

非フラーレンアクセプタ Y6 の凝集構造中の面内配向

In-plane molecular alignment in aggregated non-fullerene acceptor Y6

理研 CEMS¹, 千葉大院理工², 千葉大院工³, 千葉大分子キラリティ⁴,

○中野 恭兵¹, 寺戸 航佑², 加地 由美子¹, 吉田 弘幸^{3,4}, 但馬 敬介¹

RIKEN CEMS¹, Chiba Univ.^{2,3,4},

○Kyohei Nakano¹, Kosuke Terado², Yumiko Kaji¹, Hiroyuki Yoshida^{3,4}, Keisuke Tajima¹

E-mail: kyohei.nakano@riken.jp

非フラーレンアクセプタ(non-fullerene acceptor: NFA)の開発により, 有機太陽電池の変換効率の向上が目覚ましい。とくに Y-series と呼ばれるジチエノチオフェン[3.2-b]-ピロロベンゾチアジアゾールを中心構造に持つ NFA 材料群は, 多様な電子ドナーポリマーとの組み合わせで高い性能を実現している。アクセプタ材料の設計指針を確立するには, なぜ Y-series が高い効率を示すのかを知る必要があると考えた。そこで Y-series の一つである Y6 と, ほぼ同じエネルギー準位・光吸収を持つ NFA である F8IC を用いたバルクヘテロジャンクション(BHJ)太陽電池を評価し, Y6 と F8IC の特性の違いをもとに, Y6 が優れたアクセプタとなる理由を明らかにすることを試みた。ドナー高分子は PBDB-T-SF で共通とし, BHJ 膜中のアクセプタ濃度を変えてその凝集状態と太陽電池特性の関連を調べた。

J_{sc} と FF のアクセプタ濃度依存性 (図 1b) を見ると, (1) アクセプタ濃度が低いときは両者に違いはなく, (2) 濃度が高くなると F8IC より Y6 の特性が良くなった。この結果は, Y6 が優れている理由が 1 分子の性質というよりも BHJ 膜中で凝集したときの特性にあることを示唆する。AFM 観察, XRD 回折測定, 電子状態測定では, Y6 と F8IC で大きな違いは見られなかった。一方で, エリプソメトリ測定による分子配向測定結果には違いが現れた。Y6 が凝集した薄膜では, 光吸収の面内成分が顕著になっており, Y6 の π 平面が in-plane 方向に強く配向していることを示した。この配向は XRD 測定ではほとんど検出されないため, 構造秩序性のない非晶質部分でも分子が配向していることが Y6 を用いた太陽電池の優れた特性につながっていると考えられる。

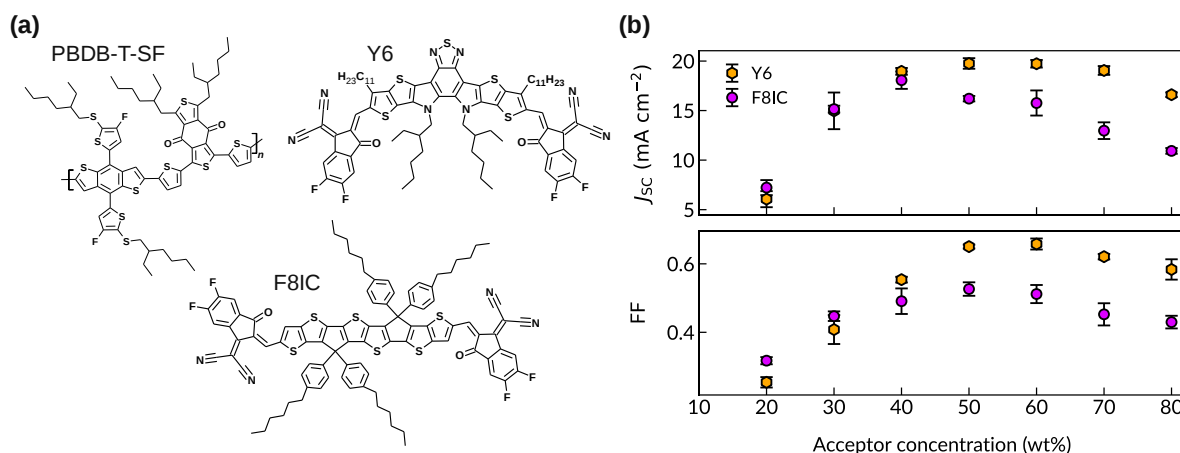


図 1: (a) PBDB-T-SF, Y6, F8IC の分子構造。(b) PBDB-T-SF:Y6, PBDB-T-SF:F8IC BHJ 素子の短絡電流密度と FF のアクセプタ濃度依存性