

[6,6]-Phenyl-C61-butyric Acid Methyl Ester (PCBM)の結晶化に伴う エネルギー準位の変化と有機薄膜太陽電池への影響

Crystallization-induced Energy Level Change of [6,6]-Phenyl-C61-butyric Acid Methyl Ester (PCBM) Film and Its Effects on Organic Solar Cells

東大院工¹, 理研 CEMS², JST さきがけ³, JASRI⁴, 京大化研⁵ 鐘 宇飛^{1,2}, 伊澤 誠一郎^{1,2},
橋本 和仁¹, °但馬 敬介^{2,3}, 小金澤 智之⁴, 吉田 弘幸^{3,5}

Grad. Sch. of Eng., Univ. of Tokyo¹, RIKEN CEMS², JST-PRESTO³, JASRI⁴, Institute for Chem.

Res., Kyoto Univ.⁵ Yufei Zhong^{1,2}, Seiichiro Izawa^{1,2}, Kazuhito Hashimoto¹, °Keisuke Tajima^{2,3},

Tomoyuki Koganezawa⁴, Hiroyuki Yoshida^{3,5}

E-mail: keisuke.tajima@riken.jp

有機半導体高分子をドナーとする高性能有機薄膜太陽電池において、[6,6]-phenyl-C61-butyric acid methyl ester (PCBM)は最も広く用いられている電子アクセプターである。一般的に用いられる混合バルクヘテロ接合においては、有機材料の結晶化は混合状態や電荷の分離、再結合および輸送の効率に大きな影響を与えることが知られている。特にドナーとなる半導体高分子の結晶化による変化は研究初期から詳細に調べられてきた。一方で最近になって、PCBMの薄膜中の凝集(結晶)状態が薄膜太陽電池の高性能化に重要であるという報告がなされてきている。特に電荷分離の過渡状態における電子の非局在化との関連が議論されている。しかしPCBMの結晶化に伴う電子状態の変化は明らかになっていない。また、有機半導体薄膜のエネルギー準位は、分極エネルギーや分子間相互作用、分子配向、表面双極子モーメント、ドーピング状態など様々な要因によって影響を受けるが、要因を区別することは一般に容易ではない。

本研究では、PCBM 薄膜の熱処理によるエネルギー準位の変化を紫外光電子分光法 (UPS)、X 線光電子分光法 (XPS) および低エネルギー逆光電子分光法 (LEIPS) によって検討した。斜入射 X 線回折 (GIXRD) の結果から、薄膜を 150 °C で熱処理することで、PCBM は薄膜中で配向して結晶化することが分かった。同時にイオン化ポテンシャル (IP) と電子親和力 (EA) の両方が減少し、バンドギャップが 0.1 eV 縮小することが明らかになった (Fig. 1)。これらの変化は、結晶化に伴う 2.54%の膜厚減少と密度増加に伴うものであった。これらの結果を総合することで、結晶化による分極エネルギーの変化などを見積もることができた。また、これらの変化がポリマー二層型薄膜太陽電池性能に及ぼす影響についても検討を行った。

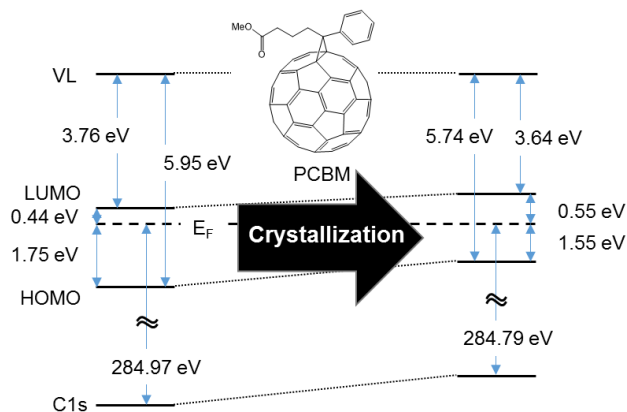


Fig. 1 PCBM 薄膜の結晶化に伴うエネルギー準位変化の模式図。