ドナーとアクセプターの極性が反転した有機太陽電池

Organic photovoltaics driven by reversed polarities of donor and acceptor

産総研 [1]　細貝 彩子 [1]，°赤池 幸紀 [1]

AIST [1] Ayako Hosokai[1], °Kouki Akaike[1]

E-mail: kouki.akaike@aist.go.jp

有機／金属界面、有機半導体ヘテロ界面の電子準位接続は、静電的なモデルで記述され、有機半導体の膜厚を段階的に増やし、光電子分光で調べた結果とよく一致する[1]。有機太陽電池(OPV)に用いられるドナーとアクセプターの界面も例外ではない。典型的なドナー／アクセプター(DA)界面である亜鉛フタロシアニン(ZnPc)と C_{60} の界面では、構造無秩序化による特異な電子準位接続の存在が明らかになった[2]。標準的な OPV では、高仕事関数電極側にホール輸送を担うドナーが、低仕事関数側に電子を輸送するアクセプターが接触するよう活性層を設計する。それとは逆の積層順序にした場合、例えば、MoO_3/C_{60}/ZnPc 界面の電子準位接続を調べると、C_{60} 層を横切って直線的な電位勾配が生じ、ZnPc 側にはバンドの曲がりに似たエネルギーシフトが下向きに生じる[3]。このようなエネルギー構造では、DA 界面での電荷再結合が有利に起きることが予想される(Fig. 1 挿絵)。本研究では、それを逆手にとり、アクセプターにホール、ドナーに電子を輸送させて光電流を取り出す、反転型 OPV の駆動の可能性を探った。

反転型 OPV の基本構造は、ITO/MoO_3/C_{60}/サブフタロシアニン(SubPc)/バソキュプロイン(BCP)/Al で、大気曝露せずに作製した。Fig. 1 に擬似太陽光照射下で測定した電流-電圧(I-V)測定の結果を示す。短絡電流密度(J_{SC})は 0.5 mA cm^{-2} 程度に留まり、フィルファクターが低いものの、光電流を取り出し可能なことがわかる。開放端電圧(V_{OC})は 1.4 V に近い。SubPc/C_{60} 界面を用いた標準的な OPV の V_{OC} は 1 V 弱であり[4]、それよりも高くなる。これは、最高被占軌道(HOMO)の深い C_{60} にホールを、最低空軌道(LUMO)が相対的に浅い SubPc に電子を輸送させることで、擬フェルミ準位の差が広がったことが原因である。ITO 表面を高仕事関数化する MoO_3 を除くと J_{SC} と V_{OC} ともに下がることから、電極界面で励起子が界面電場で解離し、生成した C_{60} の電子と SubPc のホールが再結合し、素子が駆動したと考えられる。

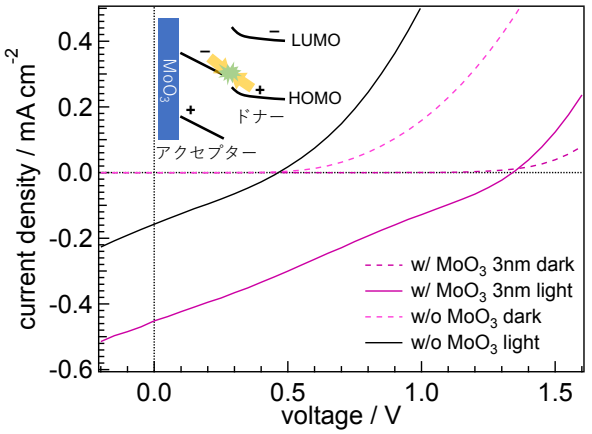

Fig. 1 I-V curves of OPVs in reverse operation. Inset shows the energy diagram near the DA interface with reversed stacking.

＜参考文献＞

[1] Oehzelt *et al.*, *Nat. Commun.*, **5**, 4174 (2014).

[2] Akaike *et al.*, *Adv. Mater. Interfaces*, **5**, 1500232 (2015).

[3] Akaike *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **105**, 223303 (2014).

[4] Mutolo *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 8108 (2006).

© 2021年 応用物理学会