

## エキシトンの電荷移動錯体を経由する電荷分離効率に対する理論

### Theoretical study on charge dissociation yield via charge transfer states

○ 関 和彦<sup>1</sup>、ポイチック, マリウス<sup>2</sup> (産総研ナノ材料<sup>1</sup>、ウッジ工科大学<sup>2</sup>)

○ Kazuhiko Seki<sup>1</sup>, M. Wojcik<sup>2</sup> (AIST NRI<sup>1</sup>, Lodz Univ. Technology<sup>2</sup>)

E-mail: k-seki@aist.go.jp

有機薄膜太陽電池では、ドナー性の物質とアクセプター性の物質の間の界面エネルギーの差により電荷分離する。光吸収で生成したエキシトンは界面まで移動し電荷分離するが、生成した電荷移動錯体からの発光に対する外部電場依存性を理論的に解析することにより発光の機構についての知見を得ることができる。

図1に示すような様々な再結合や発光過程が考えられる。図1 (a) は電荷再結合と発光速度が等しいとしたモデルである。一般に、電荷再結合で生成する電荷移動錯体から発光が起こる場合には、それぞれの速度定数は異なっている。そのため、このモデルは電荷移動錯体を経由する発光の解析に用いることはできない。図1 (b) の過程では、エキシトンから生成した電荷移動錯体が電荷分離し再結合する過程が考慮されている。また、発光は電荷移動錯体を経由して起こることも考慮されている。図1 (c) は、励起エネルギーが十分に高く電荷移動錯体を経由せずに電荷分離する場合を表しており、電荷再結合によってのみ電荷移動錯体が生成し、電荷移動錯体が発光する場合に対応する。本研究では図1 (b) を用いて PPV-PCBM バルクヘテロ結合系での発光を解析した。その結果、電荷移動錯体の解離と再結合が、電荷移動錯体からの発光と競合していると考えられることを示す。[1]

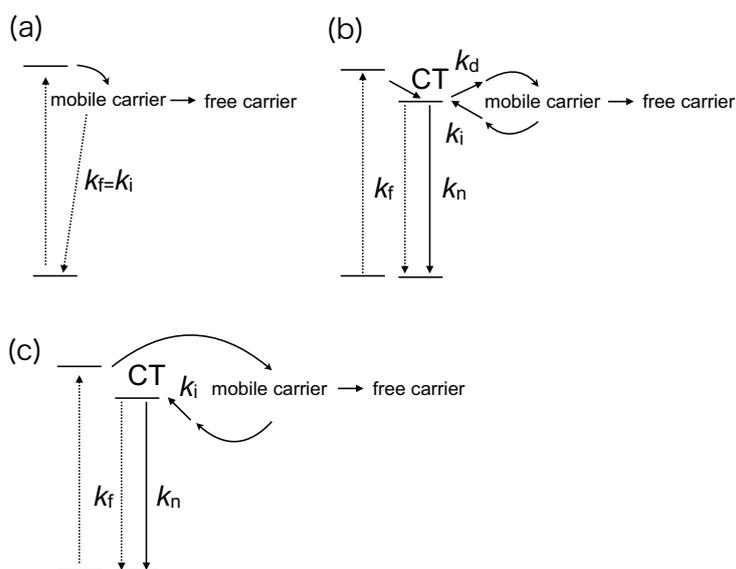


図 1: Schematic representation of charge separation and recombination of geminate pair [1]

さらに、格子モデルを用いて、再近接格子間で再結合が一次反応速度  $k_r$  で起こる場合について、電荷分離効率が、格子の単純単位胞体積  $V_c$  と配位数  $N_c$  で表されることを外部電場のない条件ではあるが導いた。[2] また、数値計算に基づいて、電場がある場合やドナー性の分子とアクセプター性の分子からなるヘテロ結合がある系への上記理論の適用性を検討した。

[1] K. Seki, M. Wojcik, J. Phys. Chem. C. 2017, 121, 3632.

[2] M. Wojcik, A. Nowak, K. Seki, J. Chem. Phys. 2017 146, 054101.