

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： 二分子再結合定数の評価

High throughput measurements of electronic properties of organic photovoltaics using Fast Fourier Transform: Measurement of bimolecular recombination coefficients

○(M1)岡田 淳之¹, 奥野 友基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, Y. Okuno¹, 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 機械学習は高性能な有機デバイス設計へ向けた材料探索に有効である。しかし精度の良い機械学習モデルを作成するためには大量の電子物性に関するデータが必要となる。短時間で大量のデータを取得できるハイスループット測定を行うことができれば、効率の良いデバイス設計が短期間で可能となる。我々は高速 Fourier 変換 (FFT) を用いた変調光電流 (MPC) 法により、有機薄膜太陽電池 (OPV) の電荷移動度を従来手法の 70 倍のスピードで測定できる測定系を構築した[1]。移動度の他に OPV の効率に影響を与える電子物性には二分子再結合定数 (BR 定数) がある。BR 定数を評価する手法として、変調光起電力の周波数依存性より BR 定数の決定をする変調光起電力法 (MPV 法) がある[2]。従来手法では lockin 検出を行うため、1 Hz ~ 1 MHz の周波数掃引する測定には 10 分程度の時間が必要になる。そこで我々は方形波信号を入力信号として、その応答電圧信号を時間領域で記録し、入力・応答信号を Fourier 変換することにより短時間で変調光起電力の周波数依存性を得る測定系を構築した。本報告では lockin 検出と FFT での BR 定数の値を比較するとともにデータ取得時間も比較、本手法の有用性を示す。

2. 実験 ITO/ZnO/P3HT(poly(3-hexylthiophene2,5-diyl)):PCBM([6,6]-phenyl-C₆₁butyric acid methyl ester)/MoO₃/Al なる素子構造のバルク

ヘテロ接合 OPV を作製し、封止剤により封止した。素子面積は 4 mm² である。測定系を Fig. 1 に示す。測定する周波数域は 100 Hz-1 MHz である。任意波形発生装置 (NF Corporation: WF1968) により方形波信号を発生する青色レーザー (488 nm) とソーラーシミュレータ (AM1.5G, 10~100 mW/cm²) を励起光とした。OPV の開放起電力をデジタル

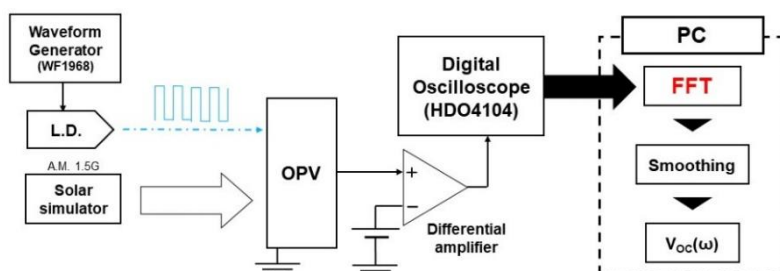


Fig. 1 Measurement system of MPV spectrum with an FFT based method.

オシロスコープ (Teledyne LeCroy: HDO4104) により記録、PC 上で FFT し平滑化処理後、MPV スペクトルを算出した。比較のため、lockin amplifier (Zurich Instruments: HF2LI) でも MPV 測定を行った。

3. 結果と考察 P3HT の重量比 40 wt% の OPV の変調光起電力の周波数依存性を本手法で測定した。その虚数成分を Fig. 2 に示す。Fig. 2 のピーク周波数 (f_{peak}) には励起光強度依存性があり、 f_{peak} から電荷の実効寿命 τ_{eff} を算出することができる。二分子再結合過程による損失のみを考慮した場合、 $\tau_{\text{eff}}^{-1} = \sqrt{G_0 \gamma}$ である。 G_0 は AM1.5G 照射による光電荷の生成速度で、 γ は BR 定数である。Fig. 3 に実効寿命の励起光強度依存性を示す。実効寿命と励起光強度の関係は傾き 0.5 の直線となり、本手法で決定した γ の値は $2.4 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ となった。同一の OPV において lockin 検出を用いて算出したの値は $3.0 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ であり、本手法による値とほぼ同等の値を得ることができた。またデータ取得時間については、lockin 検出を用いた場合は 358.8 秒であったが、本手法では 5.0 秒と 98.6 % の大幅な時間短縮を実現できた。

参考文献 [1] 岡田他, 第 82 回秋季応用物理学会 22p-P05-8 (2021). [2] 森他, 第 81 回秋季応用物理学会 10p-Z11-5 (2020).

謝辞 本研究の一部は、科学研究費補(JP19H02599, JP20H02716, JP20K21007, JP21H04564)の助成を受けた。

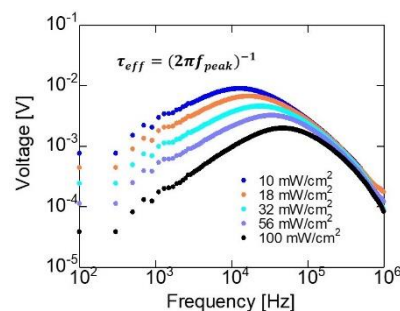


Fig. 2 Frequency dependence of $-\text{Im}[V]$ by means of an FFT based method.

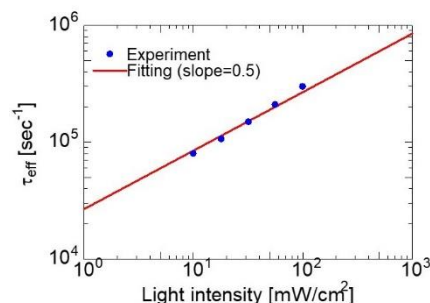


Fig. 3 Light intensity dependences of τ_{eff}^{-1}