

ナフトビスピラジンビスイミドを有する新規 n 型半導体ポリマーの合成と全高分子型太陽電池への応用

π -Conjugated Polymers Based on Naphthobispyrazinebisimide as n-type Materials for All-Polymer Solar Cell

広大院工, °(M2)岡本 健太, 三木江 翼, 斎藤 慎彦, 米山 公啓, 尾坂 格

Hiroshima Univ., °Kenta Okamoto, Tsubasa Mikie, Masahiko Saito, Kimihiro Komeyama,

Itaru Osaka

E-mail: iosaka@hiroshima-u.ac.jp

【緒言】

置換基導入可能な電子欠損性骨格であるナフトビスピラジン (NPz) は、分子設計の幅が広いことから π 共役系ポリマーの有用なビルディングブロックである^(1,2)。当グループでは以前に、NPz に電子求引性基であるイミド基を 2 つ導入したナフトビスピラジンビスイミド (NPI)、および NPI 系ポリマーを開発した。NPI は強力な電子欠損性骨格であり、NPI とビチオフェンから成るコポリマー P1 および P2 は、近赤外領域に達する吸収と深い LUMO 準位を与え、有機電界効果トランジスタ測定において比較的高い電子移動度を与えることを明らかにした。本研究では、共重合ユニットとしてフッ素化ビチオフェン誘導体 (BT 型) およびフッ素化チオフェン誘導体 (Th 型) を有する NPI 系ポリマーを合成し、これらを全高分子型太陽電池の n 型材料として応用した。

【結果と考察】

BT 型 NPI 系ポリマーにおいてビチオフェンの 3,3' 位にフッ素を導入した P2 および 4,4' 位にフッ素を導入した P3 は、P1 に比べてエネルギー準位が深くなった。また、P2 と P3 はフッ素置換数は同じだが、P3 の方が低い HOMO 準位を示した。

また、UV-vis 吸収スペクトルを測定したところ、P2 および P3 は、P1 に比べて吸収領域が短波長シフトしており、エネルギー準位と相関があることが分かった。Th 型においても、共重合ユニットに導入するフッ素の数を増やすことで、HOMO 準位の低下と吸収領域の短波長シフトが見られた。これらのポリマーを n 型材料として全高分子型太陽電池を作製したところ、P1 および P2 以外は全て太陽電池特性を示し、P3 を用いた素子が最高変換効率 2.2% を与えた。当日は、分子構造、電子物性と薄膜構造および太陽電池特性との相関関係について議論する。

【参考文献】 (1) T. Mikie, et al. *Chem. Lett.* **2017**, 46, 1193. (2) T. Mikie, et al. *Macromolecules* **2019**, 52, 3909.

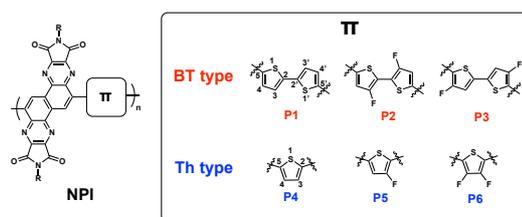


Fig 1. Chemical structure of NPI-based polymers

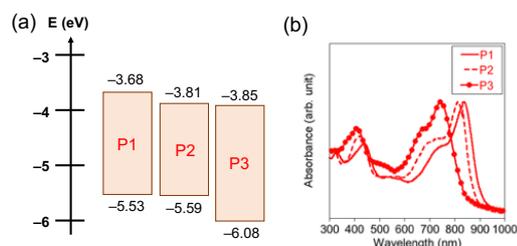


Fig 2. (a) Energy diagrams and (b) UV-vis absorption spectra of the NPI-based polymers.