

両末端にオクチルフタルイミド基を有する n型有機半導体

望月 博孝¹・橘 浩昭²・鈴木 聡美¹

¹産業技術総合研究所 太陽光発電研究センター 有機系薄膜チーム

²産業技術総合研究所 電子光技術研究部門 分子集積デバイスグループ

研究の目的

- 太陽電池をはじめ、有機エレクトロニクスデバイスのn型半導体材料はフラーレン誘導体を中心に研究開発されてきた。
- 一方で、相溶性や光電子特性など種々の特性を精密に制御できる非フラーレン系n型半導体材料 (NFS) が注目されている。[1,2]
- フタルイミド基は電子吸引性であることが知られ、最近、それを有するNFSが報告されており、良好な特性を示している。[3,4]
- 本研究では、チオフェン-ピニレン骨格と両末端にフタルイミド基を有する3種類の新規NFSを合成した。さらにそれらの光電子特性、及び太陽電池特性も評価したので報告する。

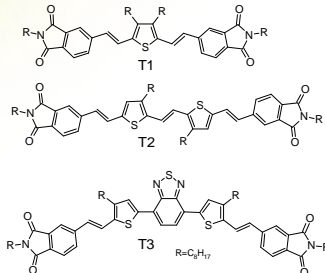


図1 新規NFSの化学構造

実験

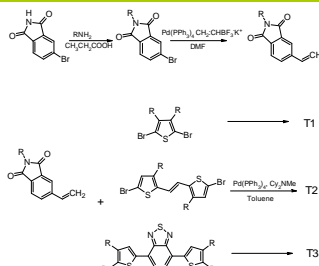


図2 新規NFSの合成スキーム

- 新規NFSはヘック反応により合成した。
- 評価する太陽電池は、p型半導体にポリ(3-ヘキシルチオフェン)(P3HT)を用い、順構造で作製した。活性相はバルケドヘテロジャンクション (BHJ) である。

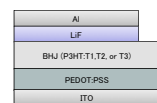


図3 太陽電池の構成図

結果

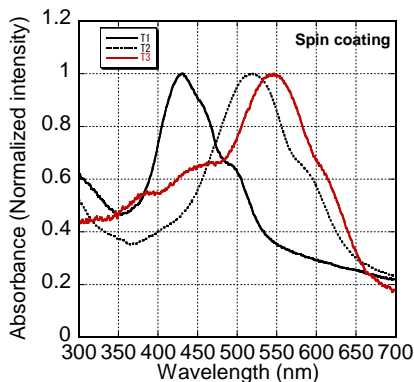


図4 固体膜での吸収スペクトル

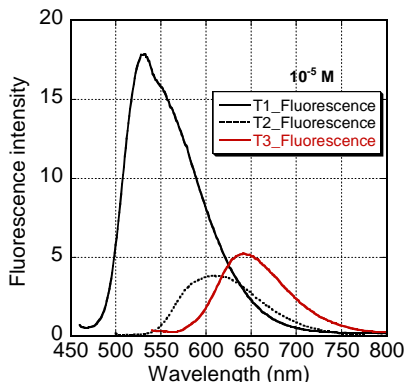


図5 溶液中での発光スペクトル

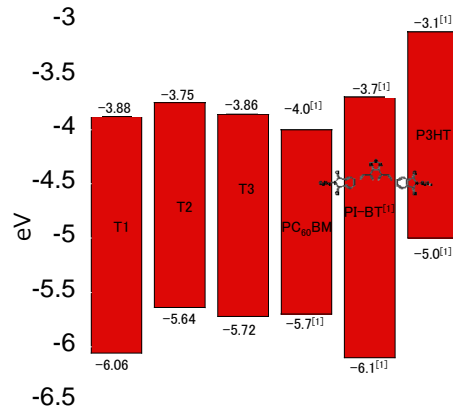


図6 エネルギーダイアグラム

結果

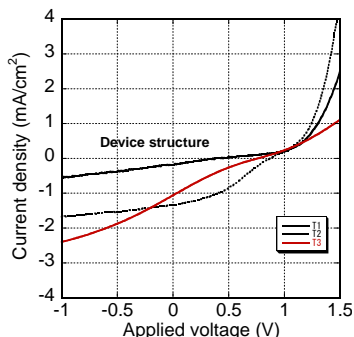


図7 新規NFSとP3HTを用いた太陽電池のV-I曲線

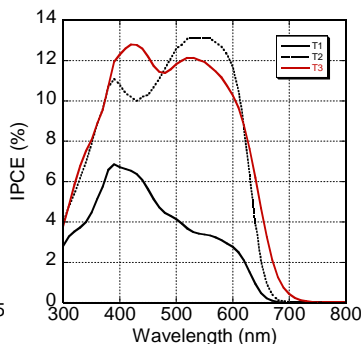


図8 太陽電池のIPCE

表1 各デバイスの太陽電池パラメーター

Device	J_{sc} / mA \cdot cm $^{-2}$	V_{oc} / V	Fill factor	PCE/ %
P3HT:T1	0.18	0.45	0.24	0.02
P3HT:T2	1.33	0.87	0.37	0.43
P3HT:T3	1.06	0.76	0.20	0.16
P3HT:PC ₆₀ B M(10:7)	8.28	0.62	0.44	2.24

考察

- 固体膜での吸収はT1、T2、T3の順で長波長側にシフトした。ベンゾチアジアゾール環の導入は吸収の広帯域化に有効である。すなわち、バンドギャップ(BG)の低下にも効果がある。
- 3種のNFSのイオン化ポテンシャル (IP)値はどれも-5.5 eV未満であった。
- T2のIP値は3種の中で最も高いことから、チオフェン-ピニレン部位の導入はIP値の上昇に有効である。またT1に比べT2のBGが低下した理由は、その導入によって共役長が広がるためと考えている。
- P3HT:T1デバイスは、太陽電池特性として十分ではなかった。一つのチオフェン環の導入では電流増大への寄与が小さいと考えている。
- 今回合成した2種のNFSで作製したデバイスは、フラーレン誘導体 (PC₆₀BM)を用いたデバイスより開放電圧 (V_{oc})が高かった。
- P3HT:T2デバイスは最も短絡電流密度 (J_{sc})が高く、チオフェン-ピニレン部位の導入は電流値の上昇に効果的である。

結論

- 両末端にフタルイミド基を有する3種の新規NFSを合成・評価した。
- 中心部に種々の機能部位を導入することでNFSの光電子特性は制御可能である。
- 吸収の広帯域化にはベンゾチアジアゾール環の導入が効果的である。
- チオフェン-ピニレン部位の導入は電流値の増加に有効である。

参考文献

- [1] J. T. Bloking et al., Chem. Mater. 2011, **23**, 5484.
- [2] J. Zhao et al., Energy Environ. Sci. 2015, **8**, 520.
- [3] S. Karak et al., Appl. Phys. Lett. 2010, **97**, 43306.
- [4] Y. Zang et al., Adv. Mater. 2014, **26**, 5708.