

# 分子軌道を制御した非フラーレン型 n 材料の合成と物性 および光電変換特性

## Design and synthesis of non-fullerene n-type materials with spatially separated molecular orbitals within the molecular structure

広大院先進理工, °(M1)柳井 政樹, 三木江 翼, 斎藤 慎彦, 尾坂 格

Hiroshima Univ. , °Masaki Yanai, Tsubasa Mikie, Masahiko Saito, Itaru Osaka

E-mail: iosaka@hiroshima-u.ac.jp

### 【緒言】

OPV では、励起子におけるホールと電子のクーロン力が強いため、電荷分離を促進するために p/n 材料間の HOMO または LUMO のオフセットエネルギーが必要である。しかし、オフセットエネルギーは電圧損失の要因である。そのため、小さなオフセットで電荷分離を促進させることは、高効率化に向けて重要である。そこで我々は、分子内における HOMO と LUMO の軌道を分離することで、ホールと電子のクーロン力を弱め、小さなオフセットでも電荷分離が可能になるのではないかと考えた。本研究では、DFT 計算を駆使し、HOMO と LUMO が分子内で分離した MY1 と、構造異性体であり HOMO と LUMO が同じ部位に分布した MY2 を設計・合成し、基本物性および光電変換特性について調査した。

### 【結果と考察】

MY1 および MY2 の薄膜における UV-vis 吸収スペクトルを Figure 2 に示す。MY1 では 0-0 遷移 (HOMO-LUMO 遷移) の吸光係数は 0-1 遷移に比べて小さいが、MY2 では 0-0 遷移の吸光係数は 0-1 遷移に比べて大きい。これは、MY1 の HOMO と LUMO の重なりが小さいこと示唆しており、HOMO と LUMO が分子内で分離されていることが考えられる。吸収端から見積もった MY1 および MY2 のバンドギャップ ( $E_g^{opt}$ ) はそれぞれ、1.46 eV および 1.45 eV であったが、サイクリックボルタンメトリから見積もった HOMO-LUMO ギャップ ( $E_g^{CV}$ ) は MY1 において 1.45 eV、MY2 において 1.69 eV であった。 $E_g^{opt} - E_g^{CV}$  により求められる励起子束縛エネルギーは、MY1 で -0.01 eV と MY2 の 0.24 eV に比べて小さな値を示した。これは、励起子のクーロン力が弱まっていると解釈することができる。当日はこれらの材料を用いた光電変換特性についても議論する。

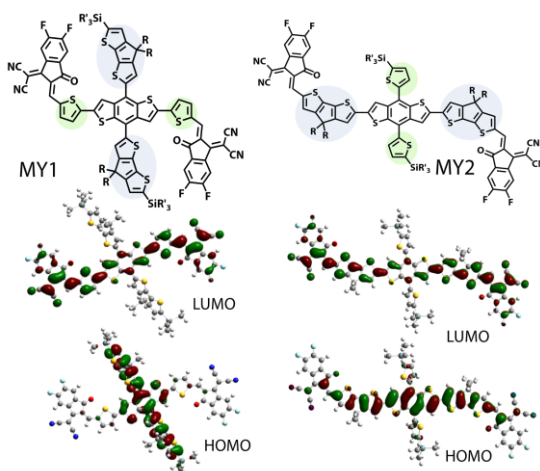


Figure 1. Molecular structures and molecular orbitals from DFT calculation (B3LYP 6-31g(d)).

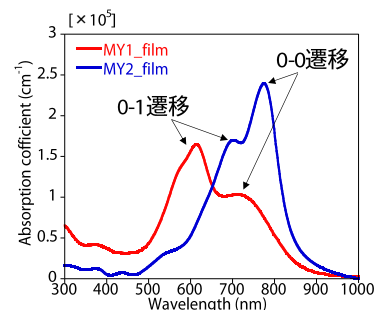


Figure 2. UV-vis absorption spectra of MY1 and MY2.