

PCBM/PCPDTBT 界面における電荷分離・再結合過程に関する理論計算による検討

○田代 基慶¹, 河東田 道夫², 今村 穰³¹東洋大, ²理研 AICS, ³首都大

tashiro046@toyo.jp

有機薄膜型太陽電池では、ドナー・アクセプター界面の性質が太陽電池の機能に対して重要な役割を果たす。この点において、cyclopentadithiophene-benzothiadiazole コポリマー (PCPDTBT) は興味深い性質を実験で示している。PCPDTBT の側鎖が 2-ethylhexyl (EH) の場合、界面に対して PCPDTBT は“face-on” 的な配置が支配的である。一方で、側鎖が n-dodecyl (C12) や n-hexadecanyl (C16) の場合、界面での配向は“edge-on” 的なものが支配的となる。大阪大の佐伯らは時間分解マイクロ波伝導度法 (TRMC) を用いた PCBM / PCPDTBT (EH, C12, C16) 界面の測定を行い、側鎖が EH である方が C12, C16 の場合よりも電荷分離・電荷再結合が早くなることを見出している。我々はこの TRMC の実験結果を解釈するため PCBM / PCPDTBT 界面に対する分子動力学計算、モノマー対に対する電子状態計算などを行い界面での電荷分離・電荷再結合率を推定した。計算結果によると“face-on”配置の方が“edge-on”配置に比べてドナー・アクセプター間の距離が短くなる傾向が見られ、このことが電荷分離・電荷再結合効率の違いに影響していると考えられる。

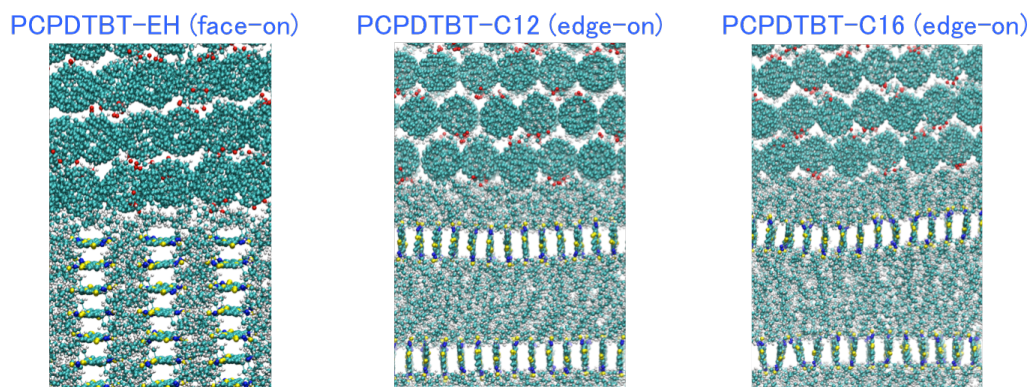


Fig. 1. Structure of PCBM/PCPDTBT interface obtained by molecular dynamics simulations.

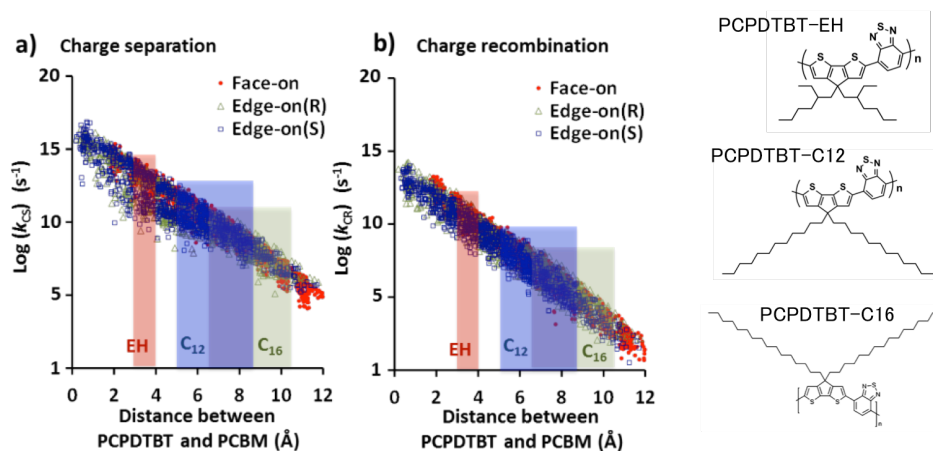


Fig. 2. Charge separation rates (left) and recombination rates (right) calculated on various relative configurations of PCBM and PCPDTBT.