

ナフトビスオキサジアゾール系ポリマーにおけるアルキル側鎖の密度が溶解性と相分離構造に及ぼす影響

Impact of Alkyl Side Chain Density on Solubility and Phase Separated Structure in Naphthobisoxadiazole-Based Polymers

理研 CEMS ○三木江 翼、尾坂 格、瀧宮 和男

RIKEN CEMS ○Tsubasa Mikie, Itaru Osaka, Kazuo Takimiya

E-mail: itaru.osaka@riken.jp

【緒言】 長波長領域の吸収を可能にしたローバンドギャップポリマー (LBP) は、バルクヘテロジャンクション (BHJ) 型有機薄膜太陽電池において光電変換効率 (PCE) 向上の立役者である。特に、当研究室により開発されたナフトビスオキサジアゾール (NOz) とクォーターチオフェン (4T) を主鎖骨格に有する LBP: PNOz4T は、電荷分離時の小さいエネルギー損失に起因し、バンドギャップは 1.52 eV ながら 1.0 V に迫る高い開放電圧を示し、PCE は 8.9 % に達する (Fig. 1 左)^[1]。しかしながら、PNOz4T は主鎖の高い平面性と側鎖の強い分子間インターディジテーションゆえ溶解性が低く、フラーレン誘導体 PCBM との BHJ 薄膜において、電荷分離に有効な数十ナノメートルスケールのドメインからなる相分離構造を十分に形成できないという問題点があった。

そこで本研究では、アルキル側鎖の密度増加により、インターディジテーションが阻害され、溶解性が向上することを期待して (Fig. 2)、主鎖骨格に NOz とジチエニルチエノチオフェンを有する LBP: PNOz2TTT を設計し、合成した (Fig. 1 右)。

【結果と考察】 側鎖に 2-ドデシルテトラデシル基 (R = DT) を有する PNOz2TTT を合成し、各種物性評価を行ったところ、HOMO 準位、吸収スペクトル (バンドギャップ) は PNOz4T と同様であった。一方、PNOz2TTT は PNOz4T と同程度の平均分子量 (Mn: 53000) でありながら、溶解性は大幅に改善された。実際、薄膜作製に用いる PNOz2TTT のクロロベンゼン溶液は PNOz4T の 1.5 倍高濃度で調整することができた。D/A 比 1:2 の BHJ 薄膜を作製したところ、非常に均一な薄膜が形成された。これを用いて逆構造素子の光電変換特性を評価した結果、PCE は 3.9% と低い値を示した。更なる PCE の向上を目指して種々の添加剤を溶液に加えて検討したところ、3vol% のジヨードオクタンを添加して作成した薄膜では、約 1.6 倍高い 6.2% の PCE が得られた。当日は、さらにポリマーの結晶性や配向性、相分離構造とデバイス特性との相関関係についても議論する。

R = 2-dodecyltetradecyl (DT)

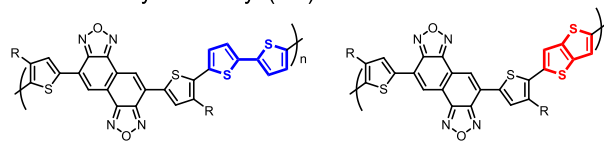


Figure 1. Chemical structures of PNOz4T and PNOz2TTT.

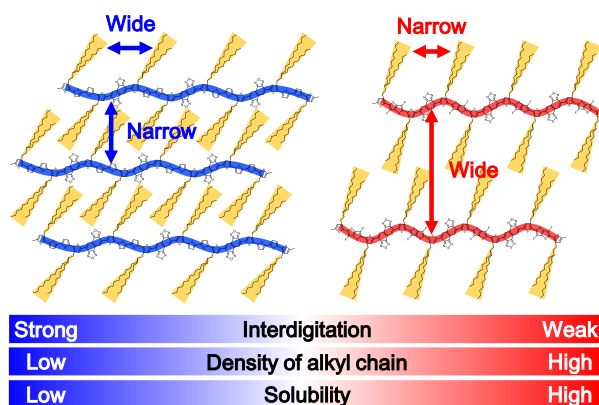


Figure 2. A concept to enhance solubility of LBPs (left: PNOz4T, right: PNOz2TTT).

[1] K. Kawashima, Y. Tamai, H. Ohkita, I. Osaka, K. Takimiya, *Nat. Commun.*, **2015**, 6, 10085.