

硬 X 線光電子分光法と低エネルギー逆光電子分光法による P3HT と PCBM バルクヘテロ接合の界面電子構造

Hard X-ray photoemission and low energy Inverse Photoemission Studies of the interface energy level alignment of the P3HT/PCBM bulk hetero junction

京大化研¹, JASRI², 京大院工³, JST さきがけ⁴

○吉田 弘幸¹, 池永英司², 小川 薫³, 大北英生^{3,4}, 伊藤紳三郎³

Kyoto Univ.^{1,3}, JASRI², JST PRESTO⁴

°Hiroyuki Yoshida¹, Eiji Ikenaga², Kaoru Ogawa³, Hideo Ohkita^{3,4}, Shinzaburo Ito³

E-mail: yoshida@e.kuicr.kyoto-u.ac.jp

【序】有機薄膜太陽電池の電荷分離機構を理解し、電荷分離効率を高めるには、ドナー・アクセプター界面での価電子準位 (HOMO 準位) と空準位 (LUMO 準位) の電子準位が重要である。有機薄膜太陽では、短絡電流を高めるためにドナーとアクセプターを混合し界面の面積を大きくしたバルクヘテロ接合が広く用いられる。このような界面の電子構造には、従来から広く用いられている膜厚を増やしながら紫外光電子分光を測定するという方法が適用できない。

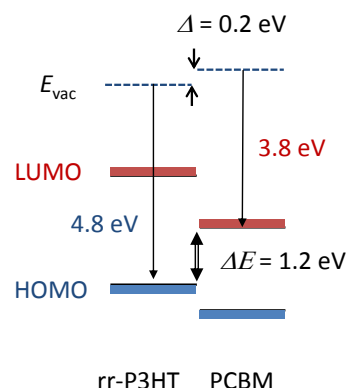
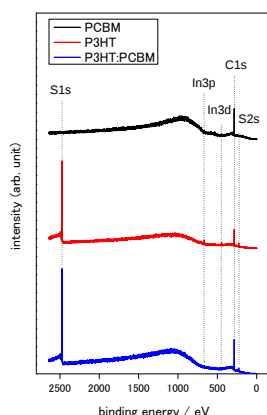
本研究では、10 nm 以上の検出深さをもつ硬 X 線光電子分光法(HAXPES)に注目し、バルクヘテロ接合界面に発生した静電ポテンシャル(仕事関数変化)を測定することを試みた。また、従来困難であった空準位測定については、最近われわれが開発した低エネルギー逆光電子分光法(LEIPS)[1]を適用した。これらの結果を合わせて、バルクヘテロ界面の電子構造を議論する。

【実験】ドナーとアクセプターには、それぞれ有機薄膜太陽電池で最も典型的な poly(3-hexylthiophene-2,5-diyl) (RR-P3HT) と [6,6]-phenyl-C₆₁-butyric acid methyl ester (PCBM) を用い、スピんキャスト法により膜厚 50 nm の薄膜を作製した。基板には、ITO ガラスを用いた。イオン化エネルギーは、光電子収量法(PYS)により測定した。電子親和力は、波長 285 nm, 280 nm, 254 nm で LEIPS 測定を行い決定した。一方、HAXPES は、SPring-8 BL47XU にて、X 線エネルギー 8 keV で測定した。

【結果・考察】

図 1 に、HXPES スペクトルを示す。P3HT と PCBM の C1s のピークと、P3HT に由来する S1s とが観測された。PCBM の O1s は、HAXPES では断面積が小さいため観測されなかった。そこで、角度分解測定を行い、P3HT と PCBM それぞれの単成分の薄膜のスペクトルを用いて、多変量解析 Classical Least Squares 法により P3HT:PCBM 混合膜の C1s のピーク分離を行った。

このようにして求めた C1s 準位は、単成分の薄膜に比べて、PCBM ではエネルギーシフトがなく、一方、P3HT では 0.2 eV 準位が高い(束縛エネルギーが低い)ことがわかった。この結果は、PCBM が ITO 基板に接していること、P3HT と PCBM の間で 0.2 eV の仕事関数変化があることを示している。これと、PYS、LEIPS の結果と合わせてまとめた P3HT:PCBM バルクヘテロ接合界面の準位が図 2 である。発表では、P3HT のレジオレギュラリティーや熱処理の効果についても議論する。



[1] H. Yoshida, *Chem. Phys. Lett.* **539-540** (2012) 180.

図 1. PCBM、P3HT、P3HT:PCBM 混合膜の HAXPES スペクトル。

図 2: 本研究で求めた P3HT:PCBM バルクヘテロ接合の界面エネルギー準位。