

軟 X 線共鳴散乱による有機太陽電池薄膜の研究

Study of organic solar cell by resonant soft x-ray scattering

原子力機構¹, 筑波大², 産総研³, JST さきがけ⁴, 高エネ研⁵
久保田正人¹, 櫻井岳暁^{2,4}, 宮寺哲彦^{3,4}, 吉田郵司³, 中尾裕則⁵JAEA¹, Tsukuba Univ.², AIST³, JST PRESTO⁴, KEK PF⁵M. Kubota¹, T. Sakurai^{2,4}, T. Miyadera^{3,4}, Y. Yoshida³, H. Nakao⁵

E-mail; kubota.masato@jaea.go.jp

次世代低コスト太陽電池として注目される有機薄膜太陽電池は、光照射により生成した励起子の電荷分離を促進させ、ドナー(電子供与体)/アクセプタ(電子受容体)界面面積を増やすために、光電変換層にはドナー材料とアクセプタ材料の混合膜(バルクヘテロ接合; BHJ)が使われている。有機太陽電池の BHJ 層では、自己組織的なドメイン構造を形成していて、太陽電池特性と深い相関を持つ可能性がある。この相関を理解するためには、ドメインの大きさ、相関長や配向状態に加えて、局所的な電子状態に関する物性情報も重要である。

軟 X 線共鳴散乱測定では、軽元素(酸素や窒素、硫黄など)の吸収端エネルギーを用いるので、有機薄膜材料の電子状態を捉える上で有用な測定手段である。本研究では、ドメインサイズが異なる試料の物性を捉えるために、poly(3-hexylthiophene) (P3HT) と [6,6]-Phenyl-C₆₁-Butyric Acid Methyl Ester (PCBM) の混合膜の成膜時に、溶媒の種類を変え、スピコート法によりガラス基板上に有機太陽電池薄膜試料を作成した。(Sample A; chloroform(CF) / Sample B; dichlorobenzene(DCB)) 硫黄の内殻占有準位から非占有準位への遷移確率の相違から結晶構造と電子状態の相関を明らかにするために、放射光施設ビームライン BL11B において、硫黄の K 吸収端近傍での軟 X 線共鳴散乱実験を実施した。

2450 eV の入射エネルギー放射光を用いて、 θ - 2θ scan を行った(Fig. 1)。a 軸方向の散乱ベクトル $Q=(H\ 0\ 0)$ を反映する profile が観測された。解析の結果、Sample A、B の a 軸の格子定数は、それぞれ 17.59 Å、16.09 Å であった。更に、ドメインサイズ L と歪みの大きさ η を見積もったところ、Sample A については、 $L_A=136\text{ Å}$, $\eta_A=4.6\%$ 、Sample B については、 $L_B=404\text{ Å}$, $\eta_B=2\%$ であった。また、吸収端近傍で入射エネルギーを変えて、 $Q=(1\ 0\ 0)$ profile の θ - 2θ scan を行った。各プロファイルの半値半幅(HWHM)は、Sample A では、HWHM のエネルギー依存性が見られたのに対して、Sample B では、エネルギー依存性がほとんど見られなかった。本発表では、UV-VIS スペクトルとも比較しながら、ドメイン状態と電子状態の相関について、議論を行う。

