

熱処理による混合膜中の P3HT の配向変化

Changes of P3HT Orientation in Thin Films of P3HT:PCBM by Annealing

産総研ユビキタス¹, 龍谷大理工²○大迫 将也^{1,2}, 溝黒 登志子¹, ヘック クライレ¹, 中沖 隆彦², 谷垣 宣孝¹AIST¹, Ryukoku Univ.², °Masaya Ohsako^{1,2}, Toshiko Mizokuro¹, Claire Heck¹,Takahiko Nakaoki², Nobutaka Tanigaki¹

E-mail: no.tanigaki@aist.go.jp

【諸言】

電子供与体と電子受容体を混合したバルクヘテロ接合太陽電池がスピコート法を用いて作製できる。代表的な材料としてポリ(3-ヘキシルチオフェン)(P3HT)と 6,6-フェニル C₆₁ 酪酸メチルエステル(PCBM)が用いられる。この混合膜は熱処理を行うことで効率が向上することが報告され、高効率化の手段が研究されている。今回、この太陽電池について熱処理の効果を確認し、分子配向の点から高効率化の要因を検討する。

【実験】

P3HT:PCBM(1:1)を混合した溶液を作製し、スピコート法を用いて PEDOT:PSS を塗布したガラス基板上に製膜した。熱処理は、真空下、100°C、10 min 加熱した。

混合膜に対して通常の X 線回折を行い、基板に対して垂直方向の繰り返し構造を確認した。さらに詳しく解析するために、エネルギー分散型全反射 X 線回折(ED-TRXD)測定をした。回折角を固定し、波長を変えることで回折を測定した。基板面に対して任意の角度をなす回折面を測定できる。そして基板面と散乱ベクトルのなす角(ξ)を変え、微結晶の配向分布を調べた。^[1]

【結果・考察】

有機薄膜太陽電池を作製し、熱処理の効果を調べたところ変換効率の向上が見られた。

混合膜の通常の X 線回折では P3HT の(100)反射が観測できたため、a-軸配向(主鎖は基板に平行で側鎖は基板に垂直な方向)であることが確認できた[Fig1]。^[2]また、(100)反射についてシェラーの式を用いて結晶サイズを求めたところ、熱処理後に微結晶が 18.4 nm から 24 nm へと大きくなったことを確認した。

さらに ED-TRXD で(100)反射の角度(ξ)依存を評価した。Fig2 は ξ を変えて求めた各角度ごとの(100)反射の積分強度をプロットしたグラフである。 ξ が 90° (基板に対して垂直方向の繰り返しを持つ構造)では積分強度が強く出て(100)反射が検出できているが、90° から 0° の間では積分強度が減少し、 ξ が 0° (面内の周期構造)ではほとんど回折が検出できない。また、熱処理後に配向分布の半値幅が 60° から 40° と狭くなっているため、熱処理をすることで a-軸配向自体は変わらないが、a-軸配向の微結晶が多くなっていることが確認できた。a-軸配向は太陽電池の性能には不利な方向である。この結果より配向変化によって性能が向上した訳でないことが分かった。比較対象として P3HT 単独膜でも同様に配向分布を測定したところ a-軸配向だった。さらに熱処理前後の配向分布の半値幅が 60° と変化が見られなかった。

【参考文献】

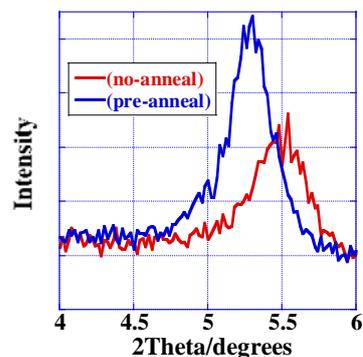
[1]N. Tanigaki, et. al., *J. Polym. Sci.: Part B: Polym. Phys. Ed.*, **39**, 432(2001).[2]Tobias Erb, et. al., *Adv. Funct. Mater.*, **15**, 1193(2005).

Fig. 1. Diffractogram of P3HT:PCBM composite films deposited on PEDOT:PSS/glass

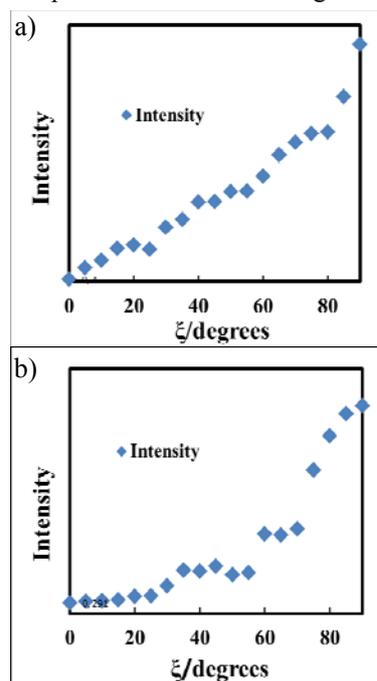


Fig. 2. Changes of P3HT (100) reflection intensity with ξ variation. before (a) and after (b) annealing.