

有機薄膜太陽電池の乱れた界面における励起子解離・束縛の量子過程

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

○飯塚 秀行¹、枘湯 慶充¹、中山 隆史¹ (1. 千葉大院理)

○Hideyuki Iizuka¹, Yoshimitsu Masugata¹, 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]。励起子解離は従来、界面束縛状態(CT状態)からの遅い熱的過程に対して議論されてきた[2]。一方、最近の実験においては、励起子の多くは速く断熱的に解離すると考えられている[3]。実際の系においては、これら2つの過程は共存すると考えられるが、どのような場合にどちらが多いか等、両者の関係はよく分かっていない。そこで今回我々は、格子振動によるエネルギー散逸を考慮した2次元強束縛近似を用いて、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を行い[4]、励起子の解離・束縛確率の関係(バンドオフセットや界面構造依存性)を検討した。

主な結果は次の2点である。(1) 図に清浄界面と構造の乱れた界面における励起子の解離・束縛確率を界面オフセット V_{off} の関数として示す。励起子はある V_{off} 値を境に、 V_{off} が大きいと解離し、 V_{off} が小さいと界面へ束縛されやすいことがわかる。その理由は、励起子は大きな V_{off} からはクーロン束縛以上のエネルギーをもらい解離し始めるが、小さな V_{off} では格子振動へ散逸させた運動エネルギーが大きく低エネルギーの界面束縛状態に散乱されるためである。(2) 界面が凸凹で

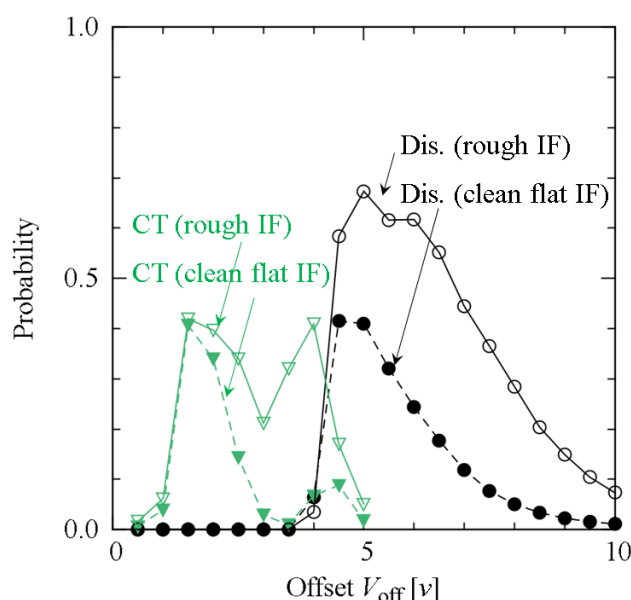


Figure : Dissociation (Dis.) and trap (CT) probabilities of scattered exciton as a function of interface energy-level offset V_{off} , for clean (●, ▼) and disordered (○, ▽) interfaces.

乱れてくると、解離確率は大きな V_{off} 側で増加し、束縛は広い V_{off} 領域で起こるようになる。これら変化は、いずれも励起子が凸凹した界面構造内で多重散乱するためである。このように、励起子の束縛・解離過程は、ヘテロ界面のバンドオフセットや幾何に依存して大きく変化する。

講演ではこれら結果の詳細を説明すると共に、界面近傍における励起子状態密度との関係についても議論する予定である。

- [1] Y. Yuan et al., Nature Mat.10 (2011) 296. [2] R. A. Marsh et al., J. Appl. Phys. **101** (2007) 083509. [3] K. Yonezawa et al., Appl. Phys. Lett. **103** (2013) 173901. [4] H. Iizuka et al., Jpn.J. Appl. Phys., **55** (2016) in press.