

## 審査の結果の要旨

氏名 川嶋英佑

本論文は『Mathematical Modeling of Morphology and Performance of Organic Thin-Film Solar Cells (和文：数理モデルによる有機薄膜太陽電池のモルフォロジーと性能に関する研究)』と題し、全5章から構成され、本文は英語で書かれている。数理モデルを構築することで有機薄膜太陽電池のモルフォロジーの生成と定量的評価を行い、それと物性からデバイス特性を評価することで、有機薄膜太陽電池の最適化に対し理論的にアプローチしている。

第1章では本論文の背景とその意義を述べている。無機系を含む太陽電池一般の開発史や原理を概説し、また有機薄膜太陽電池の特徴と現状、課題について述べている。特に、有機薄膜太陽電池の性能向上に重要な因子として材料物性とモルフォロジーを挙げ、実験によるデバイス性能やモルフォロジーの評価法について述べている。既存のスキームで物性とモルフォロジーの組み合わせについて網羅的に検証することは困難であるとし、理論的アプローチの必要性を述べ、本論文の動機付けを行っている。

第2章では本論文で用いられている理論・アルゴリズムについて述べている。有機薄膜太陽電池を構成する高分子をモデル化するためにソフトマター理論について述べ、また静電気学により光電変換層内の電荷が感じるポテンシャルを求めている。モルフォロジーを特徴づけるために編集距離とグラフアルゴリズムを導入し、そして最後に乱択アルゴリズムや Monte Carlo 法について解説している。

第3章では数理モデルによるモルフォロジーの生成と、その数値的評価法について述べている。管モデルを採用し、高分子の熱運動（レプテーション）を Metropolis Monte Carlo 法によりシミュレートすることで、アニーリング温度の異なるモルフォロジーを生成し、実験における温度依存性を再現し、アニーリングによってモルフォロジーが制御可能であることを理論的に示している。また、グラフアルゴリズムによってモルフォロジーを個別のドメインに分割し、体積や電荷分離の Helmholtz エネルギーなどの量で特徴づけを行っている。Helmholtz エネルギーがバリアを持ち、その高さがドメインやモルフォロジーに依存していることを示し、電荷分離効率との関連性を示唆している。

第4章では dynamic Monte Carlo 法による有機薄膜太陽電池のデバイス特性評価について述べている。第3章で生成したモルフォロジーについて明暗電流のシミュレーションを行い、モルフォロジー依存性を示している。それらをアニーリング温度と関連付け、実験における温度依存性を再現し、特に変換効率を最適化する温度が存在することを理論的に示している。また、過渡吸収分光法をシミュレートし、励起子や電荷の時間的・空間的ダイナミクスを解析し、これについても実験における温度依存性を再現している。そして、探針をモデル化することで導電性原子間力顕微鏡 (C-AFM) をシミュレートし、実験と矛盾しない結果を得ている。以上からシミュレーションの妥当性と有用性を述べ、シミュレーションの結果を蓄積することで、実験データからモルフォロジーの3次元構造を再現することや、設計指針を示すことが可能だとしている。さらに、ドメイン内の各界面における電荷分離効率をシミュレーションで評価し、第3章における Helmholtz エネルギーとの相関を検証し、バリアが低いほど効率が低いことを明らかにしている。

第5章は総括であり、本論文の結果を総括し、本論文における数理モデルの有用性と有機薄膜太陽電池の性能向上についての更なる展望を述べている。

以上のように、本論文は有機薄膜太陽電池を数理モデル化することで、モルフォロジーと材料物性がデバイス特性に及ぼす影響について検証している。実装したシミュレータ群は複数の実験手法による結果を再現し、数理モデルによるアプローチの有用性を示している。一連の研究成果は、太陽光発電による持続可能性の実現という、社会的要求の高い研究分野に重要な知見を与え、進展を促すものであるとともに、化学システム工学の発展に大いに貢献すると認定される。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。