

電圧損失の小さい非フラーレン型太陽電池における電荷生成： ドナーポリマーの剛直性が及ぼす影響の調査

Charge generation in nonfullerene organic photovoltaics with low voltage loss:
Investigation of impact of polymer rigidity

広大院先進理工¹, 京大院工², 理研 GEMS³ ◦三木江 翼¹, 駿河 翔太¹, 佐藤 友揮²,
キム ヒョンド², 大北 英生², 中野 恭兵³, 但馬 敬介³, 尾坂 格¹

Hiroshima Univ.¹, Kyoto Univ.², Riken CEMS³, ◦Tsubasa Miki¹, Shota Suruga¹, Yuki Sato²,
Hyung Do Kim², Hideo Ohkita², Kyohei Nakano³, Keisuke Tajima³, Itaru Osaka¹

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

【緒言】

有機薄膜太陽電池 (OPV) は、無機太陽電池に比べて電圧損失、特に無輻射失活に由来する電圧損失 (ΔV_{nr}) が大きいと、バンドギャップに対して得られる開放電圧 (V_{oc}) が小さい^[1]。そのため、OPV の ΔV_{nr} 低減は重要課題である。しかし、 ΔV_{nr} は電荷分離の駆動力である一重項励起状態と電荷移動状態のエネルギー差 (ΔE) に強く関連するため、 ΔV_{nr} の低減は電荷生成効率の低下をもたらす^[2]。すなわち、OPV の更なる高効率化には、 ΔV_{nr} と電荷生成のトレードオフ解消が必要である。当研究グループで開発されたジチエノナフトビスチアジアゾール (TNT) を有する半導体ポリマー PTNT1-F (Fig. 1a) は、非フラーレンアクセプター (NFA) と組み合わせることで、小さな ΔV_{nr} にも関わらず、高い電荷生成効率を示した。この要因について、我々は、PTNT1-F の剛直なポリマー主鎖が p/n 界面において効率的な電荷分離をもたらしたと考えている。そこで本研究では、PTNT1-F とベンチマークドナーポリマーである PM6 や D18 の NFA 混合膜における物性や光電変換特性を比較し、ポリマー主鎖の剛直性が電荷生成に及ぼす影響について調査した。

【結果と考察】

PTNT1-F は PM6 や D18 よりも低い HOMO 準位を示し、これと相関して、NFA である Y12 と組み合わせた OPV 素子において、PTNT1-F は PM6 や D18 よりも小さい ΔV_{nr} を示した。一方、素子の電荷生成効率を評価したところ、PTNT1-F は PM6 や D18 に匹敵する高い値を示した。すなわち、PTNT1-F は小さい ΔV_{nr} と高い電荷生成効率を両立する高性能ポリマーである。この要因を調べるため、ポリマーの HOMO の状態密度 (DOS) を評価したところ、PTNT1-F では単膜と Y12 混合膜の値がほとんど変化しないのに対し (Fig. 1b)、PM6 や D18 では単膜に比べて混合膜の値が大きくなるのがわかった。この結果は、PTNT1-F 主鎖が Y12 混合膜中においても高い剛直性を維持しており、これにより電荷分離が効率的に生じたことを示唆している。

【参考文献】 [1] *Nat. Photonics* **2020**, *14*, 300. [2] *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 6362.

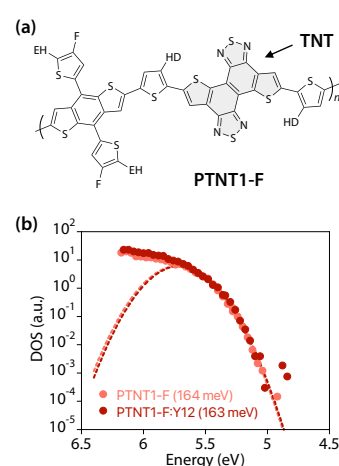


Fig. 1. a) Chemical structures of PTNT1-F. b) HOMO density of states (DOS) of PTNT1-F in pristine and Y12 blend films.