

低分子有機太陽電池の開放電圧における置換基効果： 光前駆体法により成膜可能な結晶性アントラセン誘導体を用いた検討 Substituent Effect on the Open-Circuit Voltage in Molecular Organic Solar Cells: The Case of Crystalline Anthracene Derivatives Deposited by a Photoprecursor Approach

奈良先端大物質, °寺井 健悟, 鈴木 充朗, 山田 容子

NAIST, °Kengo Terai, Mitsuharu Suzuki, Hiroko Yamada

E-mail: terai.kengo.sy3@ms.naist.jp

緒言：有機太陽電池（OPV）において、p 型材料のイオン化エネルギー（IE）は開放電圧（ V_{oc} ）に直接的な影響を及ぼす。IE は、独立した分子が示す最高被占軌道（HOMO）準位だけでなく、固相中の分子配列にも強く依存するため、分子構造と分子配列の相関を理解することは、不要な V_{oc} の低下を避ける上で非常に重要である。本研究では、異なる末端置換基をもつ高結晶性アントラセン誘導体 R-DBTA（Fig.1）について、それらを p 型材料に用いた OPV の V_{oc} を系統的に評価した。

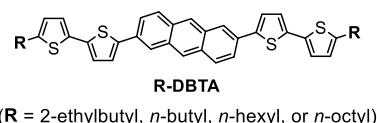
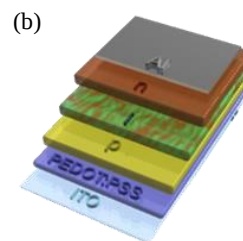
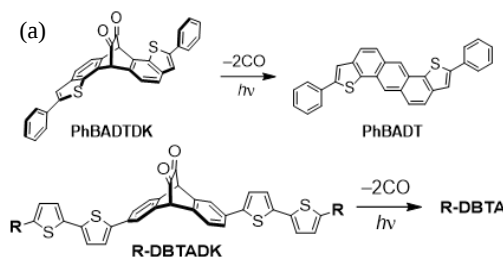


Fig. 1 Chemical structure of R-DBTAs.

実験：R-DBTA の特性は、光前駆体法を用いて作成した塗布積層 p-i-n 型 OPV（素子構造 [PhBADT / R-DBTA:PC₇₁BM / PC₇₁BM]）中で評価した（Fig. 2）



[1]. まず、ITO/PEDOT:PSS 基板上に PhBADTDK のクロロホルム

Fig. 2 (a) Photochemical formation of PhBADT and R-DBTAs from their α -diketone-type photoprecursors; (b) Schematic drawing of the p-i-n-type organic photovoltaic layers prepared in this study.

溶液をスピスコートにて製膜し、光照射により PhBADT 層（p 層）を形成した（Fig.2a）。その上に、R-DBTADK:PC₇₁BM の 2:1 混合溶液を同様の条件で製膜し、R-DBTA:PC₇₁BM 混合層（i 層）を形成した。さらに PC₇₁BM 層（n 層）をスピスコートで成膜した後、最後にバッファ層と Al 電極を成膜し、素子を完成した（Fig.2b）。

結果と考察：作製した OPV を疑似太陽光照射下で評価したところ、末端アルキルの違いによって、 V_{oc} が 0.42–0.97 V と大きく異なることが分かった（Fig.3）。溶液中での第一酸化電位から見積もった HOMO はアルキル基の構造に依存しない一方、R-DBTA 単成分膜のイオン化エネルギーから見積もった HOMO は V_{oc} と良い相関を示した。従って、観測された V_{oc} の差は、薄膜中における R-DBTA の分子配列の違いに由来するものと考えられる。

[1] Y. Yamaguchi *et al.*, *Sci. Rep.* **4**, 7151 (2014).

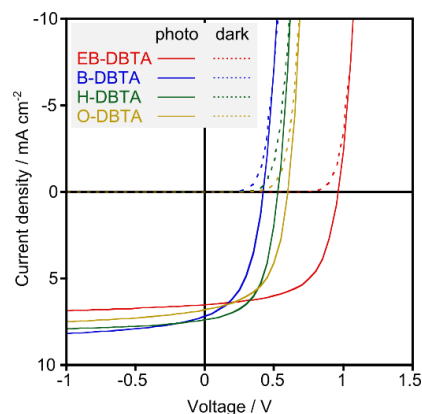


Fig. 3 J-V curves of OPVs. Broken lines, in dark; Solid lines, under AM1.5G illumination at 100 mW cm⁻².