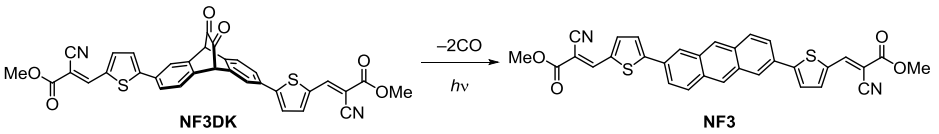
光前駆体法で成膜可能な非フラーレン n 型有機半導体

Non-Fullerene n-Type Organic Semiconductors That Can Be Processed via a Photoprecursor Approach

奈良先端大物質 [1]，山形大院有機シス [2]，阪大院工 [3]
○(M1)根来 周平 [1]，大和 雅樹 [2]，鈴木 充朗 [1]，中山 健一 [2,3]，山田 容子 [1]
NAIST[1], Yamagata Univ.[2], Osaka Univ.[3]
°Shuhei Negoro[1], Masaki Yamato[2], Mitsuharu Suzuki[1], Ken-ichi Nakayama[2,3], Hiroko Yamada[1]
E-mail: hyamada@ms.naist.jp

【緒言】従来，有機太陽電池（OPV）の n 型材料にはフラーレン誘導体が広く用いられてきたが，近年では非フラーレン型の n 型材料が注目され，フラーレン型を超える性能を示す化合物も開発されている．一方，我々は「光前駆体法」による薄膜構造制御を駆使した OPV の高性能化に取り組んできた．本手法は，可溶性のα-ジケトン（DK）型前駆体を塗布した後，その場で光反応を行って目的とするアセン誘導体の薄膜を得るものである[1]．これまでの検討では，光前駆体法に適用可能な p 型材料を複数開発し，光反応条件の制御や積層型活性層の構築を軸とした薄膜構造制御に成功している[2,3]．このような背景のもとに本研究では，光前駆体法における材料選択自由度の向上とそれによる高性能 OPV の実現を目的とし，新規 n 型有機半導体の開発に取り組んだ．

【結果と考察】OPV の活性層中で n 型材料として機能する化合物を狙い，ジチエニルアントラセンの両末端に電子吸引性の高い置換基を導入した NF3 を設計した．NF3 は，対応する DK 型光前駆体 NF3DK から光前駆体法により塗布成膜することができると期待した（Scheme 1）．



Scheme 1. Photochemical formation of NF3 from the α-diketone-type photopresursor NF3DK.

実際に NF3DK を合成してその光反応性を調査したところ，目的とする NF3 への反応が薄膜中でも効率的に進行することが示唆された．また，得られた薄膜について，大気下光電子分光法により測定したイオン化エネルギーと薄膜の吸収端波長から算出したフロンティア軌道エネルギー準位は，最高被占軌道（HOMO）が–5.72 eV，最低空軌道（LUMO）が–3.60 eV であった．従って，NF3 は P3HT などの代表的な p 型材料と組み合わせた場合に n 型材料として機能すると推測される（同様の手法により決定された P3HT の軌道エネルギー準位は，HOMO: –4.8 eV，LUMO: –2.8 eV[4]）．発表では，NF3 の薄膜物性の詳細に加え，NF3 と一般的な p 型材料を組み合わせて作製したバルクヘテロジャンクション型 OPV の評価結果を報告する．

[1] Suzuki M. et al. *J. Photochem. Photobiol. C* **18**, 50–70 (2014). [2] Yamaguchi, Y. et al. *Sci. Rep.* **4**, 7151 (2014). [3] Suzuki, M. et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8**, 8644–8651 (2016). [4] Benten, H et al. *J. Photopolym. Sci. Tech.* **29**, 537–540 (2016)