

電荷移動ダイナミクス及び光吸収に基づく 有機太陽電池素子の最適膜厚の定量解釈

Quantifying the Optimal Thickness in Polymer:Fullerene Solar Cells from the Analysis of Charge Transport Dynamics and Photoabsorption

阪大院工¹, ICS-OTRI² ○(D)李 紹先¹, 浜田 史也¹, 西久保 綾佑^{1,2}, 佐伯 昭紀^{1,2}

Osaka Univ.¹, ICS-OTRI², °Shaoxian Li¹, Fumiya Hamada¹, Ryosuke Nishikubo^{1,2}, Akinori Saeki^{1,2}

E-mail: saeki@chem.eng.osaka-u.ac.jp

バルクヘテロ接合 (BHJ) 有機太陽電池 (OSC) の光活性層の最適膜厚 (L_{opt}) は、通常 200 nm 未満である。大面積プロセスでは厚い L_{opt} が望ましく、その定量的な理解が必要である。しかし、これまでは OSC の L_{opt} の定量化に関する知見は不十分である。本研究^[1] では、キャリア輸送長、空間電荷効果及び光吸収のデータを統合することで、OSC の L_{opt} を決定する半経験定量モデルを提案した (図 1)。キャリア輸送長については、飛行時間 (TOF) と時間分解マイクロ波伝導度法 (TRMC) の同時測定 (TOF-TRMC 法)^[2] により、電子/正孔移動度の緩和を評価し、キャリアの有効拡散長 (L_{di}) を求めた。空間電荷効果の影響については、電子/正孔の TOF 移動度のバランスを考慮し、半経験式を用いて校正を行った。また薄膜の光吸収スペクトルと AM 1.5G スペクトルを基に実効吸収係数を算出した。このモデルに基づいて 3 種類のポリマー: フラーレン OSC (P3HT、PffBT4T、および PCPDTBT と PCBM のブレンド) において L_{opt} の導出を行った。結果、 L_{opt} は PCPDTBT:PC₇₁BM で約 100 nm、P3HT:PCBM で約 150 nm、PffBT4T:PCBM で約 300 nm と計算され、文献の実験値とそれぞれ良好な一致を示した (図 2)。更に、本モデルは太陽電池静電容量シミュレーター

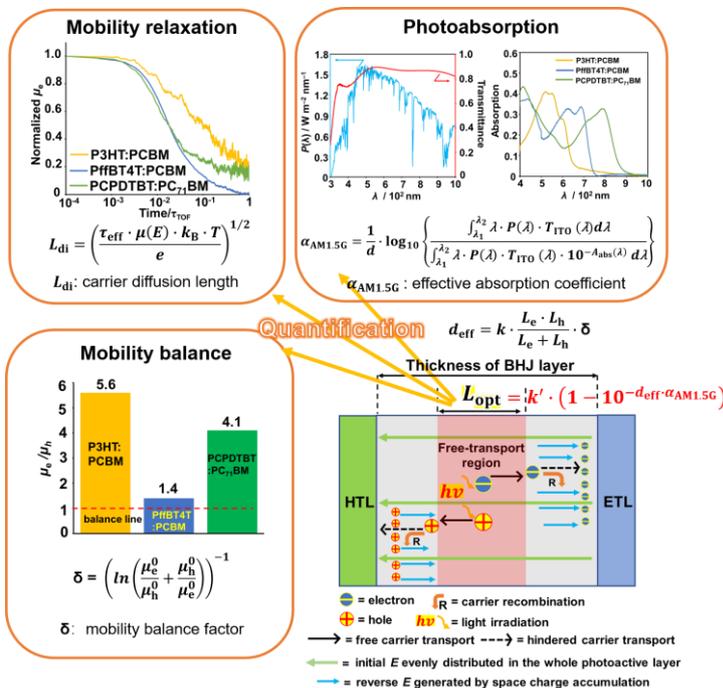


図 1. OSC 最適膜厚の定量決定モデルの要素(移動度緩和、移動度バランス、光吸収)、計算方法及び原理の概略図。

電池静電容量シミュレーター (SCAPS) の計算結果とも一致することが確認された。このように本研究では OSC の L_{opt} の定量解釈に有効な定量数式モデルを確立し、今後の L_{opt} 向上のために有用な知見を与えると期待される。

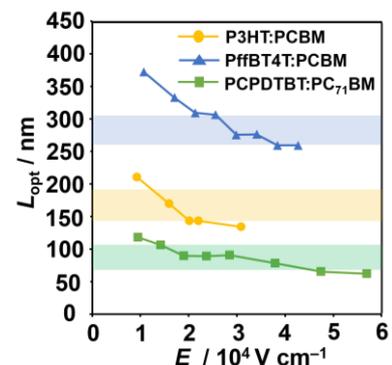


図 2. 計算された L_{opt} (曲線) と其々の L_{opt} 実験値範囲(カラーリボン)の比較。横軸は外部電場強度。

[1] S. Li, F. Hamada, R. Nishikubo, A. Saeki, *Sustainable Energy & Fuels*, **2022**, DOI: 10.1039/d1se01228b.

[2] Y. Shimata, A. Saeki, *J. Phys. Chem. C* **2017**, *121*, 18351.