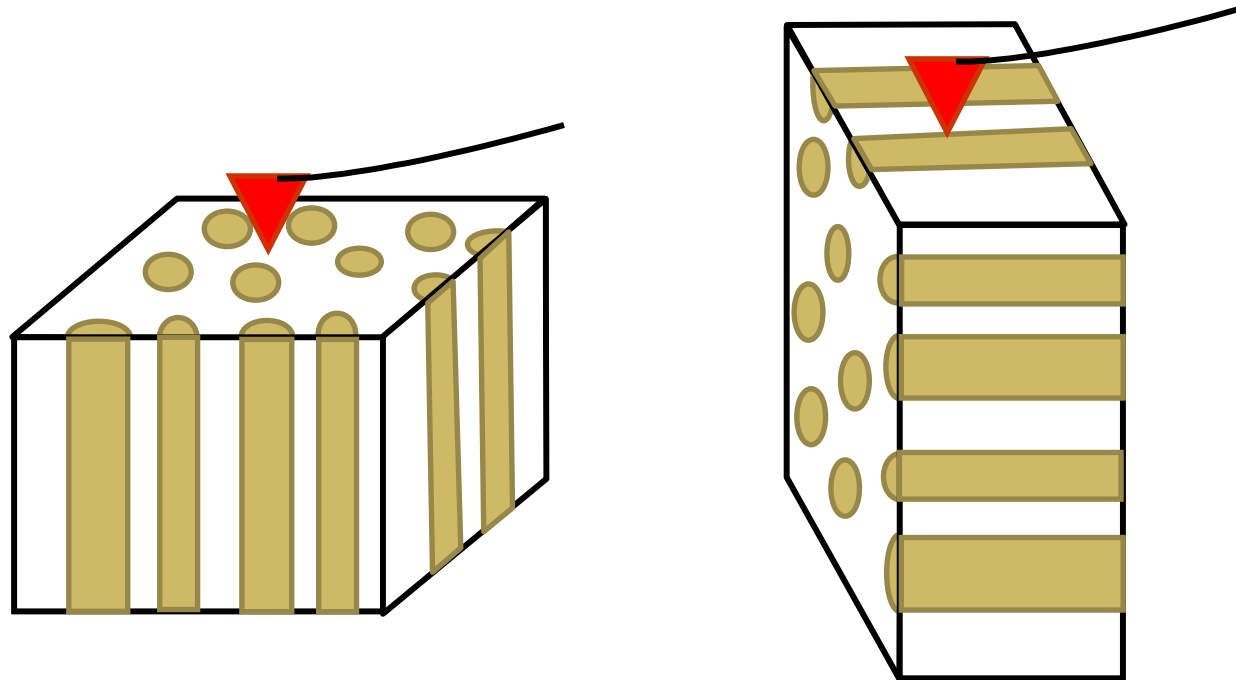
質問6: 公的資金の類似開発で、応募中の他のプログラムの基本部分は同じになりませんか。また、同プログラムにて(独)物質・材料研究機構殿は、Advanced Algorithm & Systems殿と同じ表記になっていますが同一の研究をされるのですか？

出願時に、落選が決まっていたため

質問7: 相互貫入接合型有機薄膜太陽電池の作製技術を開発する意味付けが不明確です。KPFMシミュレーターの妥当性評価のために開発するものなのか？性能改善を目指したものなのか？また、相互貫入接合型有機薄膜太陽電池の作製技術について予備検討結果はあるのか？

構造が既知の試料を用い、シミュレーションの精度向上につなげるために用いる。

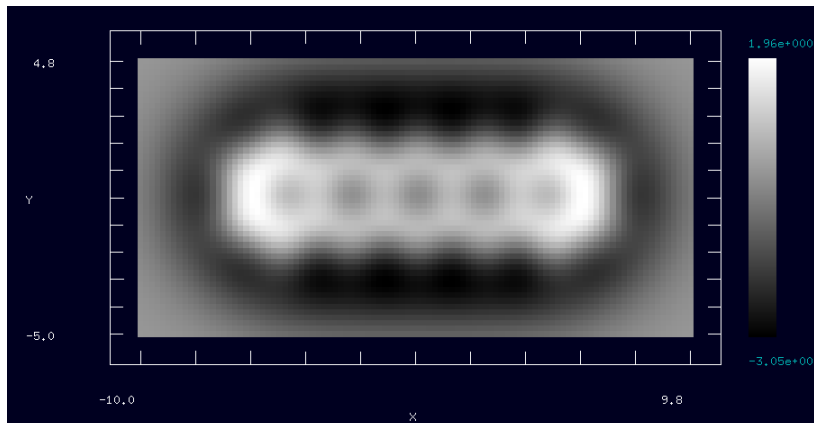
質問8: KPFMで得られる最表面の情報と内部構造の関連性を確認するための手段はあるか？



断面構造の観察を行い、表面と内部構造の関連を調べる

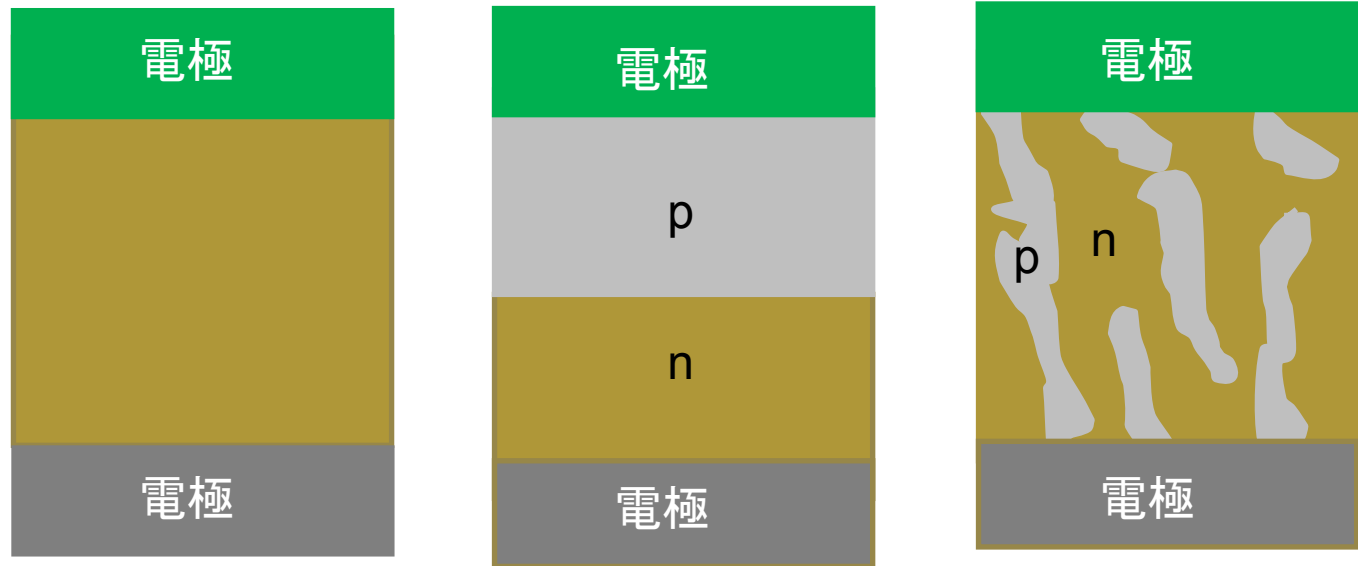
質問9: Si材料に対するシミュレーション実績はあるようだが、より複雑な有機材料に関するシミュレーションの妥当性検証の方法にアイデアはあるのか？

- Advanced Algorithm & Systemsでは、走査型プローブ顕微鏡シミュレータ開発に関連して、**有機化合物、高分子材料**等の解析（**分子動力学法、密度汎関数法**）を行った実績有り
- 本提案では、シミュレーション計算をAdvanced Algorithm & Systemsが担当し、物質・材料研究機構が有機薄膜太陽電池の試作・特性評価を担当する。**その後、実験結果とシミュレーション結果の比較検討を行う予定**である。**この作業が、シミュレーション妥当性の検証に相当する。**



CO探針によるペンタセンのAFM周波数シフト像のシミュレーション例(分子動力学法による計算例)

質問10: 有機薄膜表面をKPFMで走査したときに、素子の構造によりことなるKPFM像が得られるはずである、と書いてありますが、計画書でこの部分の確認をどの段階でとるのかははっきりしません。実現性のある研究計画として、この点は大丈夫でしょうか。



バルクヘテロ構造の模式図

様々構造を対象にKPFM技術の向上を図る。
分解能は10nm以上で、5nmを目指す。

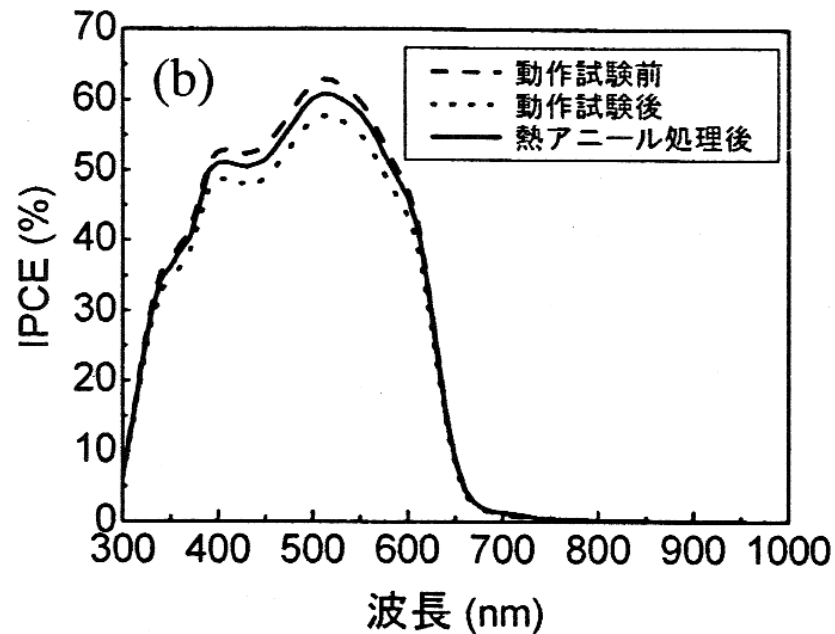
質問11: 電子供与性P3HTとPCBMを用いた相互貫入接合型有機薄膜太陽電池の作成は、具体的にはどのように作成するのでしょうか。



微細加工技術で作製するテンプレートの模式図

微細加工技術を使い、まずは100nmサイズの構造を作り、それをテンプレートとし、薄膜を積層して作製

質問12: シミュレーションが正しく実験を反映しているかどうかはどのように検証するのでしょうか。単に界面の構造だけでなく、材料によって結晶構造やグレインサイズなど様々な要因が太陽電池の性能にきてきますが、太陽電池の性能と構造の相関は、どのようにシミュレーションに反映させるのでしょうか。



分光感度特性の例