



C₃キラル二面性トルキセンをコアとする 非フラーレンアクセプターの開発



○ 中原雄飛¹・石割文崇^{1,2}・佐伯昭紀¹ (阪大院工¹, 都立大院都市環境²)

研究背景：有機薄膜太陽電池 (OPVs) におけるNFA類の開発

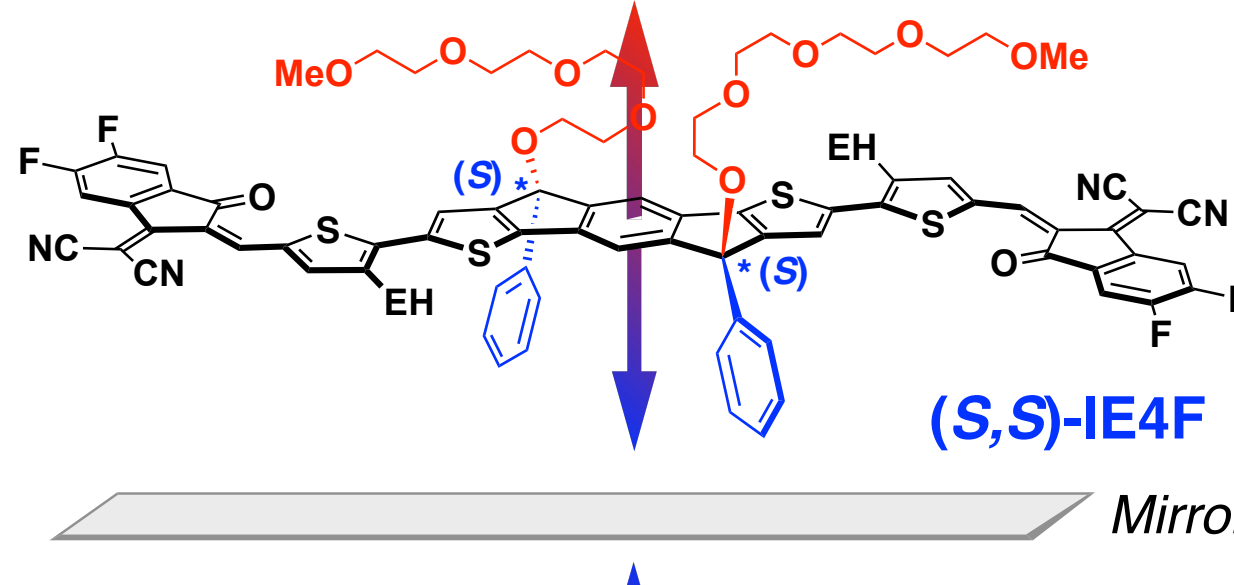
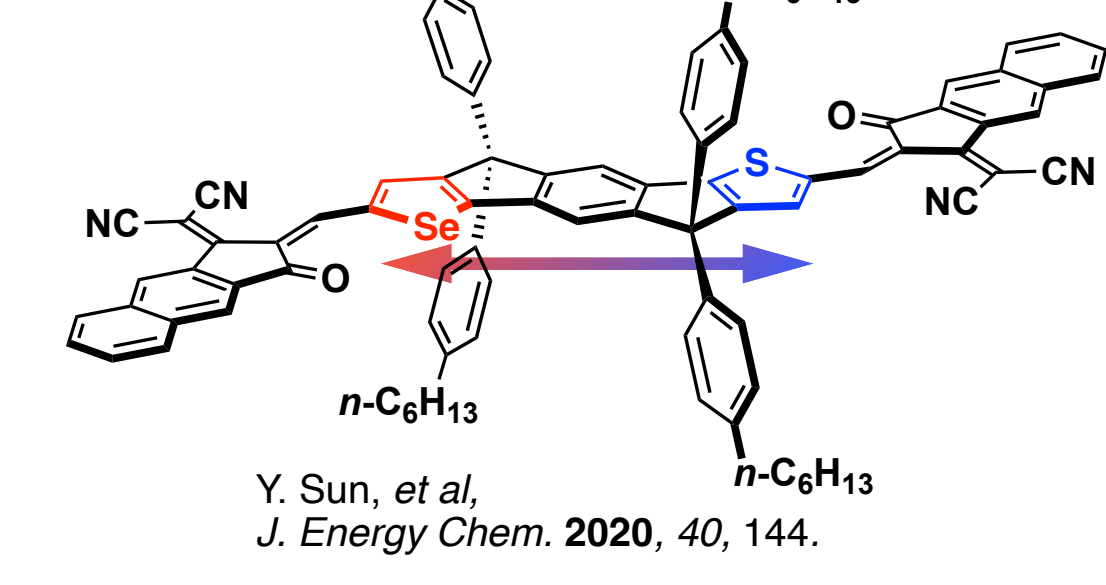
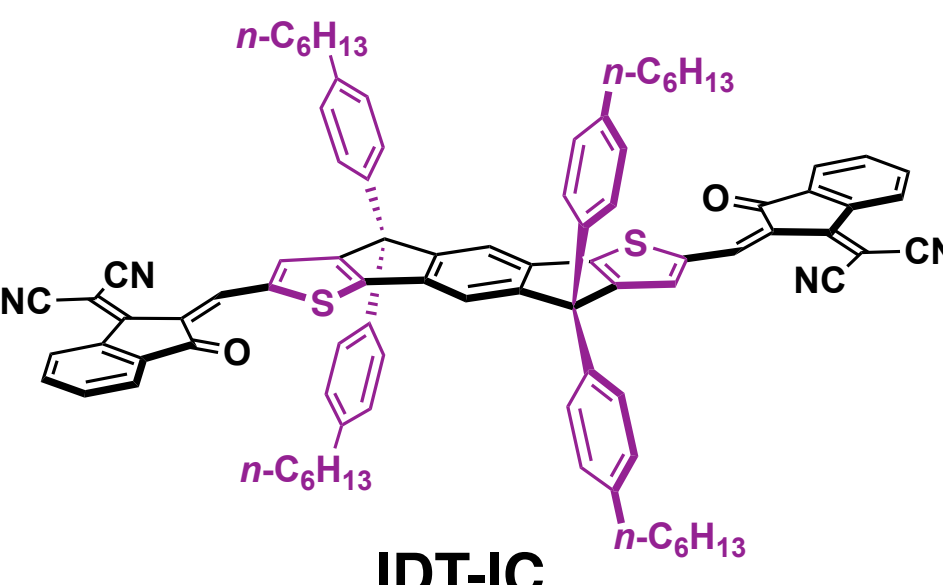
▷ 非フラーレンアクセプター (NFAs) の発展の動向：非対称NFA類の開発

非対称NFAに関する総説) Y. Zou et al., ACS Cent. Sci. 2021, 7, 1787. など

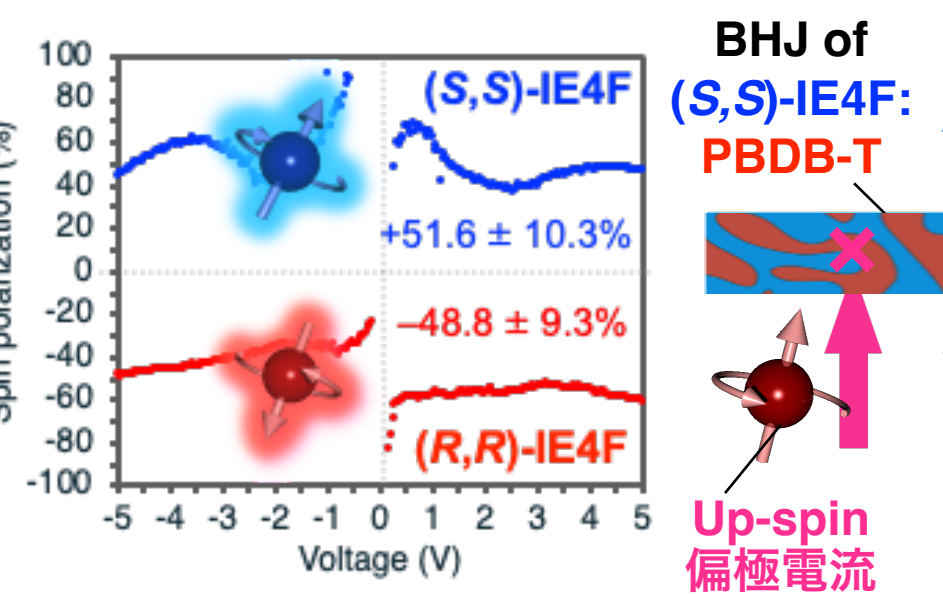
Highly Symmetrical Structure
(Originally Developed Structure)

Bilateral Asymmetry

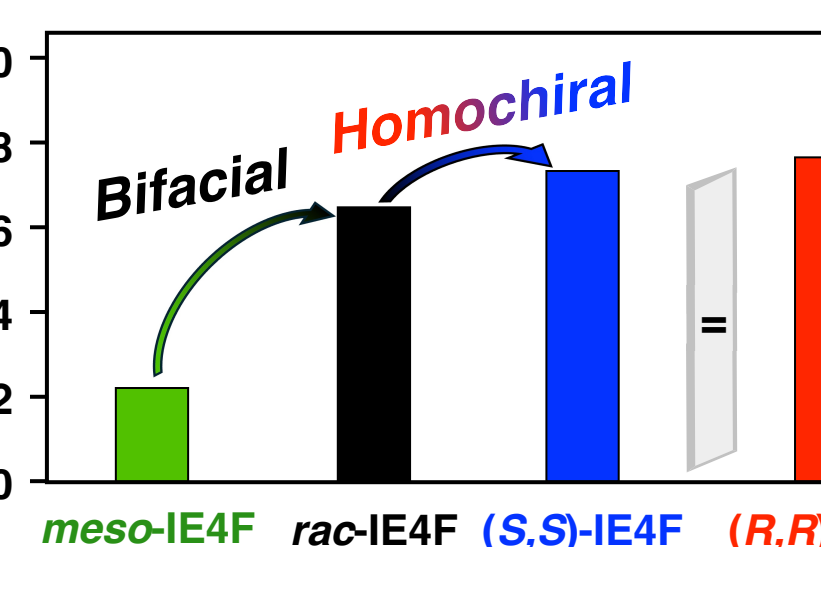
Bifacial Asymmetry + Chirality



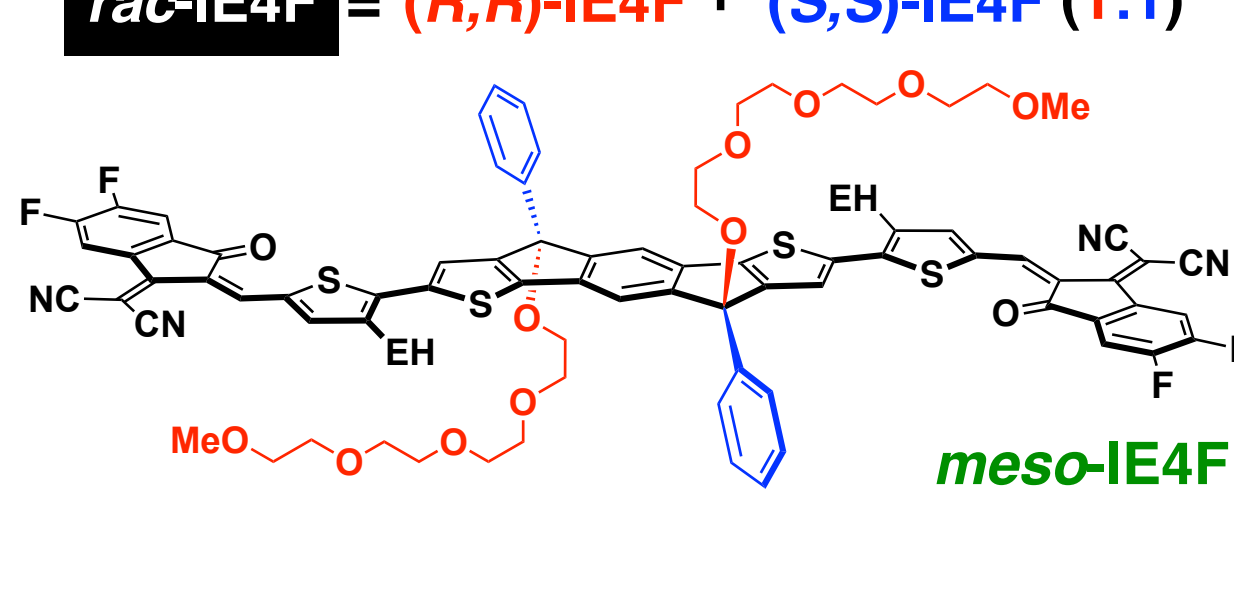
◆ BHJのChirality-Induced Spin Selectivity (CISS)



◆ OPVsのPCE (Donor: PBDB-T)

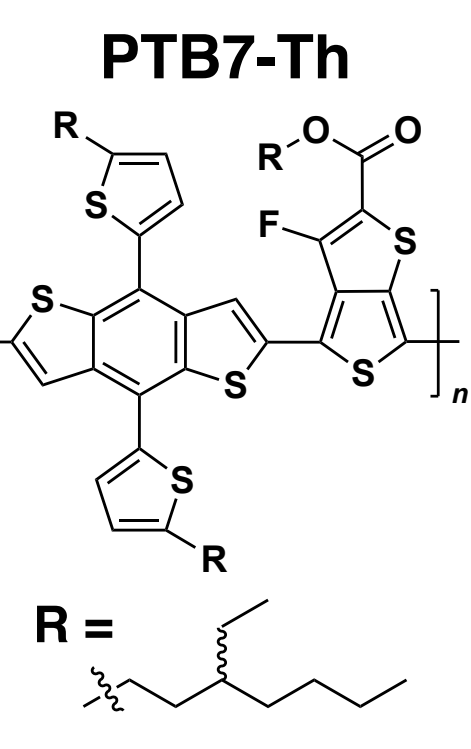
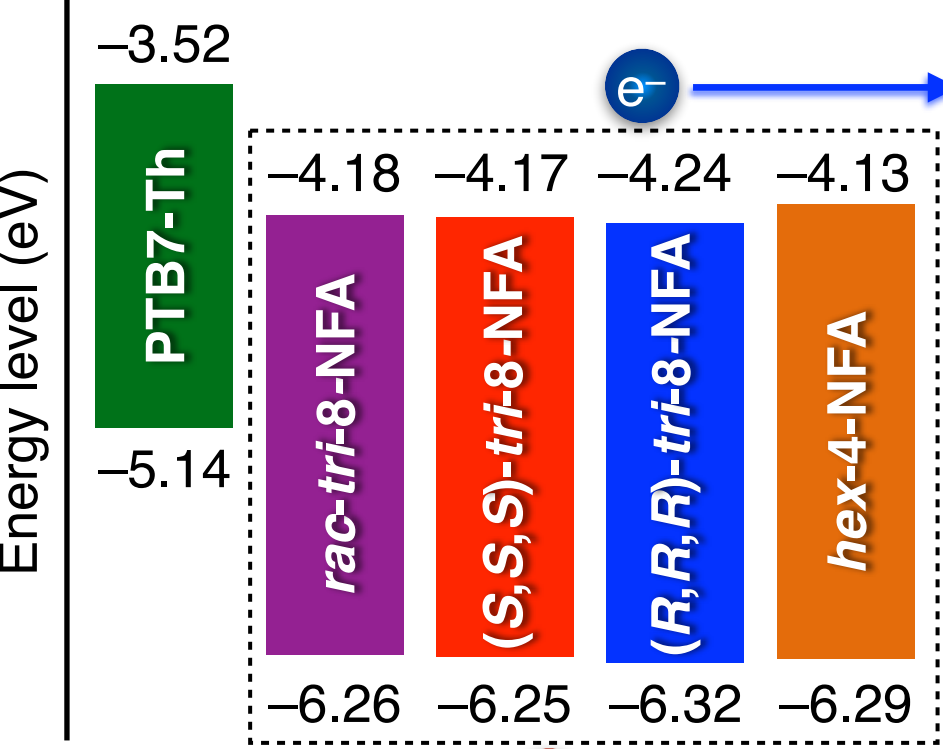


rac-IE4F = (R,R)-IE4F + (S,S)-IE4F (1:1)

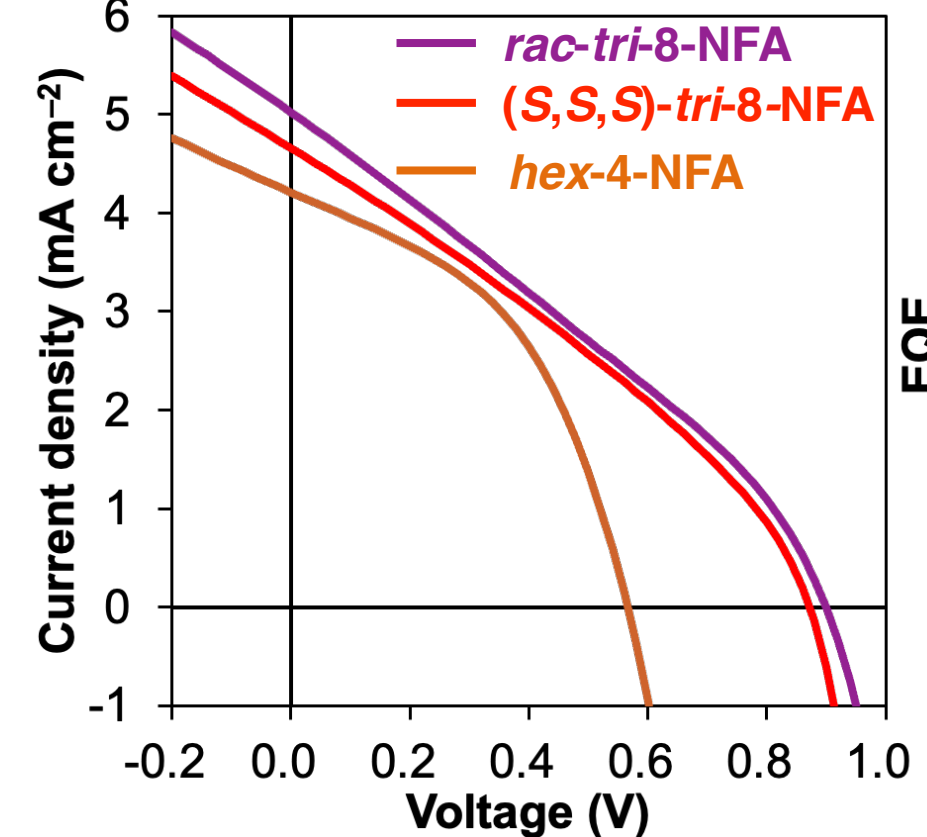


光物理特性およびデバイス性能

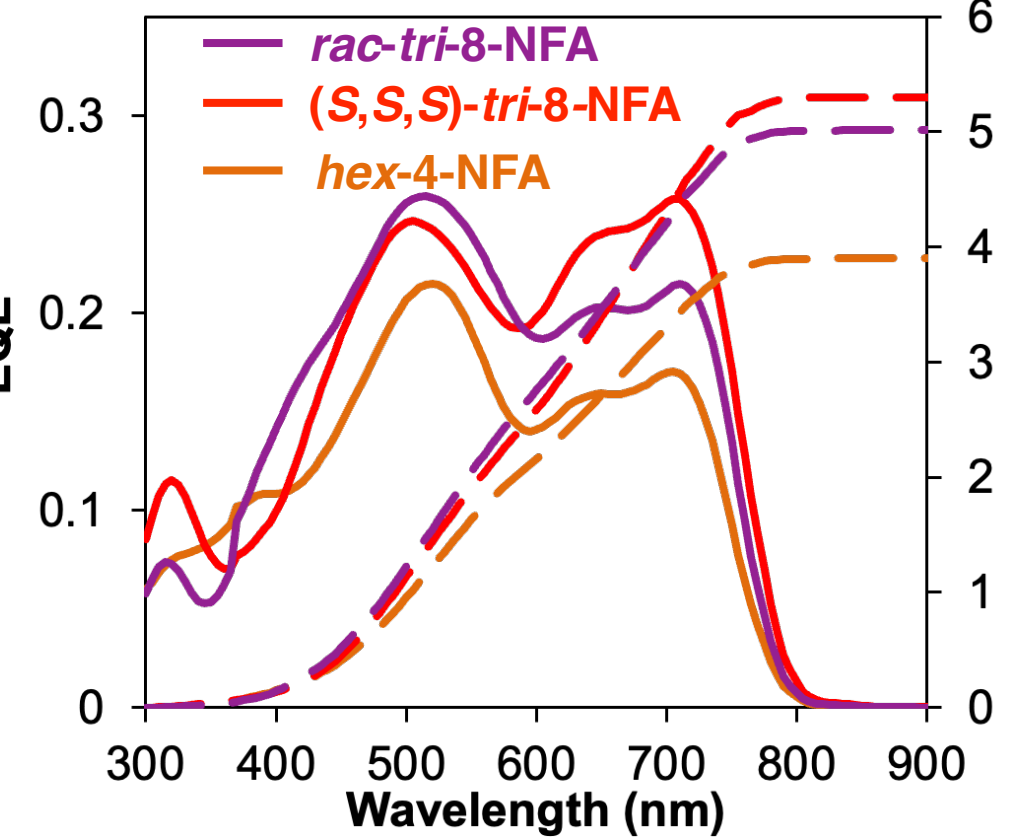
◆ エネルギー準位



◆ J-V 曲線



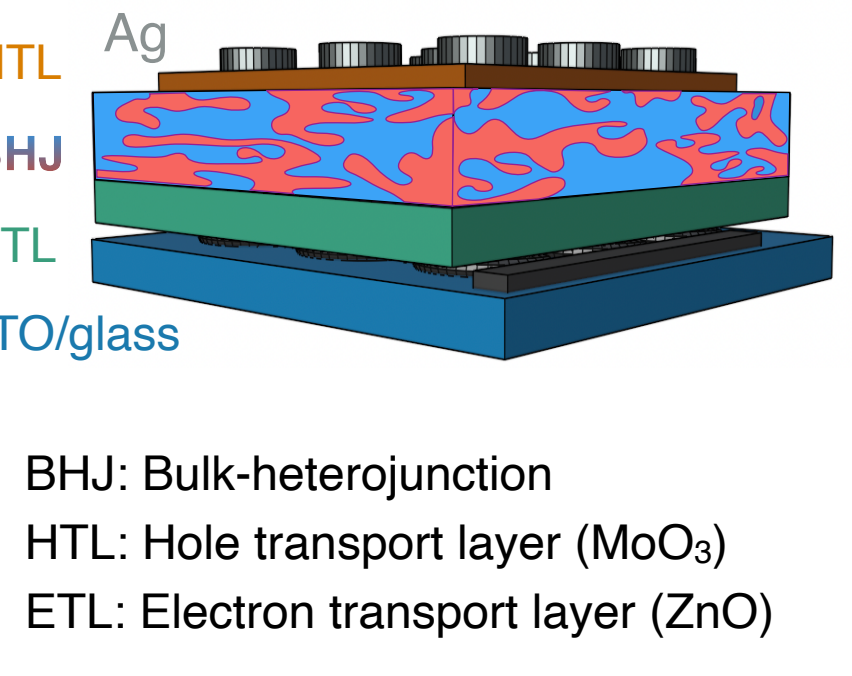
◆ 外部量子収率



◆ Table. Summary of OPV devices

Donor : Acceptor	J _{sc} (mA cm ⁻²)	V _{oc} (V)	FF	PCE (%)	Film thickness (nm)
PTB7-Th : <i>rac-tri-8-NFA</i>	5.02	0.900	0.301	1.36	82 ± 10
PTB7-Th : (<i>S,S,S</i>)- <i>tri-8-NFA</i>	4.66	0.871	0.317	1.29	93 ± 7.6
PTB7-Th : <i>hex-4-NFA</i>	4.21	0.566	0.450	1.07	107 ± 32
cf) PTB7-Th : <i>hex-4-NFA</i> ¹⁾	16.25	0.94	0.645	10.16	100

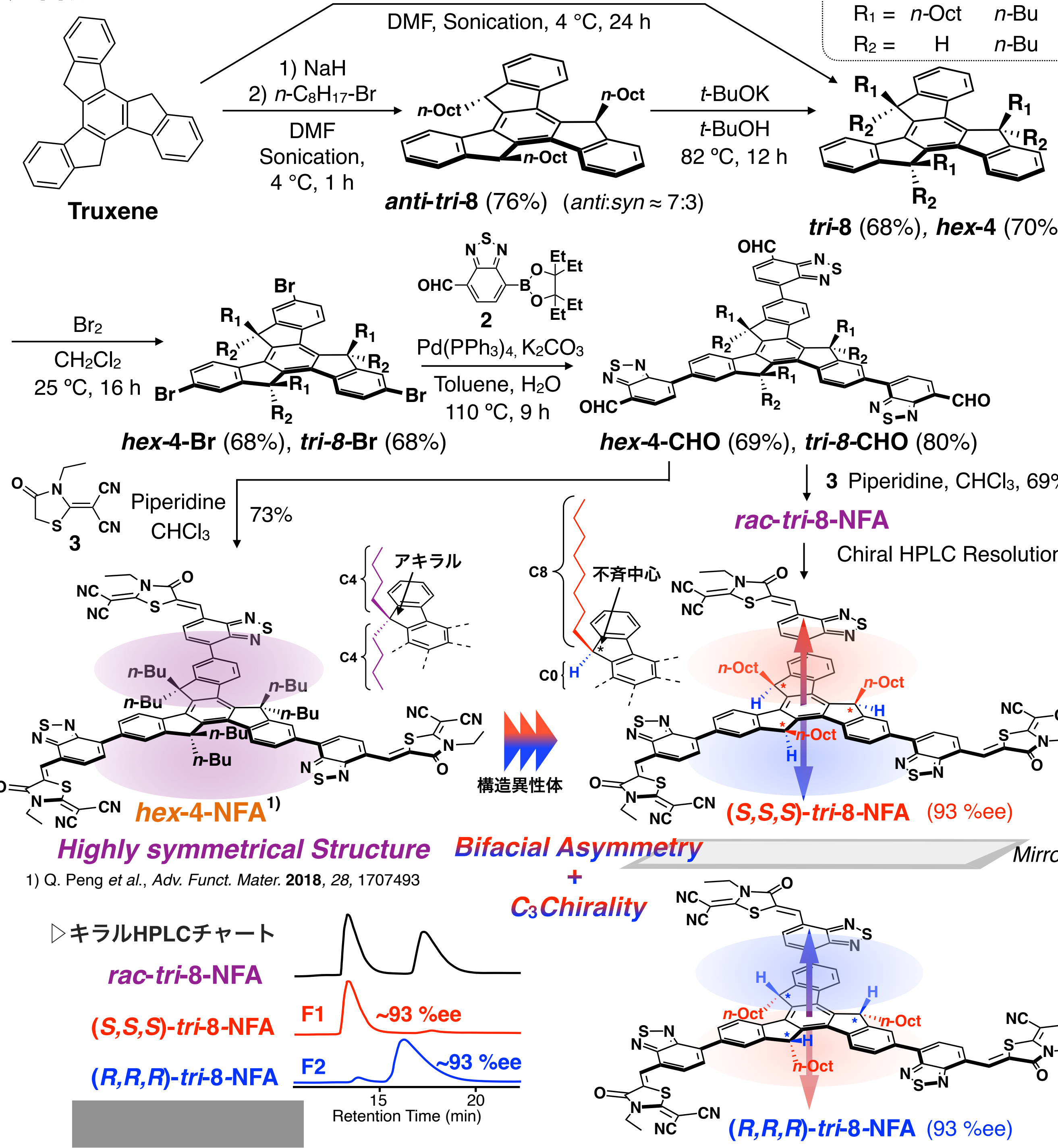
◆ Devices Structure



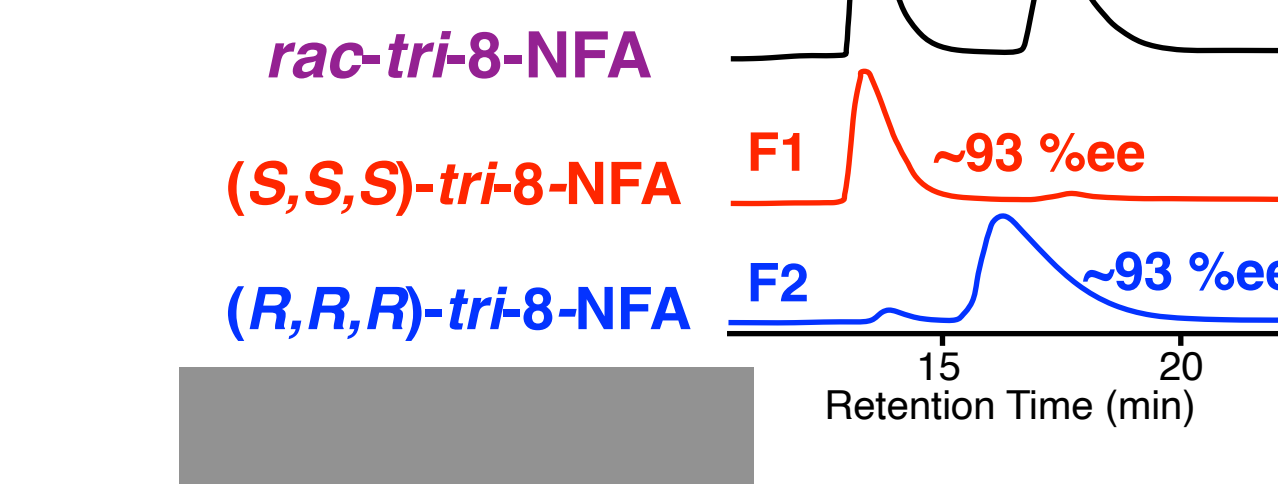
BHJ: Bulk-heterojunction
HTL: Hole transport layer (MoO₃)
ETL: Electron transport layer (ZnO)

本研究：トルキセンをコアとするC₃キラル二面性NFA

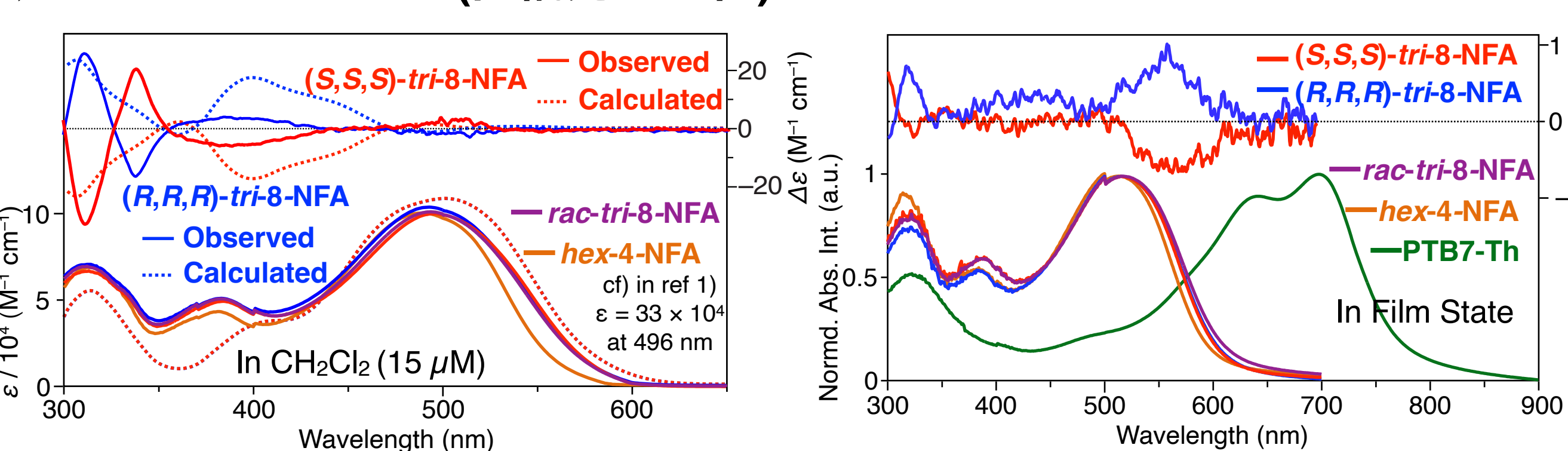
▷ 合成スキーム



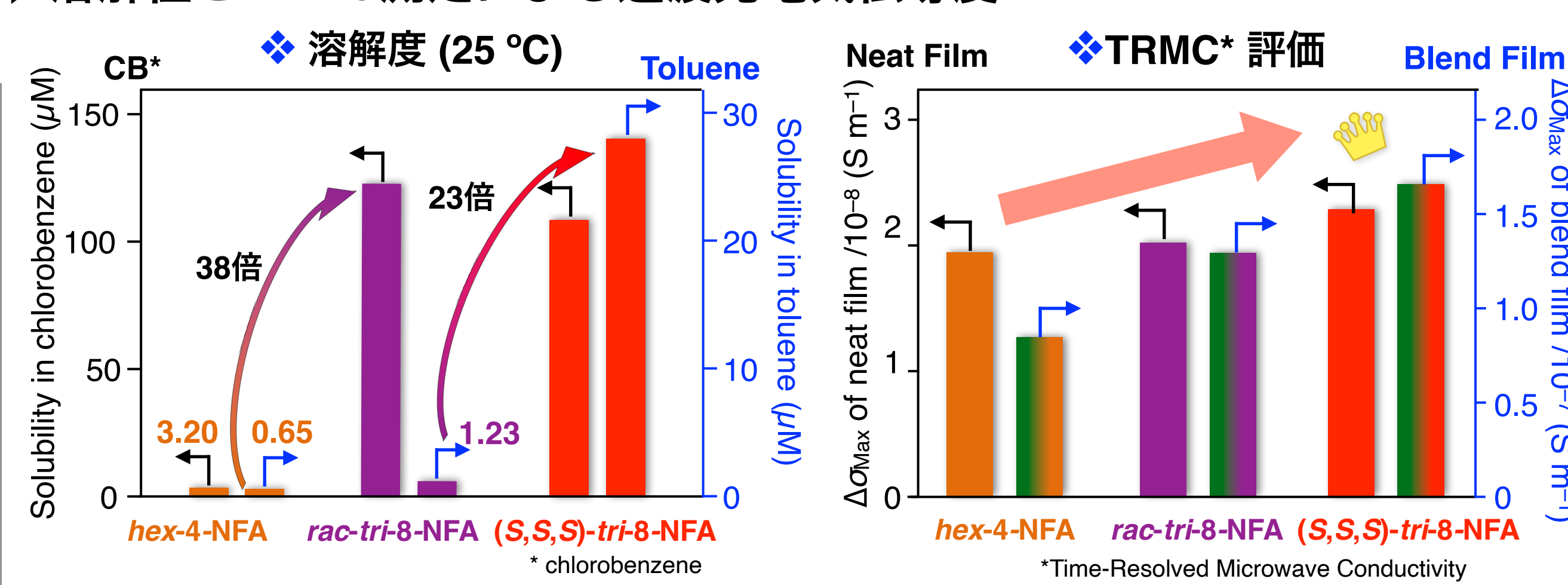
▷ キラルHPLCチャート



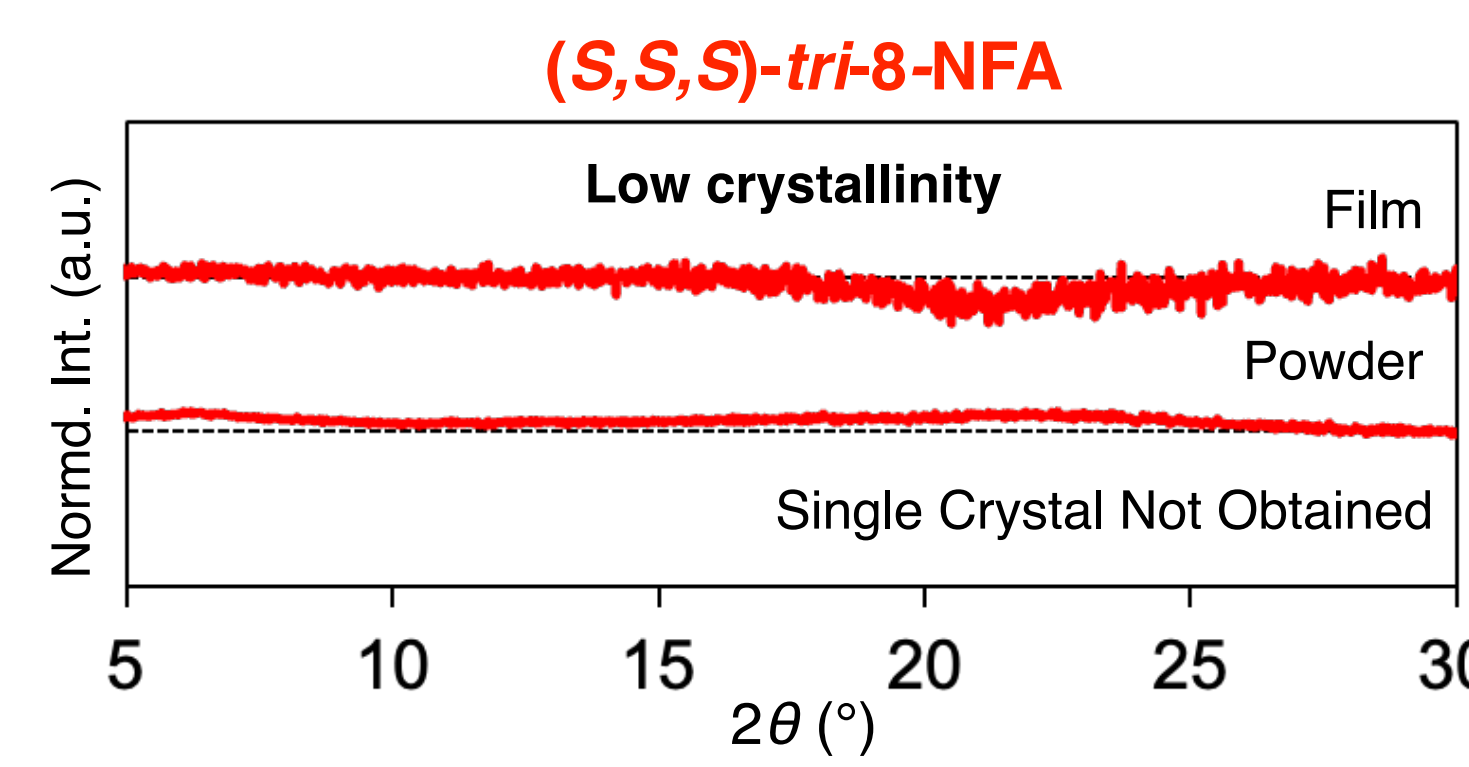
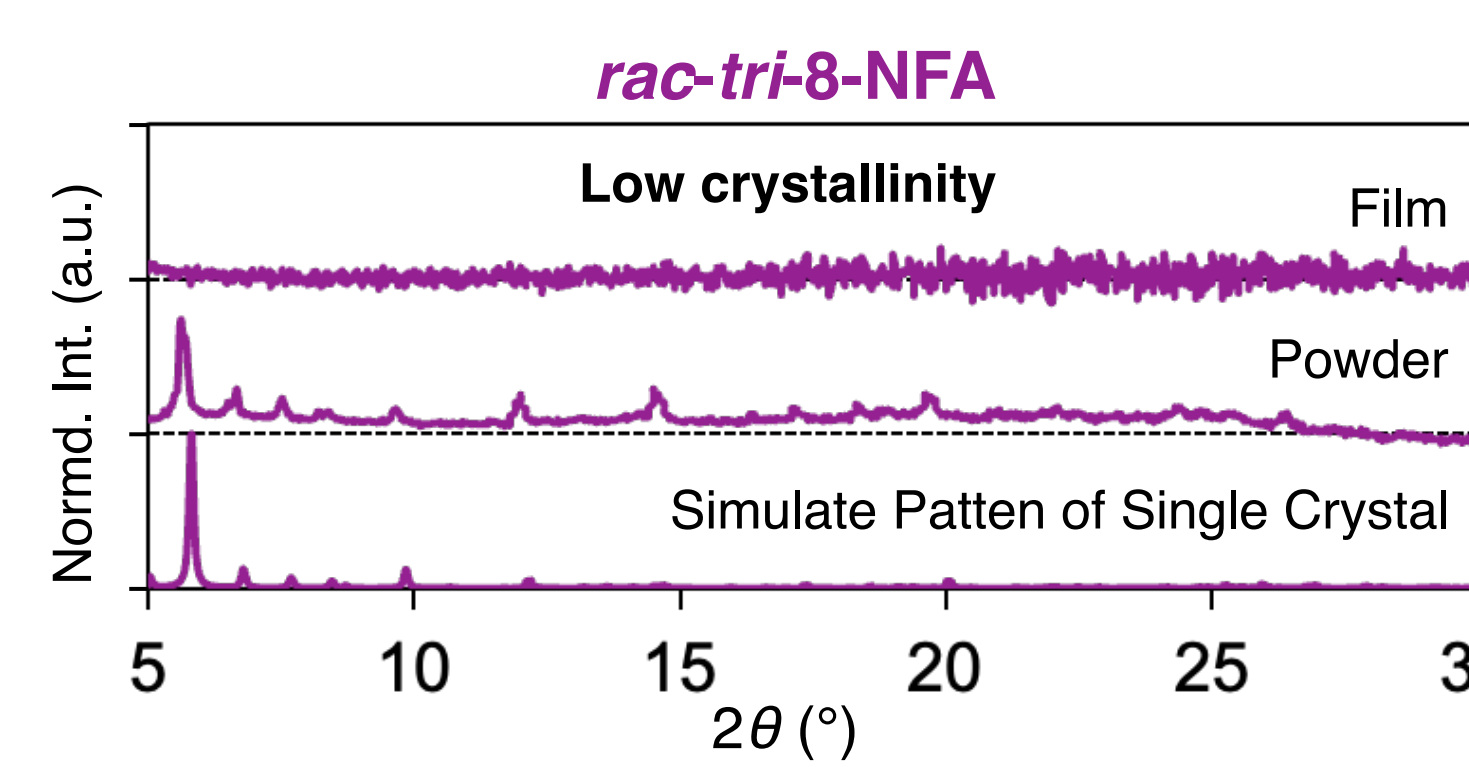
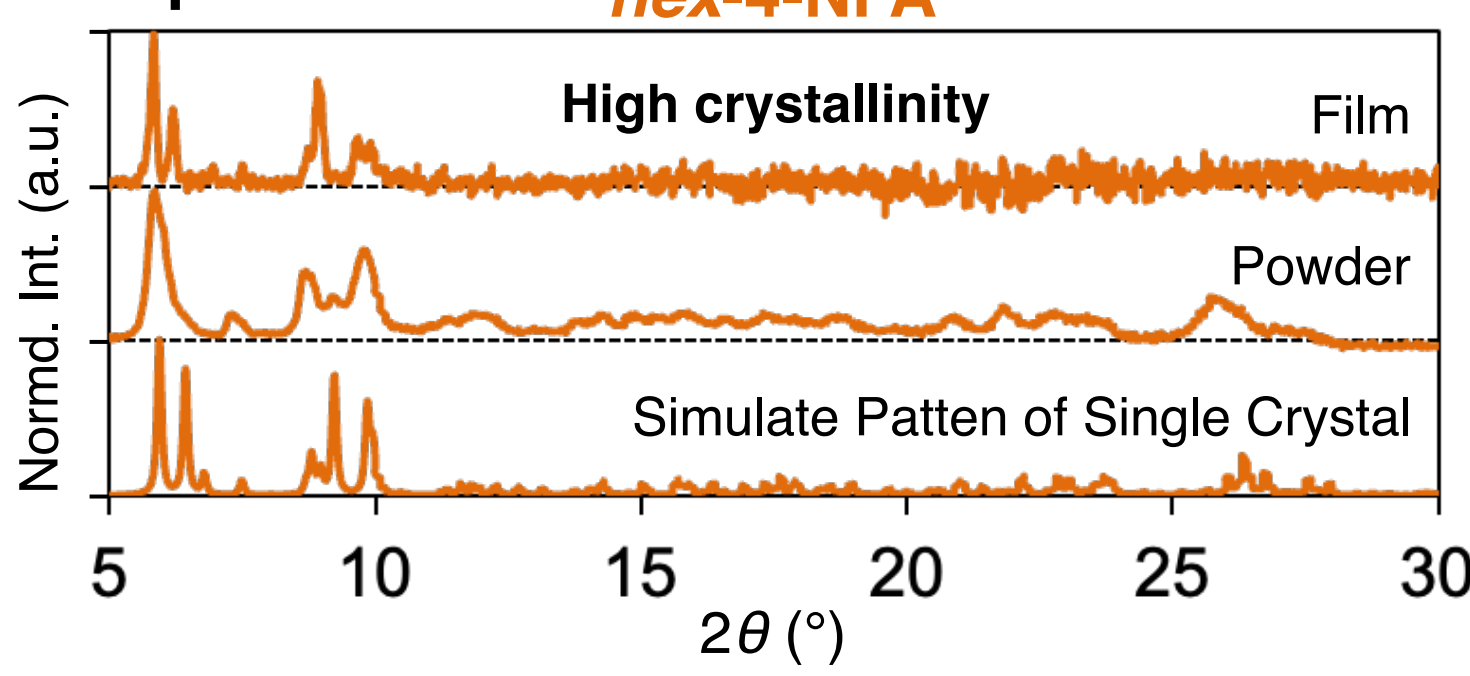
▷ UV-vis および CD (円偏光二色性) スペクトル



▷ 溶解性とTRMC測定による過渡光電気伝導度



◆ XRD patterns



まとめ：トルキセンをコアとしてC₃キラリティと二面性を併せ持つ非対称NFA (*tri-8-NFA*) の合成・光学分割に成功した。構造異性体の *hex-4-NFA* の溶解性が不十分であるのに対し、*tri-8-NFA* は非常に溶解性に優れ、PCEは *rac-tri-8-NFA* において最大の1.36%を示した。単結晶構造において、*rac-tri-8-NFA* は *hex-4-NFA* よりも近接したパッキングを示した。単膜においては、*hex-4-NFA* は結晶性を維持したが、*rac-tri-8-NFA* は結晶性を示さなかった。今後は、溶解性と結晶性を両立するアルキル鎖長を探索する。