

(様式第4号)

高分子有機半導体デバイスの劣化メカニズムの解析 Degradation mechanisms of polymer organic semiconductor device

林靖彦, 徳永智春

Yasuhiko HAYASHI, Tomoharu TOKUNAGA

名古屋工業大学, 名古屋大学

Nagoya Institute of Technology, Nagoya University

1. 概要

P3HT (Poly(3-hexylthiophene-2,5-diyl))と PCBM の有機混合膜は近年研究競争が激しく、特に、有機太陽電池 (Organic Solar Cell: OSC) の分野では光電変換効率の向上に注力されているが、実用化への問題点として OSC の低い光電変換効率に加え、特性の急速劣化 (耐久性) が極めて短いという点がある。本研究では、シンクロトロン X 線回折法を用いて劣化のメカニズムを探る実験を実施する準備として、シンクロトロン X 線の有機薄膜へのダメージを検証した。

Polymer solar cells based on a bulk heterojunction of poly(3-hexylthiophene) and methanofullerene have shown potential to harness solar energy in a cost-effective way. Significant efforts are underway to improve their efficiency to the level of practical applications. In this experiment, the influence of synchrotron X-ray beam on polymer pristine and blend films was confirmed for the future grazing-incidence X-ray-diffraction (GIXRD) measurements to evaluate a degradation of polymer solar cells in the future.

2. 背景と研究目的:

ポスト・シリコン太陽電池として、スピニングキャストや印刷技術などの溶液プロセスにより、低コスト、大面積かつ軽量のフレキシブル有機薄膜太陽電池を作製する研究が盛んに行われている。実用化された場合、大きな市場となることが期待されるため、世界中でエネルギー変換効率の激しい競争が繰り広げられている。なかでも、*p* 型材料として有機分子材料である導電性高分子を、*n* 型材料としてフラーレンもしくはフラーレン誘導体を混合して作製する、「バルクヘテロジャンクション構造」ポリマー太陽電池が注目されている。しかし、エネルギー変換効率が低いため、実用化に至っていないのが現状である。

これまで、新規ポリマー材料の設計・合成やポリマー太陽電池の作製プロセスの最適化により、エネルギー変換効率向上のための研究が進められてきた。しかし、ポリマー太陽電池の寿命 (耐久性) に関しては、未だ不明な部分が多く、研究はその途についたばかりである。

本研究では、ポリマー太陽電池の劣化要因の解明 (劣化挙動) のため、ポリマー薄膜を様々

な環境下のおき、小角 X 線散乱法により構造解析を行うことを目的とした。今回の実験では、シンクロトロン X 線の有機薄膜へのダメージについてのみ検証を行った。

3. 実験内容:

実験試料として、P3HT

(Poly(3-hexylthiophene-2,5-diyl)) と PCBM

(Phenyl-C61-butyric acid methyl ester) 及び名古屋工業大学で設計・合成した *n* 型材料新規溶解性フラーレン誘導体を混合し、スピニングコート法により製膜したバルクヘテロジャンクション構造および、極薄膜の P3HT を用意した。

測定は、BL15 物質科学ビームラインで小角度領域の回折をイメージングプレート (IP) により取得した。

4. 結果、および、考察:

Fig. 1 に、混合重量比 P3HT:PCBM = 1:1 で作製したバルクヘテロジャンクション構造薄膜の小角散乱測定結果を示す。内側より P3HT の (100), (200), (300) の回折が観測された。この結果は、Kim 等の報告 [参考文献 3] の結果とよ

く一致している。特に今回の結果から、(100)の回折ピークの分離が観測され、P3HTにPCBMを混合することによる、分子の立体的位置規則性への影響が考えられる。

今回の実験から、シンクロトロン X 線の有機薄膜へのダメージは無いと判断した。

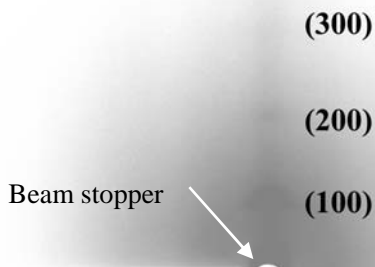


Fig. 1. Two-dimensional small angle scattering measurement (incident X-ray angle $\theta_{IN}=0.2^\circ$) of P3HT:PCBM blend film.

極薄膜の P3HT の小角散乱測定を試みたが、Fig. 1 で観測されたような回折を得ることが出来なかった。

5. 今後の課題：

本研究の結果、シンクロトロン X 線による有機薄膜へのダメージは無いことが確認され、今後シンクロトロン放射光による X 線微細構造解析を実施することで、ポリマー太陽電池の劣化メカニズムを明らかにする。

また、極薄膜の小角散乱測定の可能性について、今後検討する必要がある。

6. 論文発表状況・特許状況

準備中で該当無し。

7. 参考文献

1. 林靖彦：雑誌 「未来材料」株式会社エヌティイーエス 8, 32-41 (2008).
2. 斉藤和裕等：応用物理学会誌, **73**, 1525 (2004).
3. Y. Kim et. al., nature materials 5, 197-203 (2006).

8. キーワード

・小角散乱

材料に X 線を入射させた場合、数度以下の回折角度に生じる散乱 X 線を測定する手法. 数～

数十 nm のオーダーの構造について規則性や異方性などを解析することができる。

・フラーレン誘導体

炭素原子からなるサッカーボール形状化合物. 炭素 60 個からなる C_{60} や炭素 70 個からなる C_{70} に置換基を付与して有機溶媒に溶けるようにした化合物のこと。