高開放電圧を目指した新規半導体ポリマーの開発と有機薄膜太陽電池特性

Development of Semiconducting Polymers for Organic Solar Cells with High Open Circuit Voltage

°斎藤慎彦 [1]、尾坂格 [1]、瀧宮和男 [1]（1. 理研 CEMS）

°Masahiko Saito[1], Itaru Osaka[1], Kazuo Takimiya[1] (1.RIKEN CEMS)

E-mail: itaru.osaka@riken.jp

【緒言】半導体ポリマーの開発において、主鎖に導入するビルディングユニットの選択は、ポリマーの結晶性や電子構造を制御するうえで重要な鍵である。高い開放電圧（V_{OC}）を得るためにはポリマーは深いHOMOレベルを持たなければならないため、強い電子欠損性を有するビルディングユニット（アクセプターユニット）が必要となる。我々は、新規なアクセプターユニットとして、ジチエニルチエノチオフェンビスイミド（TBI; **Figure 1a**）を考案した。TBIはイミド基を有するビチオフェンイミド（BTI; **Figure 1a**[1, 2]）を2つ縮環させることでより電子欠損性が強まるため、これを有するポリマーは深いHOMOレベルを有することが期待できる。

【結果と考察】TBIを有するポリマーの分子構造を**Figure 1b**に示す。今回、共重合ユニットとしてビチオフェン、アルキルビチオフェン、チエノチオフェン、ビチアゾールを用いてポリマー（PTBI-2T、-2TR、-TT、-2Tz）を合成した。薄膜の吸収スペクトルから見積もったポリマーのバンドギャップは1.7−1.9 eVであった。また、光電子分光法により求めたHOMOレベルは、いずれも-5.6 eV以下と非常に深い値を示した。これらのポリマーと$PC_{61}BM$とのバルクヘテロ接合（BHJ）型太陽電池（ITO / ZnO / polymer:$PC_{61}BM$ / MoO_X / Ag）を作製したところ、PTBI-2T、-2TR、-TT素子はいずれも1 Vを超える高いV_{OC}を示した。PTBI-2TR素子において最も高い変換効率7.0%（J_{SC} = 10.9 mAcm^{-2}, V_{OC} = 1.00 V, FF = 0.65）が得られた。さらに、$PC_{71}BM$を用いて最適化することでPTBI-2TR素子の効率は8.0%（J_{SC} = 12.5 mAcm^{-2}, V_{OC} = 0.99 V, FF = 0.64）まで向上した。一方で、PTBI-2TzはPC61BMとのBHJ素子ではほとんど機能しなかった。そこで、これらのポリマーをn型材料（P3HTをp型）とする素子を作製したところ、PTBI-2Tおよび-2TR素子は機能しなかったが、PTBI-TTおよび-2Tz素子は1%程度ではあるが太陽電池特性を示した。さらに、これらのポリマーを用いてトランジスタ素子を作製したところ、興味深いことにPTBI-2T、-2TRはp型、PTBI-TTは両極性、PTBI-2TzはN型特性と、太陽電池と同様の極性を示した。このように、TBIは高いV_{OC}を示すポリマーだけでなく、p型およびn型特性を示すポリマーを与えることができる万能なアクセプターユニットである。

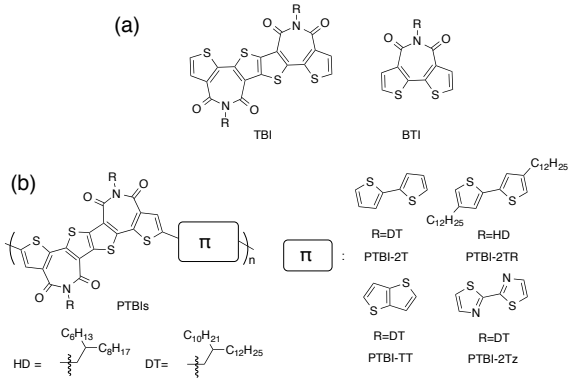

Figure 1. Chemical structure of BTI, TBI and PTBIs and device characteristics of PTBIs

Reference [1] J. A. Letizia *et al., J. Am. Chem. Soc,.* **130**, 9679 (2008). [2] X. Guo *et al., Nat. Photon,.* **7**, 825 (2013).

© 2016年 応用物理学会