19a-A1-5

有機太陽電池における n 型有機半導体分子の電子構造

Electronic Structure of Fullerene Derivatives in Organic Photovoltaics

東理大理工 [1]，岡山大院自然 [2]　○中西 利栄 [1]，野木村 あゆ美 [1]，江口 律子 [2]，金井 要 [1]

Tokyo Univ. of Science [1], Okayama Univ. [2]

°Rie Nakanishi[1], Ayumi Nogimura[1], Ritsuko Eguchi[2], Kaname Kanai[1]

E-mail: 6213702@ed.tus.ac.jp

現在、有機太陽電池において、C_{60} や C_{70} を基本的な骨格とするさまざまなフラーレン誘導体が n 型有機半導体材料として広く使われている。有機デバイスの特性は有機材料の HOMO や LUMO のエネルギーと電極のフェルミ準位に関係があるため、その電子構造の理解が重要である。これまで、[6,6]-phenyl-C_{61}-butyric acid methyl ester (PCBM)と[6,6]-diphenyl C_{62} bis(butyric acid methyl ester) (bisPCBM)の電子構造の研究が Akaike ら[1,2]によって報告されているが、その他のフラーレン誘導体の詳細な電子構造に関する研究はほとんど行われてきていない。そこで、本研究では、様々なフラーレン誘導体の電子構造を明らかにすることを目的とした。フラーレン誘導体の電子構造を系統的に理解することで、新しい分子設計への指針が得られると期待される。

本研究では、紫外光電子分光法(UPS)と逆光電子分光法(IPES)を用いて様々なフラーレン誘導体の電子構造を測定し、分子軌道計算の結果との比較を行った。測定を行った試料は、PCBM、bisPCBM、C_{70}、[6,6]-phenyl-C_{71}-butyric acid methyl ester ($PC_{70}BM$)、[6,6]-phenyl-C_{61}- butyric acid butyl ester (PCBB)、[6,6]-phenyl-C_{61}-butyric acid octyl ester (PCBO)、[6,6]-thienyl-C_{61}-butyric acid methyl ester (TCBM)、indene-C_{60} bisadduct (ICBA)である。図 1 に、UPS-IPES 測定から求められた、各分子のエネルギーダイアグラムを示す。側鎖や骨格の違いにより、イオン化エネルギーや電子親和力、エネルギーギャップ(E_g)の値が大きく異なっていることがわかる。本研究では、これらの電子構造の違いについて、分子構造等の観点から様々な考察を行った。講演では、フラーレン誘導体の電子構造における、側鎖の種類や数を変化させることによる影響や、フラーレン骨格を C_{60} から C_{70} に変化させた場合の影響、側鎖の長さによる依存性などについて考察を行う。

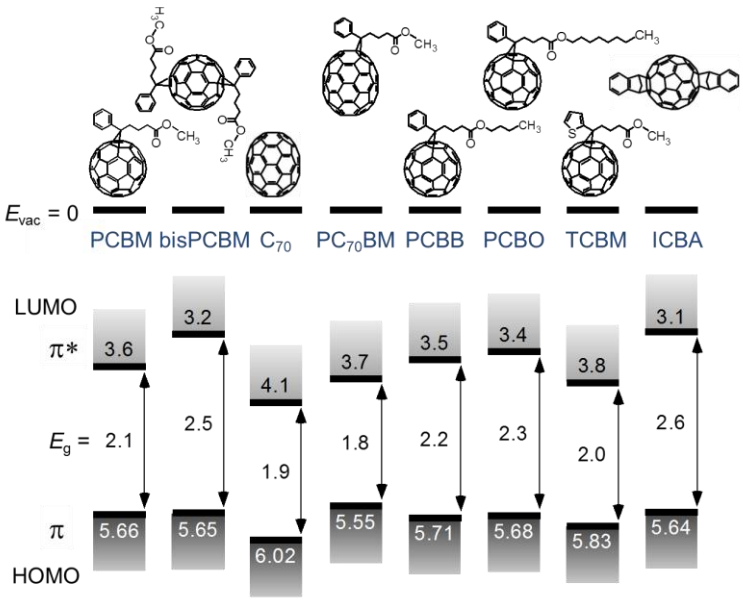

図 1　UPS-IPES 測定から求められた
フラーレン誘導体のエネルギーダイアグラム

[1] K. Akaike *et al*., J. Appl. Phys., 104 (2008) 023710.

[2] K. Akaike *et al*., Chem. Phys., 415 (2013) 31.

© 2014 年　応用物理学会