非フラーレンアクセプター有機薄膜太陽電池の電荷解離エネルギー障壁

Energy barrier to charge dissociation in organic solar cell with non-fullerene acceptor

千葉大工 [1], 千葉大院工 [2], 理研創発機能高分子 [3], 千葉大分子キ [4] ○(B) 寺戸航佑 [1], (M2) 杉江 藍 [2], 中野恭兵 [3], Shuixing Dai [3], 但馬敬介 [3], 吉田弘幸 [2,4]
Chiba Univ. [1,2,4], RIKEN [3] ○Kosuke Terado[1], Ai Sugie[2], Kyohei Nakano[3], Shuixing Dai [3], Keisuke Tajima[3], Hiroyuki Yoshida[2,4]
E-mail: terado415@chiba-u.jp

有機薄膜太陽電池(OSC)では、光励起により生成した励起子をドナーとアクセプターの界面で分離することで発電する。近年、アクセプターに非フラーレン分子を用いることにより光電変換効率(PCE)が向上している。これは、非フラーレンアクセプター(NFA)が、フラーレンに比べ、光を吸収しやすいことや発電過程におけるエネルギー損失が少ないことに起因している。

OSC の発電過程は、励起子生成(Ex)、電荷移動状態 (CT)、自由電荷状態(FC)、電荷収集状態(CC)の 4 つに分けられる。CT 状態から FC 状態に移行するには、ホールと電子の強いクーロン力によるエネルギー障壁がある。NFA は分子長軸方向に大きな四重極モーメントをもつものが多い。四重極の作るポテンシャルがエネルギー障壁を下げて、電荷分離を促進している可能性がある。

最近、所属研究室で独自に開発した低エネルギー逆光電子分光法(LEIPS)[1] と紫外光電子分光法(UPS)を組み合わせることで混合膜の電子親和力(EA)とイオン化エネルギー(IE)を測定し、FC 状態のエネルギーを決定することに成功した[2]。本研究では、変換効率が 15%を超えることが報告されている NFA とポリマーの組み合わせとして Y6、PBDB-T-SF [3]、比較のためアクセプターを ITIC-2F に換えた混合膜にこの方法を適用し、FC 状態のエネルギーと電荷解離の障壁を求めた。

ITO 基板上にスピンコート法で作製した混合膜について UPS、LEIPS 測定を行い FC 状態のエネルギーを決定した。また開放端電圧 V_{OC} の温度依存を測定し、絶対零度に外挿することで CT 状態のエネルギーを決定した。さらに、吸収スペクトルから励起子生成のエネルギー、開放電圧 V_{OC} から CC 状態のエネルギーを決定した。これらをまとめると Fig. 1 のようになる。

CT 状態から FC 状態へのエネルギー障壁はそれぞれ 0.34 eV、0.29 eV となった。これらの値は、クーロン相互作用から予測される値 0.5 eV よりも小さく、エントロピーの寄与[4]により電荷解離が可能である。

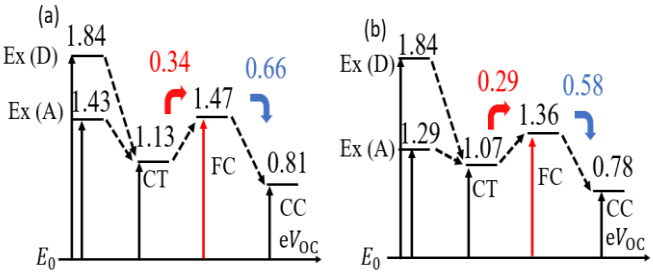

Fig. 1 Energy level diagrams of (a) PBDB-T-SF:Y6 and (b) PBDB-T-SF:ITIC-2F.

[1] H. Yoshida, *Chem. Phys. Lett.*, **539-540,** 180 (2012)
[2] 市川裕之、千葉大学修士論文 (2019)
[3] Y. Chang et al, *Mater. Horiz.*, **6,** 2094 (2019)
[4] B. Gregg, *J. Phys. Chem. Lett.*,**2**, 3013 (2011)

© 2020年 応用物理学会