ペリレンジイミドのベイ位置の修飾による有機太陽電池の電圧損失削減

Bay-Functionalization of Perylene Diimide for Reduction of Open-Circuit Voltage Loss in Organic Photovoltaics

分子研 [1], 総研大 [2], 静岡大工 [3]
○伊澤 誠一郎 [1,2], 藤本 圭佑 [3], 高橋 雅樹 [3], 平本 昌宏 [1,2]
IMS[1], SOKENDAI[2], Shizuoka Univ.[3]
○Seiichiro Izawa[1,2], Keisuke Fujimoto[3], Masaki Takahashi[3], Masahiro Hiramoto[1,2]
E-mail: izawa@ims.ac.jp

ペリレンジイミド誘導体は、優れた電子輸送特性や化学的安定性から有機太陽電池のフラーレン代替材料として研究が進められている。今回、ペリレン誘導体のベイ位置の選択的ブロモ化反応 [1] を用いて、ペリレンジイミドの４つのベイ位置を位置選択的に電子供与性基で置換した分子を開発した（Fig.1a: 4SubPDI）。4SubPDI ではベイ位置の置換基の立体障害により分子内ねじれ構造をとり、汎用有機溶媒に良好な溶解性を示した。そこでドナー分子に PTB7-Th を用いた有機太陽電池を測定したところ、1 sun の擬似太陽光照射下で、4SubPDI は参照分子と比較して、開放端電圧（V_{OC}）が 0.25 V も大幅に向上し、光電変換効率も 1.03%から 1.74%まで上昇した（Fig.1b）。この V_{OC} 向上の原因を解明するため、高感度 EQE 測定を行いガウス関数でフィッティングを行った（Fig.1c）。その結果、4SubPDI の電圧損失抑制は、主に S1 状態と電荷移動（CT）状態とのエネルギー差（qV_{CS}）と無輻射再結合損失（V_{NR}）が減少したためであることが分かった（Fig.1d）。これは置換基の導入により 4SubPDI の LUMO が上昇したことで、PTB7-Th の LUMO とのオフセットが小さくなり、電荷分離に要するエネルギー差を低減できたこと、さらに S1 と CT 状態とのエネルギー差が小さくなることで再結合の発光量子収率を向上できたためである。[2]

[1] M. Takahashi et al., *J. Org. Chem.*, *83*, 624-631 (2018). [2] K. Fujimoto, S. Izawa, M. Hiramoto, M. Takahashi et al., *submitted.*

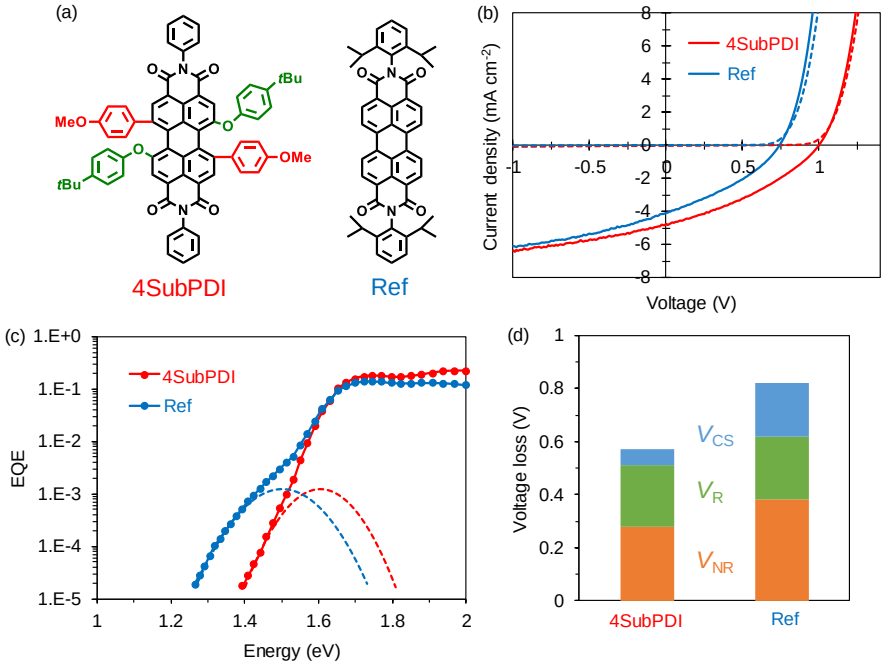

Fig. 1 (a) Chemical structure of 4SubPDI and reference molecule. (b) *J*–*V* curves. (c) High sensitive EQE spectra. (d) Breakdown of open-circuit voltage loss: voltage loss for charge separation (V_{CS}), radiative recombination (V_R), and non-radiative recombination (V_{NR}).

© 2020年 応用物理学会