$PC_{61}BM$ の配向が有機太陽電池の特性に与える影響

Effect of the molecular orientation of $PC_{61}BM$ on performance of organic photovoltaics

東理大・理工 [1]，理研・CEMS[2]，千葉大院・工 [3]，千葉大分子キ [4] °赤池 幸紀 [1]、熊井 拓実 [1]、中野 恭兵 [2]、吉田 弘幸 [3,4]、但馬 敬介 [2]、金井 要 [1]

Fac. of Sci. and Tech., Tokyo Univ. of Sci. [1], RIKEN CEMS [2], Grad. School of Eng., Chiba Univ. [3], Mol. Chirality Res. Cent., Chiba Univ.[4], °Kouki Akaike[1], Takumi Kumai[1], Kyohei Nakano[2], Hiroyuki Yoshida[3,4], Keisuke Tajima[2], Kaname Kanai[1]

E-mail: kouki.akaike@rs.tus.ac.jp

有機太陽電池(OPV)の光電変換界面における有機半導体の分子配向は、自由電荷の発生や再結合、素子特性に大きく影響する。過去にドナーの配向が OPV の性能に与える影響は調べられてきたが[1,2]、アクセプターの配向についてはあまり検討されていない。我々は、典型的なアクセプターである[6,6]-phenyl-C_{61}-butyric acid methyl ester($PC_{61}BM$)の薄膜が結晶化すると分子の側鎖が表面に露出することを見出した[3]。本研究ではこれを基に、sexithiophene(6T)をドナーに用い、$PC_{61}BM$ の配向が異なるドナー/アクセプター(DA)界面を利用した平面接合 OPV の特性を評価した。

OPV の基板には、エトキシ化ポリエチレンイミン(PEIE)で被覆されたインジウムスズ酸化物(ITO)基板を用いた。その上に $PC_{61}BM$ 薄膜をスピンコートし、さらに 6T、MoO_x、Al を順に蒸着することで素子を完成させた。Fig. 1 に非晶 $PC_{61}BM$(*a*-$PC_{61}BM$)と結晶 $PC_{61}BM$(*c*-$PC_{61}BM$)をアクセプターに用いた平面接合 OPV の電流―電圧特性を示す。短絡電流密度(J_{SC})は $PC_{61}BM$ の配向変化の影響をあまり受けないが、開放端電圧(V_{OC})は 0.41 V から 0.59 V に増加した。その原因を探るため、$PC_{61}BM$/6T 界面近傍の両分子の最高被占軌道(HOMO)のエネルギーを紫外光電子分光(UPS)で測定し、UPS と IPES で求めたバンドギャップから最低空軌道(LUMO)を見積もった。そこから、電荷移動状態のエネルギーに関連する 6T の HOMO と $PC_{61}BM$ の LUMO のエネルギー差(E_{DA})を調べると、*a*-$PC_{61}BM$/6T 界面に比べて *c*-$PC_{61}BM$/6T 界面では E_{DA} が 0.1 eV 弱増加した。電荷移動吸収領域における電界発光スペクトルおよび外部量子効率(EQE)をマーカス理論に基づいて解析し、算出した電荷移動状態のエネルギーは結晶化後に 60 meV 増えるが、V_{OC} の増加をこれだけでは説明しきれない。EQE スペクトルの解析結果からさらに、*c*-$PC_{61}BM$/6T 界面における電子カップリングが *a*-$PC_{61}BM$/6T 界面に比べて約 1/5 に減少することが分かった。このことから、DA 界面に $PC_{61}BM$ の側鎖が存在することでキャリアの再結合が抑制され、V_{OC} がさらに増加したと考えられる。

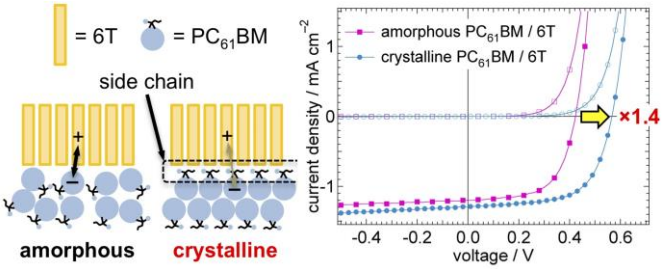

Fig. 1 The impact of the molecular orientation of $PC_{61}BM$ on photovoltaic performance of $PC_{61}BM$/6T planar heterojunction OPVs.

＜参考文献＞ [1] B. P. Rand *et al.*, *Adv. Funct. Mater.* **2012**, *22*, 2987.

[2] N. A. Ran *et al.*, *Nat. Commun.* **2017**, *8*.

[3] 熊井ら，第 64 回応用物理学会春季学術講演会, 14p-311-7.