

## PTB7/ITIC非フラーレン型有機薄膜太陽電池における 電荷移動メカニズムの理論的研究

<sup>1</sup>日女大院・理, <sup>2</sup>東大院・工  
○太田希<sup>1</sup>, 村岡梓<sup>1</sup>, 山下晃一<sup>2</sup>

### Mechanism of charge transfer

#### in polymer/fullerene-free type organic solar cell

○Nozomi Ohta<sup>1</sup>, Azusa Muraoka<sup>1</sup>, Koichi Yamashita<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Graduate School of Science, Japan Women's University, Japan

<sup>2</sup> School of Engineering, The University of Tokyo, Japan

**【Abstract】** Organic solar cells have advantages of having flexibility, being lightweight, being fabricated at low cost. For this reason, researches on organic solar cells that generate electric with high efficiency have been advanced for practical application.

Recently, in the research fields on the organic solar cells, it has been reported that it succeeded in synthesizing polymer / fullerene-free (donor/acceptor) type organic solar cell, and showed the light conversion efficiency higher than polymer/fullerene-free type. In this study, focusing on polymer / fullerene-free type PTB7 / ITIC complex, we obtain the electronic structure of complex and absorption spectrum at donor / acceptor interface using time dependent density functional theory method. In addition, from the viewpoint of electronic structure, absorption spectrum, and HOMO-LUMO gap, we consider the mechanism of charge transfer in polymer / fullerene-free type organic solar cell.

**【序】** 有機薄膜太陽電池は、フレキシブル、軽量で且つ低コストで作製が可能という利点を持つ。この事より、実用化へ向けて効率の良い電流生成をする有機薄膜太陽電池の研究が進められてきた。効率の良い電流生成を必要とする太陽電池には、励起子と呼ばれる電子-ホール対の分解（電荷分離）と自由電子キャリアの電極への移動を促進するメカニズムが重要である。近年、有機薄膜太陽電池分野において、ドナー分子にポリマー、アクセプター分子に非フラーレン分子を用いた、ポリマー/非フラーレン型有機薄膜太陽電池（以下、非フラーレン型）の合成に成功し、ポリマー/フラーレン型（以下、フラーレン型）よりも高い光変換効率(PCE) (≈ 13 %)を示すこと<sup>[1]</sup>が報告された。そこで本研究は、アクセプター分子として ITIC (3,9-ビス(2-メチレン(3-(1,1-ジシアノメチレン)-インダノン))-5,5,11,11-テトラキス(4-ヘキシルフェニル)-ジチエノ[2,3-d:2',3'-d']-s-インダセン[1,2-b:5,6-b']ジチオフェン))を用いた、非フラーレン型有機薄膜太陽電池 PTB7/ITIC 複合体に着目し、時間依存型密度汎関数法を用いて複合体の電子構造とドナー/アクセプター界面における吸収スペクトルと HOMO-LUMO ギャップの観点から、非フラーレン型有機薄膜太陽電池の電荷移動メカニズムについて考察する。

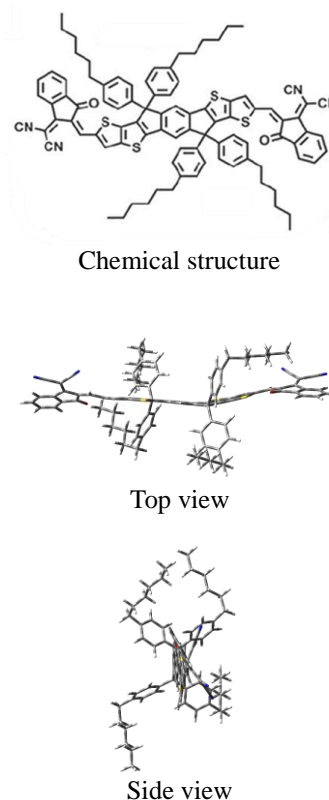


Fig. 1 Structure of acceptor molecule ITIC.

**【計算方法】** 量子化学計算ソフト Gaussian 09 を用いて行った。ドナー分子にポリマー PTB7、アクセプター分子に  $\pi$  共役ポリマー ITIC をモデル系とした、PTB7/ITIC 複合体について密度汎関数法を用いて基底状態のエネルギー計算と構造最適化を行った。また、励起状態計算には、時間依存型密度汎関数法を適用した。共に、計算レベルは  $\omega$ B97XD/6-31G(d)である。

**【ITIC の分子構造】** Fig. 1 は構造最適化した、アクセプター分子 ITIC である。側鎖はベンゼン面が平行となる向きにねじれ、主鎖は両端のインダノン基部分がねじれ、安定構造はねじれた構造であった。

**【PTB7/ITIC 複合体の吸収】** Fig. 2 は構造最適化した、PTB7/ITIC 複合体である。アクセプター分子 ITIC の主鎖のジチオフェン-インダノン中央部と、ドナー分子 PTB7 の主鎖部分を向かい合わせた構造が安定構造だった。この時のドナー/アクセプター(D/A)の面間距離は、 $\approx 3.1 \text{ \AA}$  だった。

次に、この構造の吸収スペクトルを計算し D/A 遷移の割合を求めた。PTB7/ITIC 複合体の吸収スペクトルは、 $\approx 200 \text{ nm} - 2000 \text{ nm}$  とフラーレン型と比べて広範囲の吸収帯を示す (Fig. 3)。また、複合体の HOMO はドナーとアクセプターどちらにも広がり、LUMO はアクセプターに局在していることから、PTB7/ITIC 複合体は D/A 遷移で電荷移動型であることがわかる。さらに、100 励起状態のうち D/A 遷移 93% を示し、第 1 励起状態や最も強い振動子強度をもつ第 3 励起状態に着目すると、主要な遷移は HOMO  $\rightarrow$  LUMO 遷移だった。D/A 遷移の割合は ITIC に対する PTB7 の配置場所によって異なり、高い安定化を示した Fig. 2 のような構造が最も D/A 遷移の割合が大きいことが確認できた。一方、A/D 遷移は確認できなかった。

**【フラーレンアクセプターとの比較】** PTB7/ITIC 複合体の特性評価ため、D/A 遷移の割合、電荷移動量、電荷移動距離についてフラーレン型である PTB7/PC<sub>71</sub>BM 複合体と比較する。非フラーレン型の方がいずれの物理量においても高いことが判明した (Table 1)。この結果は、非フラーレン型はフラーレン型より PCE が高いこと<sup>[1]</sup>、フラーレン型において電荷移動距離が長いと PCE は高くなる傾向にある<sup>[2]</sup>、という報告より、非フラーレン型においても電荷移動距離が長いことは PCE を向上するための因子になり得ると考えられる。

**Table 1.** Comparison of characteristic physical quantities with fullerene-free type and fullerene type acceptor.

Donor	Acceptor	
	ITIC	PC <sub>71</sub> BM <sup>[2]</sup>
PTB7		
D / A transition (%)	93	83
Charge transfer amount	0.987	0.552
Charge transfer distance ( $\text{\AA}$ )	2.933	1.020

**【参考文献】**

[1] W. Zhao *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **139**, 7148–7151 (2017)

[2] A. Muraoka *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 12193-12199 (2018)

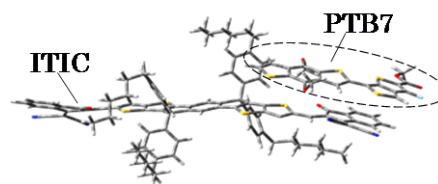


Fig. 2 Structure of PTB7 / ITIC.

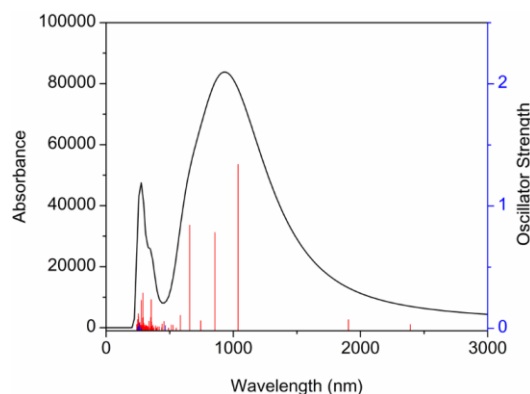


Fig. 3 Absorption spectrum of PTB 7 / ITIC.