

有機薄膜太陽電池の乱れた界面における励起子解離の量子過程

Quantum process of exciton dissociation at disordered organic solar-cell interfaces

○(DC)飯塚 秀行¹、中山 隆史¹ (1. 千葉大院理)

○(DC)Hideyuki Iizuka¹, Takashi Nakayama¹ (1. Dept. Physics, Chiba Univ.)

E-mail: hyde@phys8.s.chiba-u.ac.jp



有機分子固体を用いた太陽電池は、低コスト・フレキシブルが魅力的であり、エネルギー変換効率の向上を目指し最適な構成分子種・構造の探索が精力的に行われている。効率を支配する重要な過程の1つにヘテロ界面での励起子の解離がある[1]。最近、高い解離確率は界面のナノスケールの構造乱れに依るとの実験的報告[2,3]があるが、その過程は十分には理解されておらず、ミクロな理解が求められている。そこで我々は、有機半導体界面の構造とそこでのキャリアの移動を2次元強束縛近似でモデル化し、励起子波束の界面における散乱の時間発展シミュレーション[4]を行い、界面構造と解離確率の関係（界面の次元性依存性や乱れ依存性）を検討した。

主な結果は次の2点である[5]。(1) 図には、様々な界面における励起子の解離確率を界面オフセット(V_{off})の関数として示した。図から、解離確率はある V_{off} 値の周りでピークを持つことが分かる。その理由は、励起子の解離は V_{off} が束縛エネルギーを超えた時から始まるが、同時に V_{off} が増加すると界面でのキャリア反射も大きくなり解離しにくくなるためである。また、束縛エネルギーの次元性を反映し、2次元界面での励起子解離は1次元界面と比べて小さい V_{off} 値で起きる（矢印 I のシフト）。

(2) 界面が凸凹で乱れてくると、解離確率は大きく上昇する（矢印 II のシフト）。これは、凸凹により解離に有効な界面長が増えたためである。一方、界面構造の凸凹の空間スケールが励起子のサイズより小さくなると（特に値が大きい時）、解離確率は再び減少する（矢印 III のシフト）。これは、励起子が凸凹内に侵入できなくなり再び反射が大きくなるためである。この様に、励起子の解離確率はヘテロ界面の幾何的な構造・乱れに強く依存する。

講演ではこれら結果の詳細を説明すると共に、解離時間や解離形態、界面束縛状態などについても議論する予定である。

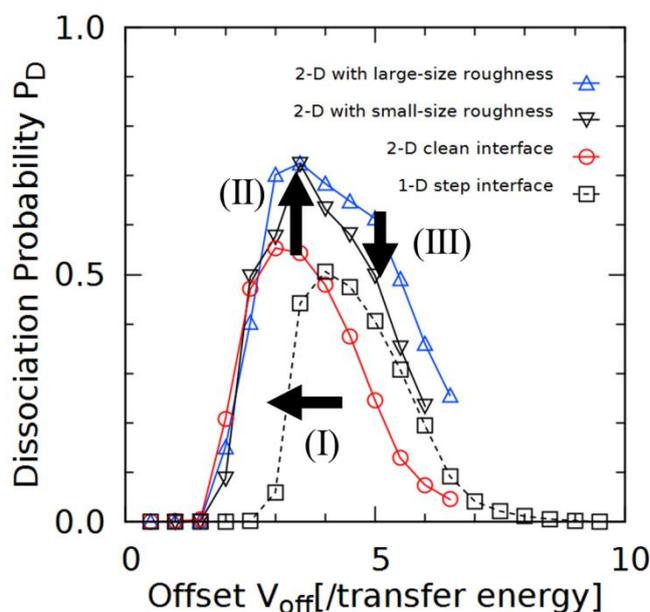


Figure : Dissociation probability of exciton as a function of interface energy-level offset V_{off} , for various clean (\square , \circ) and disordered (Δ , ∇) interfaces.

- [1] Y. Yuan et al., Nature Mat.10 (2011) 296. [2] Y. Moritomo et al., Appl. Phys. Express 7 (2014) 052302. [3] W. Chen et al., Nano Lett. 11, (2011) 3707. [4] K. Sato et al., SSDM (2013). [5] H. Iizuka et al., ISSS-7 (2014).