

新規ナフトビスオキサジアゾール系ポリマーの太陽電池特性

Photovoltaic Performance of A Novel Naphthobisoxadiazole-Based Polymer

○川島 和彰^{1,2}・尾坂 格^{1,3}・瀧宮 和男^{1,2} (1. 理研 CEMS、2. 広大院工、3. JST さきがけ)

○Kazuaki Kawashima^{1,2}, Itaru Osaka^{1,3}, Kazuo Takimiya^{1,2} (1. RIKEN CEMS, 2. Hiroshima Univ., 3. JST PRESTO)

E-mail: itaru.osaka@riken.jp, takimiya@riken.jp

【諸言】有機薄膜太陽電池 (OPV) は、軽量・柔軟などの利点から、次世代の太陽電池として注目されており、変換効率の向上に向けて、様々な研究開発が行われている。特に、p 型材料である半導体ポリマーの開発は活発であり、数多くのポリマーが報告されている。

我々は以前、ナフトビスチアジアゾール (NTz) を有するポリマー (PNTz4T, Figure 1) を合成した。PNTz4T は、広い吸収帯 (バンドギャップ $E_g=1.5$ eV) を有し、OPV にて 10.1% と高い変換効率を示した^[1]。一方で、HOMO レベルは -5.10 eV とあまり深くないため、OPV の開放電圧 (V_{oc}) は、0.72 V とさほど高くなかった。すなわち、更なる高効率化には PNTz4T と同様の E_g を持ち、さらに深い HOMO レベルを持つポリマーの開発が必要であった。我々はモデル化合物の DFT 計算より、NTz の硫黄原子を酸素原子に置き換えたナフトビスオキサジアゾール (NOz) が、NTz 同等の E_g を持ち、HOMO 及び LUMO レベルの両方を深くすることができることを見出した。これは酸素原子の高い電気陰性度に起因すると考えられる。そこで、本研究では、NOz を有するポリマー (PNOz4T, Figure 1) を合成し、物性と OPV 特性を調査した。

【結果】PNOz4T のサイクリックボルタンメトリー測定から見積もった HOMO-LUMO レベルはそれぞれ -5.36 eV, -3.75 eV と、PNTz4T よりもそれぞれ約 0.2 eV 低い値であった (Figure 2)。また、吸収スペクトルより求めた E_g は 1.5 eV と PNTz4T と同等であった。OPV 素子を作製したところ、変換効率は 8.9% と PNTz4T 素子に比べてやや低いものの、0.97 V と非常に高い V_{oc} 値を示した。また、一般的に、電荷分離には、p 型材料 (ポリマー) と n 型材料 (PCBM) の LUMO レベルの差 (ΔE_{LUMO}) が少なくとも 0.2~0.3 eV 必要とされてきた。しかし、PNOz4T/PCBM 系では、 ΔE_{LUMO} がほぼ 0 eV であるにもかかわらず、短絡電流密度 (J_{sc}) は約 15 mA/cm² と高く、電荷分離は十分に起こっている。このことから、NOz は、従来困難であった高い J_{sc} と V_{oc} を両立するポリマーを実現し得る有望なビルディングユニットとして期待できる。

[1] V. Vohra, K. Kawashima, T. Kakara, T. Koganezawa, I. Osaka, K. Takimiya, H. Murata, *Submitted*.

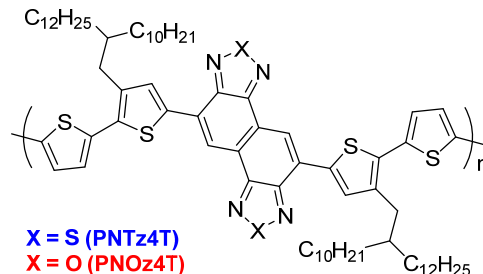


Figure 1. Structure of PNXz4T

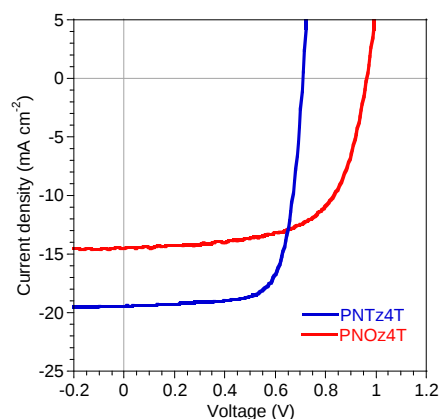


Figure 2. J-V characteristics of PNXz4T-based cells