

有機太陽電池材料の最適なバンドギャップはいくらか？

What is the optimum bandgap of the organic materials for solar cells?

千葉大院工¹, 千葉大分子キラリティ², 理研³, 千葉大院理工⁴, 広大院工⁵

○吉田 弘幸^{1,2}, 中野 恭兵³, 杉江 藍⁴, 但馬 敬介³, 尾坂 格⁵

Chiba Univ.^{1,2,3}, RIKEN⁴, Hiroshima Univ.⁵

○Hiroyuki Yoshida^{1,2}, Kyohei Nakano³, Ai Sugie⁴, Keisuke Tajima³, Itaru Osaka⁵

E-mail: hyoshida@chiba-u.jp

有機半導体の励起子束縛エネルギーは 0.5 ~ 1 eV と大きいため、有機太陽電池では励起子束縛エネルギーは電圧損失の原因となる。しかし、これまで高精度で有機半導体の励起子束縛エネルギーを決定した例はなく、励起子束縛エネルギーと有機太陽電池の光電変換効率の関係についての定量的な議論はない。本研究では、低エネルギー逆光電子分光法 (LEIPS)¹⁾と紫外光電子分光法 (UPS) からバンドギャップ E_G^{trans} を精密に決定し、光吸収スペクトルから光学ギャップ E_G^{opt} を求めた。特に誤差の大きい E_G^{trans} については、測定条件を変えて複数回の測定から統計的に誤差を見積もった。こうして E_G^{trans} と E_G^{opt} の差として励起子束縛エネルギー ΔE_{EX} を 0.1 eV の精度で決定した。この方法を、フラーレン系アクセプター(FA)4 種類、非フラーレンアクセプター(NFA)15 種類、狭バンドギャップポリマー14 種類、有機 EL 材料 4 種類に適用した。図 1 に励起子束縛エネルギー ΔE_{EX} とバンドギャップ E_G^{trans} の関係を示す。 ΔE_{EX} とバンドギャップには次式のような相関があることが分かった、

$$\Delta E_{\text{EX}} \approx 1/4 E_G^{\text{trans}} \approx 1/3 E_G^{\text{opt}}. \quad (1)$$

この関係を基に有機太陽電池の光学ギャップと光電変換効率の関係を予測した (図 2)。従来の予測では電圧損失はバンドギャップにほとんど依存せず、 E_G^{opt} は 1.4 eV 付近で最大効率を得られるとされる²⁾。電圧損失が ΔE_{EX} と等しいと仮定し、本研究の (1) 式を用いると、従来の予測より最適バンドギャップは 0.2~0.3 eV 低く、約 1.1 eV で最大効率を得られることがわかった。

[1] H. Yoshida, Chem. Phys. Lett. **539-540**, 180 (2012); J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **204**, 116 (2015).

[2] M. C. Scharber, et al., Adv. Mater., **18**, 789-794 (2006); J. Hou, et al., Nature Mat., **17**, 119 (2018).

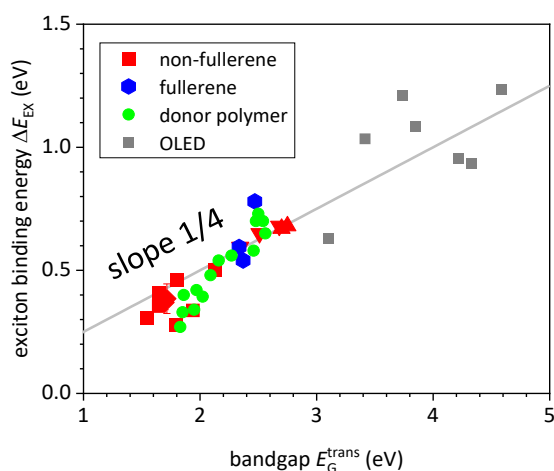


Fig. 1: Relationship between exciton binding energy ΔE_{EX} and transport bandgap E_G^{trans} .

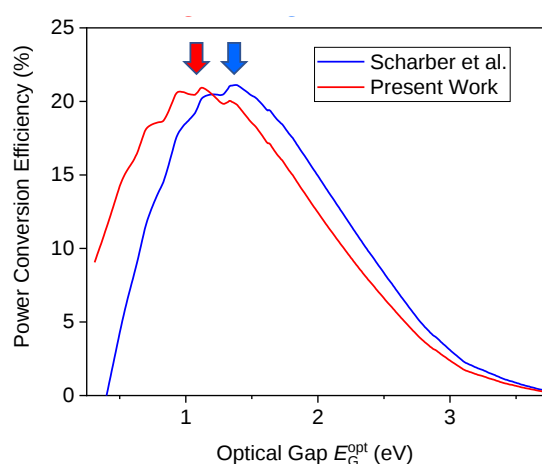


Fig. 2: Efficiency prediction for organic solar cells as a function of optical bandgap E_G^{opt} .