

非フラーレン高分子太陽電池における高効率電荷生成とエネルギー損失の関係

Relationship between Efficient Charge Generation and Energy Loss in Nonfullerene Polymer Solar Cells

京大院工¹, JST さきがけ² °城内嶺¹, 齊藤俊晴¹, 夏田慎一郎¹, 玉井康成^{1,2}, 大北英生¹

Kyoto Univ.¹, JST PRESTO², °Rei Shirouchi¹, Toshiharu Saito¹, Shin-ichiro Natsuda¹

Yasunari Tamai^{1,2}, Hideo Ohkita¹

E-mail: shirouchi20r@photo.polym.kyoto-u.ac.jp

【緒言】高分子太陽電池には、従来の無機系太陽電池と比べて材料のバンドギャップエネルギー E_g と開放電圧 V_{OC} の差であるエネルギー損失 $E_g - qV_{OC}$ (q は電気素量) が大きいという克服すべき課題が存在する。その原因の一つは、有機系では電荷分離の駆動力として一重項励起状態と界面電荷移動状態のエネルギー差 (オフセット) を必要とするためである。興味深いことに、非フラーレン系電子アクセプター (NFA) を用いた高分子太陽電池では、低エネルギー損失と高効率を両立するものが多数報告されている^[1]。そこで本研究では、代表的な NFA の一種である Yn シリーズを用いた太陽電池の光電変換外部量子収率 (EQEPV) とエネルギー損失の関係について系統的に検討した。

【実験方法】広バンドギャップドナー高分子 PM6 および PBDB-T と狭バンドギャップ Yn 系 NFA (Y1, Y2, Y5, Y6, Y6N3, Y12, Y16) をそれぞれ組み合わせることで、HOMO オフセットの異なる計 14 種の太陽電池素子を作製し、電流-電圧 (J - V) 特性および EQEPV を測定した。吸収端から算出した E_g より、エネルギー損失を算出した。

【結果と考察】図 1a に代表的な例として、PM6/Y16, PM6/Y2, PM6/Y6, PBDB-T/Y2 素子の J - V 特性を示すように、開放電圧 V_{OC} の向上にともない短絡電流密度 J_{SC} が低下することが分かった。そこで EQEPV の最大値をエネルギー損失 $E_g - qV_{OC}$ に対してプロットしたものを図 1b に示す。エネルギー損失が 0.48 eV 以上の領域では EQEPV は 80% 程度の高い値を示すものの、エネルギー損失が 0.48 eV を下回ると EQEPV が急激に低下することが分かった。一方、図 1c に示すように、Yn の蛍光消光率 (PLQY) をエネルギー損失に対しプロットすると、EQEPV とほぼ同じ閾値以下で顕著な低下が見られた。この結果は、オフセットが小さくなりすぎたことで D/A 界面における電荷移動効率が低下することを示しており、EQEPV 低下の主要因の一つであると考えられる。以上の結果から、本研究で検討した非フラーレン系高分子太陽電池において高効率電荷生成が可能なエネルギー損失の閾値は 0.48 eV 程度であるといえる。この値は、報告されているフラーレン系太陽電池のエネルギー損失の閾値 0.60 eV^[2]よりも小さく、より小さなオフセットで電荷生成が可能であることを示唆している。

【参考文献】 [1] P. Cheng *et al.*, *Nat. Photonics*, **2018**, *12*, 131–142.

[2] W. Li *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, *137*, 2231–2234.

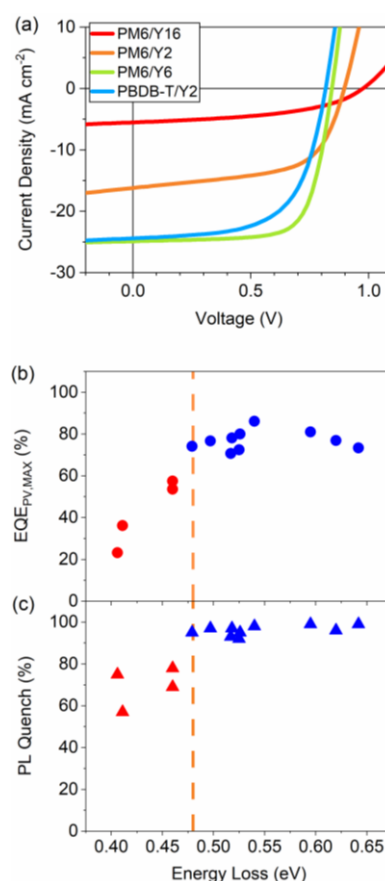


Figure 1. (a) J - V characteristics and energy-loss dependence of (b) maximum EQEPV and (c) PLQY of NFA polymer solar cells.