

## ナフトビスチアジアゾール系ポリマーの構造-物性-デバイス特性相関

## Structure-Property-Device Performance Relationships in Naphthobisthiadiazole Copolymers

広大院工<sup>1</sup>, JASRI<sup>2</sup>, JST さきがけ<sup>3</sup>, 理研<sup>4</sup>, ○加々良剛志<sup>1</sup>, 島脇雅史<sup>1</sup>, 小金澤智之<sup>2</sup>, 尾坂格<sup>1,3,4</sup>, 瀧宮和男<sup>1,4</sup>

Hiroshima Univ.<sup>1</sup>, JASRI<sup>2</sup>, JST PRESTO<sup>3</sup>, RIKEN<sup>4</sup>, ○Takeshi Kakara<sup>1</sup>, Masafumi Shimawaki<sup>1</sup>, Tomoyuki Koganezawa<sup>2</sup>, Itaru Osaka<sup>1,3,4</sup>, Kazuo Takimiya<sup>1,4</sup>

E-mail: [itaru.osaka@riken.jp](mailto:itaru.osaka@riken.jp), [takimiya@riken.jp](mailto:takimiya@riken.jp)

【緒言】有機薄膜太陽電池(OPV)の変換効率向上に向けて、新規半導体ポリマーの開発研究が盛んに行われている。高性能ポリマーの開発には、ポリマーの結晶性、および配向性を制御することが重要である。我々は以前に、ナフトビスチアジアゾールを有するポリマー (PNTz4T, Figure 1) が高い結晶性を持つことで、OPV の変換効率が 6.3%と、高い値を示すことを報告した<sup>[1]</sup>。今回、その誘導体としてπスペーサーにチオフェン、ターチオフェン、チエノチオフェンを有するポリマー (PNTz3T, PNTz5T, PNTzTT, Figure 1) を新たに合成し、これらの電子物性、薄膜構造と OPV 特性を調査した。

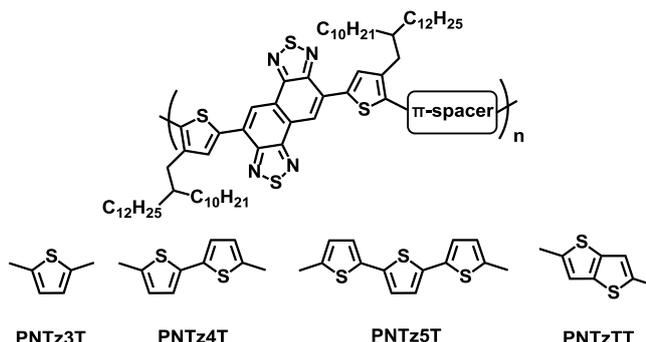


Figure 1. Chemical structures of PNTzXT

【結果】合成したポリマーは、いずれも 25,000-89,000g/mol と高い分子量を示した。溶液の UV-vis 吸収スペクトルは PNTz3T, -4T, -5T はいずれも吸収端が 795nm と、大きな違いは見られなかったが、PNTzTT は 830nm と、それに比べて約 30nm 長波長シフトしていた。これは、剛直な縮合環であるチエノチオフェンを持つことに起因すると考えられる。また、イオン化ポテンシャルはいずれのポリマーも 5.15 eV と同様の値であった。薄膜状態でのポリマー構造を調査したところ、ポリマー単膜では PNTz3T, -TT は face-on 配向を形成するが、一方で PNTz4T, -5T は edge-on 配向を形成することがわかった。PC<sub>61</sub>BM との混合膜では興味深いことに、PNTz4T は edge-on 配向から face-on 配向へ変化するものの、PNTz5T は edge-on 配向を保持したままであった。ポリマー/PC<sub>61</sub>BM の BHJ 素子を作製し、OPV 特性を評価したところ、2-6%とポリマーによって変換効率に著しい差が見られた。当日は、OPV 特性とポリマーの結晶性や配向性との相関についても報告する。

【結果】合成したポリマーは、いずれも 25,000-89,000g/mol と高い分子量を示した。溶液の UV-vis 吸収スペクトルは PNTz3T, -4T, -5T はいずれも吸収端が 795nm と、大きな違いは見られなかったが、PNTzTT は 830nm と、それに比べて約 30nm 長波長シフトしていた。これは、剛直な縮合環であるチエノチオフェンを持つことに起因すると考えられる。また、イオン化ポテンシャルはいずれのポリマーも 5.15 eV と同様の値であった。薄膜状態でのポリマー構造を調査したところ、ポリマー単膜では PNTz3T, -TT は face-on 配向を形成するが、一方で PNTz4T, -5T は edge-on 配向を形成することがわかった。PC<sub>61</sub>BM との混合膜では興味深いことに、PNTz4T は edge-on 配向から face-on 配向へ変化するもの、PNTz5T は edge-on 配向を保持したままであった。ポリマー/PC<sub>61</sub>BM の BHJ 素子を作製し、OPV 特性を評価したところ、2-6%とポリマーによって変換効率に著しい差が見られた。当日は、OPV 特性とポリマーの結晶性や配向性との相関についても報告する。

【結果】合成したポリマーは、いずれも 25,000-89,000g/mol と高い分子量を示した。溶液の UV-vis 吸収スペクトルは PNTz3T, -4T, -5T はいずれも吸収端が 795nm と、大きな違いは見られなかったが、PNTzTT は 830nm と、それに比べて約 30nm 長波長シフトしていた。これは、剛直な縮合環であるチエノチオフェンを持つことに起因すると考えられる。また、イオン化ポテンシャルはいずれのポリマーも 5.15 eV と同様の値であった。薄膜状態でのポリマー構造を調査したところ、ポリマー単膜では PNTz3T, -TT は face-on 配向を形成するが、一方で PNTz4T, -5T は edge-on 配向を形成することがわかった。PC<sub>61</sub>BM との混合膜では興味深いことに、PNTz4T は edge-on 配向から face-on 配向へ変化するもの、PNTz5T は edge-on 配向を保持したままであった。ポリマー/PC<sub>61</sub>BM の BHJ 素子を作製し、OPV 特性を評価したところ、2-6%とポリマーによって変換効率に著しい差が見られた。当日は、OPV 特性とポリマーの結晶性や配向性との相関についても報告する。

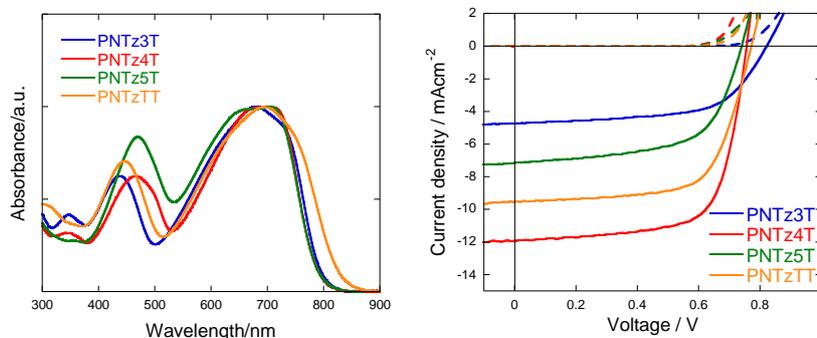


Figure 2. UV-vis absorption spectra of the polymers (left), and J-V characteristics of the polymer-based cells (right)

[1] I. Osaka, M. Shimawaki, T. Koganezawa, K. Takimiya, *J. Am. Chem. Soc.*, **2012**, 134, 3498-3507