

カーボンナノチューブ/ポリチオフェン 界面構造の理論的研究

(東大院・工) 西村 亮彦、藤井 幹也、城野 亮太、山下 晃一

Theoretical analysis on carbon nanotube - polythiophene interfaces

(Univ. of Tokyo, Eng.) Nishimura Katsuhiko, Fujii Mikiya,
Jono Ryota, Yamashita Koichi

序論

近年、有機薄膜太陽電池はその大量生産可能性や製造時のエネルギー消費が比較的少ないこと、また素材の柔軟性などから、次世代の太陽電池として開発が進められている。その中でも、P3HT/PCBM バルクヘテロ接合太陽電池は比較的確立した成果が得られており、様々な研究がこれまでになされている¹。PCBM と同じナノ炭素材料であるカーボンナノチューブは、PCBM と比べてキャリア移動度が高い^{2,3} ことや、その高い比表面積などから、バルクヘテロ接合太陽電池材料として PCBM よりも適していると考えられる。そのため、P3HT/SWNT バルクヘテロ接合太陽電池の実現可能性について多くの研究が成されてきた。しかし、その多くは P3HT/SWNT 接合太陽電池は P3HT/PCBM 接合太陽電池と比べて著しくキャリア寿命が短く、太陽電池として実用できるレベルではないという結果に終わっている。

このような状況の中で近年、これまでの結果に比して非常に長寿命で、P3HT/PCBM 接合と比較できる程度のキャリア寿命が P3HT/SWNT 接合において得られたとする結果が報告された⁴。このことは P3HT/SWNT 接合面における P3HT がバルクの P3HT とは異なる分子構造・電子状態にあることが原因であると考えられている。

本研究の目的は、P3HT/SWNT 接合面における P3HT の分子構造・電子状態を調査し、より高効率の有機薄膜太陽電池の開発へとつなげることである。

方法

本研究ではモデル系として数百原子を含むポリチオフェンと SWNT を用意し、半経験的分子軌道法を用いて解析を行なった。

P3HT/SWNT 接合面においては P3HT は $\pi-\pi$ スタックによって SWNT と分子間結合し、SWNT に螺旋状に巻きついた構造をとることが知られている⁵。 $\pi-\pi$ スタックには

P3HTの側鎖は寄与しないと考え、P3HTの側鎖を除いたポリチオフェンとSWNTについて、様々な初期構造から構造最適化を行なった。また、 $\pi-\pi$ スタックの引力は分散力に相互作用に起因することが知られているため、PM3に分散力補正を加えたPM3-D^{6,7}を用いて構造最適化を行なった。

また、ZINDO/Sによる励起状態計算により、分子構造に依存して光学的性質がどのように変化するかについても当日報告する。

結果

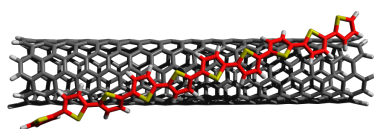


図 1: ポリチオフェン/SWNT の安定構造 (赤:ポリチオフェン骨格炭素)

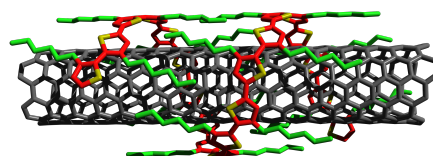


図 2: P3HT/SWNT の螺旋構造 (赤:ポリチオフェン骨格炭素 緑:側鎖炭素)

ポリチオフェン/SWNT系について様々な螺旋状初期構造からPM3-Dにより構造最適化を行なった結果、全ての初期構造について図1のようにポリチオフェンが直線状構造に収束した。また、エネルギー面はポリチオフェンがSWNT表面上を滑る方向には非常に平坦であることがわかった。このことから側鎖の存在が接合面における分子構造の決定に大きく寄与しているものと思われた。そこで側鎖を含むP3HT/SWNT系の構造最適化を行なったところ、図2のような結果が得られ、構造の決定において側鎖の重要性が示唆された。

また、図1の安定構造ではポリチオフェンの共平面性が崩れており、共平面性の崩れた構造は π 共役系の切断を引きおこし、キャリア移動度を低下させ再結合を起こりやすくと考えられるので、側鎖の存在がポリチオフェン誘導体/SWNT接合太陽電池を作成する上で重要であると思われる。

参考文献

- [1] Hauch, J. A. et al. *Sol. Energ. Mat. Sol. C.* **2008**, 92, 727 – 731.
- [2] Fuhrer, M. S. et al. *Nano Lett.* **2002**, 2, 755–759.
- [3] Mihailetchi, V. et al. *Adv. Funct. Mater.* **2003**, 13, 43–46.
- [4] Stranks, S. D. et al. *Nano Lett.* **2011**, 11, 66–72.
- [5] Goh, R. G. S. et al. *Appl. Phys. Lett.* **2006**, 88, 053101.
- [6] McNamara, J. P. et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2007**, 9, 2362–2370.
- [7] Morgado, C. A. et al. *J. Chem. Theory Comput.* **2007**, 3, 1656–1664.