トリフェニルアミンとベンゾチアジアゾール部位を含むドナー・アクセプター連結分子の単一成分薄膜太陽電池への応用

Application of Donor-Acceptor Conjugates Bearing Triphenylamine and Benzothiadiazole Moieties to Single Absorber Organic Solar Cells

阪大院工　°奥田 侑希，末延 知義，鈴木充朗，中山 健一

Osaka Univ., °Yuki Okuda, Tomoyoshi Suenobu, Mitsuharu Suzuki, Ken-ichi Nakayama

E-mail: °yokuda@chem.eng.osaka-u.ac.jp, nakayama@mls.eng.osaka-u.ac.jp

はじめに：現在主流であるバルクヘテロ接合型太陽電池では、ドナー(D)・アクセプター(A) 相分離構造の精密な制御が必要であり、D-A 界面でのエネルギー緩和が光起電力ロスの原因となる[1]。我々は、単一化合物のみの有機膜からなる薄膜太陽電池の可能性を検討するため、有機半導体材料の膜バルクでの光電荷分離挙動と分子構造の関係を検討している。これまでに分子内に D-A 連結構造を有し、光励起状態において大きな CT 性を持つ DTDCPB (Figure 1) が、比較的良い性能を示すことを見出している[2]。本研究では、同様にトリフェニルアミンとベンゾチアジアゾール部位を含み、チエノチオフェンで連結した DTDCPB-TT、およびベンゾチアジアゾール部位にローダニン分子を置換した DTERPB, DTRCNPB を合成し、単一成分薄膜太陽電池に応用した。

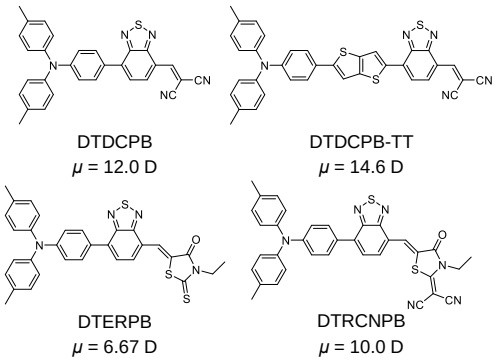

Figure 1. Chemical structure of donor-acceptor conjugates bearing triphenylamine and benzothiadiazole moieties. μ: Calculated dipole moment.

実験：DTDCPB-TT、DTERPB と DTRCNPB は鈴木・宮浦カップリング、Stille カップリングおよびアルドール縮合を用いて合成した。これらの真空蒸着膜を用いて、素子構造 ITO/PEDOT:PSS/有機層/Ca/Al からなる単一成分薄膜太陽電池を作製した。

結果と考察：いずれの化合物においても、単一成分薄膜太陽電池としては比較的良好な *J-V* 特性を示し(Figure 2)、DTDCPB における内部量子収率は 20% (波長 400 nm 付近)を超える。DTDCPB に比べて DTDCPB-TT はフィルファクター(FF)がやや向上したが、短絡電流密度(J_{SC})は低下した。一方、同じローダニン部位を含む二分子を比較すると、DTERPB に比べて DTRCNPB は J_{SC} が向上した。結晶構造解析や基底および光励起状態の計算を検討した結果、これらの単一成分薄膜太陽電池における J_{SC} は、分子の双極子モーメントと相関があることが分かった。さらに膜内での分子の凝集状態、具体的には二分子が反平行にパッキングしないことが電荷分離に重要であることが示唆された。

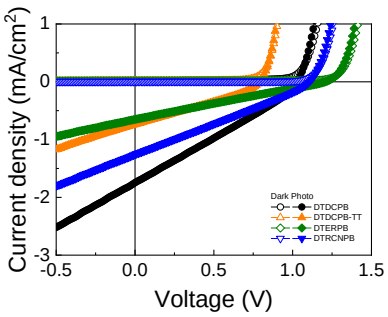

Figure 2. *J-V* characteristics of the single absorber organic solar cells.

参考文献：[1] K. Vandwal et al. *Nat. Mater.* **2014**, *13*, 63. [2] 奥田侑希他, 2018 年光化学討論会予稿集, 2P045.

© 2019年 応用物理学会