4P076

P3HT/PCBM 界面の分子構造

（東大院・工，JST CREST）○城野亮太，山下晃一

Molecular structure of P3HT/PCBM interface

(The University of Tokyo, JST CREST) Ryota Jono, Koichi Yamashita

【序】

全固体型有機系太陽電池は，強みである製造コストの低さやデザイン性・設置箇所の自由度等から，その普及が期待されている．現在研究室レベルでの光電変換効率は 12 %であるが，有機系太陽電池の普及には電荷分離・電荷再結合といった素過程の理解の上での分子設計が必要である．

P3HT/PCBM を材料に用いたものは有機薄膜太陽電池の標準として様々な研究がなされてきた．近年，P3HT/PCBM 界面に第三の分子を加える事によって電荷分離後の電子・正孔拡散効率を改善する試みがなされている．例えば P3HT の側鎖アルキル基をペンタフルオロフェニル基で修飾した高分子を 0.25 wt%添加した太陽電池では，修飾部位は光子の吸収に寄与しないのにもかかわらず，短絡電流 J_{SC} について 30 %効率が向上することが報告されている．[1]そこで本発表では，古典分子動力学法に基づく P3HT/PCBM 界面の分子構造探索と，量子化学計算による界面分子構造の電子状態に関する考察から，P3HT/PCBM の界面分子構造を変化させた時のエネルギー準位の変化について報告する．

【方法】

GROMACS を用いて P3HT/PCBM およびペンタフルオロフェニル基で側鎖を修飾した添加物を加えた系の構造探索を 300 K，1 bar 下で 1 ns 行った．PCBM の力場は OPLS，P3HT の古典力場は Moreno らによる OPLS の改良版[2]を用いた．電子状態計算は CP2K を用いて，平面波・局在基底の混合基底 DZVP-MOLOPT+GTH potential/カットオフエネルギー280 Ry のもと PBE+D2 レベルで計算した．

【結果】

古典力場による 1 ns 平衡化後のスナップショットを図 1 に示す．P3HT のチオフェン環およびペンタフルオロフェニル基を CPK モデルで示した. face-on で P3HT が PCBM に接する界面では，隣接する P3HT 間で分子間π共役が形成されていた．一方，ペンタフルオロフェニル基で修飾された P3HT は，face-on 界面から始めた構造から edge-on 構造へ遷移し，結果として bulk に見立てた P3HT とのπ共役が失われた．これらの構造をモデル化し，bulk に見立てた face-on 構造をとったポリチオフェンと PCBM で face-on 型と edge-on 型のポリチオフェンを挟んだ時の電子状態計算を行った（図２）．Bulk の face-on 構造に対して界面が edge-on 構造をとっているものはπ共役が失われた結果 HOMO-LUMO gap が開いた．発表当日は Bulk の P3HT について edge-on 構造をとったものについても報告する．

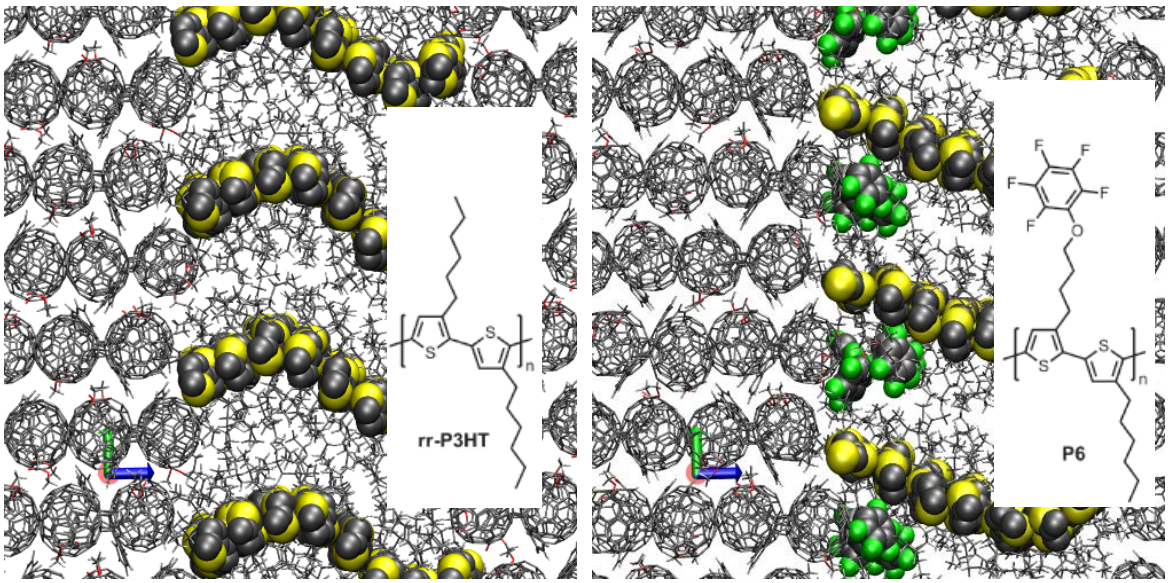

図１：GROMACS を用いて 1 ns の平衡化後に得られたスナップショット界面構造（左）P3HT / PCBM,（右）P3HT / ペンタフルオロフェニル基で修飾された P3HT / PCBM

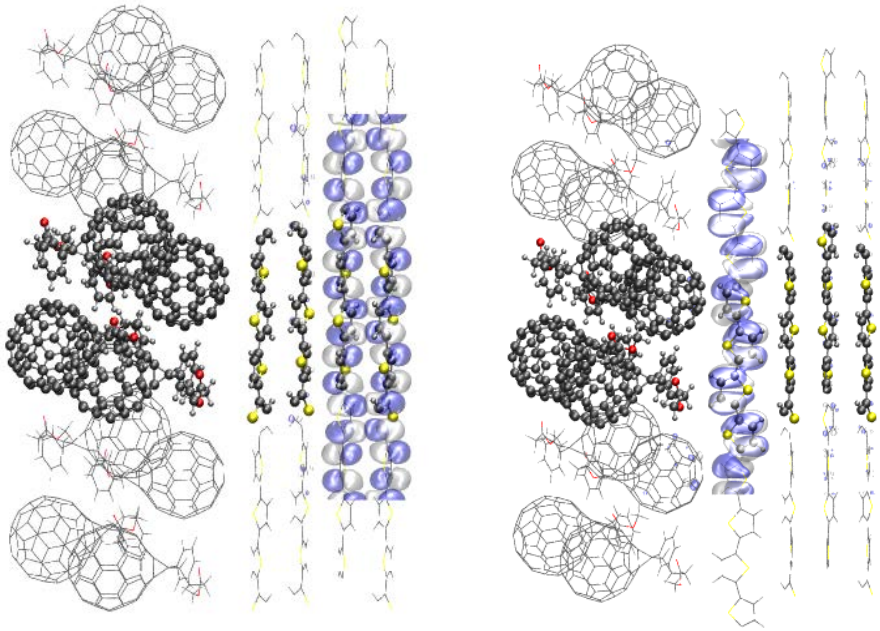

図２：face-on（左）および edge-on（右）のポリチオフェンに見立てたポリチオフェン/PCBM 界面の最高被占軌道

[1] Lobez, J.M.; Andrew, T.L.; Bulović, V.; Swager, T.M. *ACS NANO* 6, 3044-3056 (2012)

[2] Moreno, M.; Casalegno, M.; Raos, G.; Meille, S. V.; Po, R. *J.Phys.Chem.B* 114, 1591-1602 (2010)