

高速 Fourier 変換を用いた有機太陽電池の電子物性のハイスループット測定 : シミュレーション

High throughput measurements of electronic transport properties of organic photovoltaics using

Fast Fourier Transform: simulation study

○岡田 淳之¹, 永瀬 隆^{1, 2}, 小林 隆史^{1, 2}, 内藤 裕義^{1, 2}

(1. 大阪府立大, 2. 大阪府立大分子エレクトロニックデバイス研)

○A Okada¹, T. Nagase^{1, 2}, T. Kobayashi^{1, 2}, H. Naito^{1, 2}

(1. Osaka Pref. Univ., 2. RIMED)

E-mail: atsushi.okada.oe@pe.osakafu-u.ac.jp

1. はじめに 機械学習による有機半導体、有機デバイス開発には、ハイスループットな電子物性評価法は望まれる。我々は、変調光電流(MPC)法により有機太陽電池(OPV)の電荷移動度を評価することで電子物性評価法としての有用性を示してきた[1]。MPC 法では周期的な変調を加えたレーザー光を OPV に照射し、その応答光電流を lockin 検出している。変調周波数を掃引するため自動測定が可能なものの 1 Hz~1 MHz の測定には約 10 分程度要する。そこで、多数の周波数を含む光励起信号を印加し、その応答光電流を Fourier 変換することにより短時間で光電流スペクトルを得ることができる。このような測定系では、機械学習のための大量のデータ収集の他、OPV の劣化のリアルタイム追跡が可能になる。本報告では入力信号として方形波信号を用いたシミュレーションを行うことで、本手法の有用性を示す。

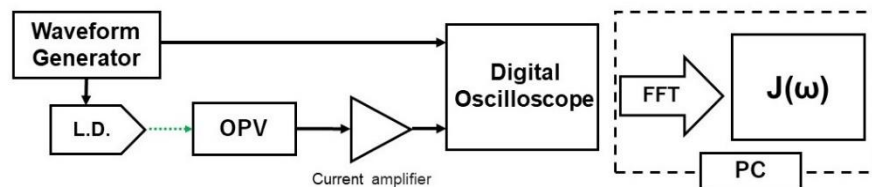


Fig. 1 Measurement system of FFT-based MPC.

2. シミュレーション 方形波を励起光信号とした測定系を仮定した (Fig. 1)。方形波を OPV の活性層に照射して、出力電流信号を得る。入力励起光信号と出力電流信号を高速 Fourier 変換 (fast Fourier Transform : FFT) を行い、MPC スペクトルを算出した。

3. 結果と考察 MPC 法では小信号条件下で電流連続の式

$$\mu_0 F \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = G(t)$$

から電荷密度 $n(x, t)$ を求め、光電流密度を計算することができる。 μ_0 は移動度、 F は活性層にかかる一様電界、 $G(t)$ は光生成レートである。 $G(t)$ を $G_0 + G_1 \exp(i\omega t)$ とすると、上式より光電流密度の解析解を次のように得られる。ここで、 G_0 は定常光成分、 G_1 は小信号変調光成分である。

$$J(\omega) = \frac{qG_1L}{\tau_t^2\omega^2} [1 - i\tau_t\omega - \exp(-i\tau_t\omega)]$$

$J(\omega)$ の虚数成分の $-\text{Im}[J]$ のピーク周波数 f_{max} から $\mu = L^2 f_{\text{max}} / V$ によって電荷移動度 μ を求めることができる。ここで、 L は測定試料の膜厚、 V は活性層の実効的な電圧、 τ_t は $\tau_t = L / \mu F$ であらわされる電荷の走行時間である。Fig. 2 に本手法を用いて算出した光電流密度の虚数成分 ($-\text{Im}[J]$) の周波数特性を示す。比較のため上式 $J(\omega)$ の虚数成分も示している。これらのスペクトル一致しており、FFT を用いて電荷移動度を算出することが可能であることがわかった。入力信号として周期 200 Hz の方形波を用いているため、周波数掃引する場合と比較して、数秒程度の測定が可能になり大幅な測定時間短縮が可能となる。当日は Time-stretch pulse から生成した方形波列などの入力信号についても検討し、その得失を議論する。

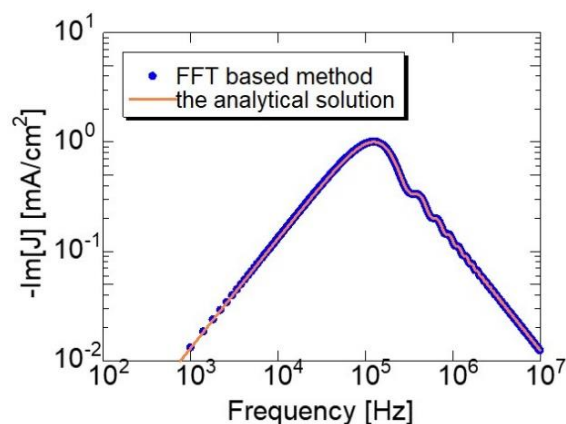


Fig. 2 Frequency dependence of $-\text{Im}[J]$ calculated from FFT-based method and the analytical solution of $J(\omega)$.

参考文献 [1] H. Nojima *et al.*, Sci. Rep. 9, 20346 (2019).

謝辞 本研究の一部は、科学研究費補(JP19H02599、JP20H02716、JP 20K1007、JP21H04564)の助成を受けた。