

有機薄膜太陽電池の電荷分離機構におけるモルフォロジーの影響

○川嶋 英佑¹, 藤井 幹也¹, 山下 晃一¹¹東大院工

kawashima@tcl.t.u-tokyo.ac.jp

1. 緒言 有機薄膜太陽電池 (organic photovoltaics, OPV) は次世代の光電変換デバイスとして注目されているが, 変換効率はシリコン系 (20 %) に比べ 11 % と低く [1], 今後の普及には高効率化が望まれている. 高効率化には新規材料探索に加え, 製造条件の最適化も重要である. OPV の 10 nm 程度の微細な相分離構造をモルフォロジーと呼び, 電荷の生成及び再結合に影響する. モルフォロジーは溶媒乾燥速度やアニーリング温度等の製造条件に依存し, 光電変換効率を左右することが知られている. しかし, これまで製造条件については実験的に調べられているものの, 変換効率に影響を及ぼす原理や最適化指針は得られていない.

本研究では OPV のモルフォロジー制御並びに変換効率の汎用的なシミュレーション法を開発し, モルフォロジーの製造条件への依存性と, 光電変換効率のモルフォロジーへの依存性を明らかにした.

2. 手法 Reptation による温度制御下でのモルフォロジー生成と, Dynamic Monte Carlo による光電変換を組み合わせる方法論を開発し, 創電並びに過渡吸収分光を数値計算した. これにより, アニーリング温度, モルフォロジー, 変換効率の関係について考察した.

2.1. Reptation 管模型の reptation を Metropolis Monte Carlo 法 [2] を用いて, デバイススケール (150 nm 立方) で高分子と低分子を陽に扱いモルフォロジーを生成した. 逆温度 β と相互作用パラメータ $\Delta\epsilon$ を設定し, 界面面積やドメインサイズ等を考察した.

2.2. Dynamic Monte Carlo 各創電素過程を確率モデル化し, Dynamic Monte Carlo 法 [3] を用いて reptation で生成した各モルフォロジーについて光電変換並びに過渡吸収分光を 150 nm 立方の系で数値実験し, モルフォロジー依存性を考察した.

3. 結果と考察

3.1. Reptation 生成したモルフォロジーの一部を図 1 に示す. アニーリングによってドメインの成長が起こり, 特に, 拡散障壁と自由拡散の競合で界面面積が最小値を持つことがわかった ($\beta \Delta\epsilon = -1$).

3.2. Dynamic Monte Carlo 明電流の数値実験 (図 2) より, 短絡電流密度や変換効率だけでなく開放電圧もモルフォロジーに依存することが明らかとなった. また, 過渡吸収の数値実験 (図 3) により, モルフォロジー, 特にドメインサイズが電荷生成及び分離のダイナミクスに影響を及ぼすことを明らかにした.

以上より, アニーリング温度によりモルフォロジー並びに変換効率を制御できるということを理論的な観点から初めて示した [4].

Reference

- Green, M. A. *et al. Prog. Photovolt: Res. Appl.* **23**, 1–9 (2015).
- Frost, J. M. *et al. Nano Lett.* **6**, 1674–1681 (2006).
- Meng, L. *et al. J. Chem. Phys.* **134**, 124102 (2011).
- Kawashima, E.; Fujii, M.; Yamashita, K. *J. Phys. Chem. C* submitted.

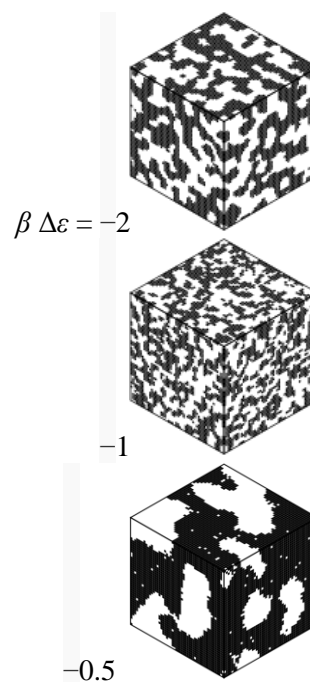


図 1. 生成したモルフォロジー. 白: 高分子, 黒: 低分子.

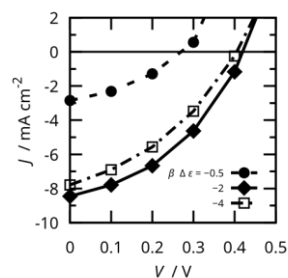


図 2. 明電流のモルフォロジー依存性.

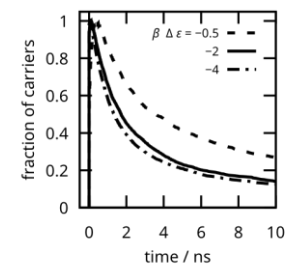


図 3. 過渡吸収分光のモルフォロジー依存性.