

4P058

有機半導体界面での電荷分離過程に関する理論的研究

¹東洋大理工, ²神戸大院科学技術イノベーション

○田代基慶¹, 島崎智実²

Theoretical study on charge separation process in organic semiconductors

○Motomichi TASHIRO¹, Tomomi SHIMAZAKI²

¹Department of Applied Chemistry, Toyo University, Japan

²Graduate School of Science, Technology and Innovation, Kobe University, Japan

【Abstract】 A bulk-heterojunction structure is often employed to develop high-performance organic photocells, in which the donor and acceptor regions are complexly intertwined. In such situations, the mesoscopic-scale islands and peninsulas that compose the donor materials may be formed in the acceptor region. Alternatively, the donor region may extend deeply into the acceptor region. This yields mesoscopic-size impurities in the charge separation (exciton dissociation) process of organic photocells and prevents the dissociation of excitons (electron-hole pairs). In this work, we first discuss the mesoscopic-scale impurity effect on the charge separation process in PCBM acceptor models by considering the hot CT state and dimensional effects. Then, we also inspect vibrational energy relaxation in bulk PCBM and related materials in acceptor regions, which may have importance in understanding vibrational energy dissipation in our model.

【序】

多くの有機薄膜型太陽電池では π 共役高分子等から成るドナー層とPCBM等からなるアクセプター層がバルクヘテロジャンクションと呼ばれる、互いに絡み合った構造を取って接している。この構造では、アクセプター領域内にメゾスケールのドナー領域が島状、半島状に形成、貫入しているが、そのような構造は電荷分離過程への障害物(Impurity)として働く可能性がある。

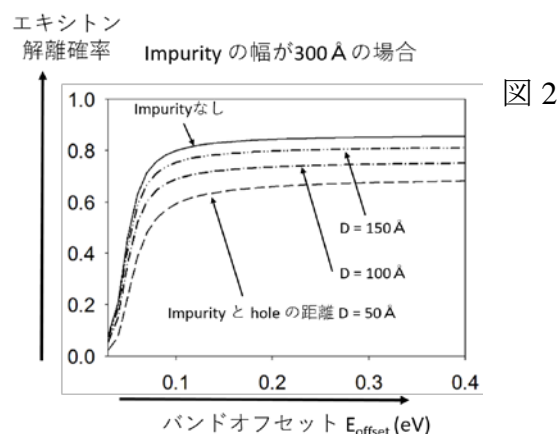
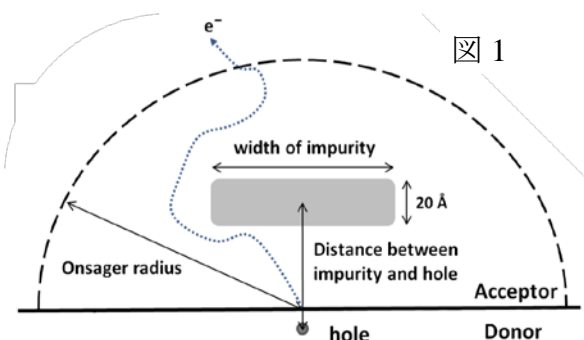
本研究ではまずPCBMから成るアクセプター層に着目し、電子を通さない障害物(Impurity)が存在する場合のエキシトン分離確率への影響を調べた。また、計算に利用するモデルに関連し、アクセプター分子の振動エネルギー緩和過程についても調査を行った。

【手法】

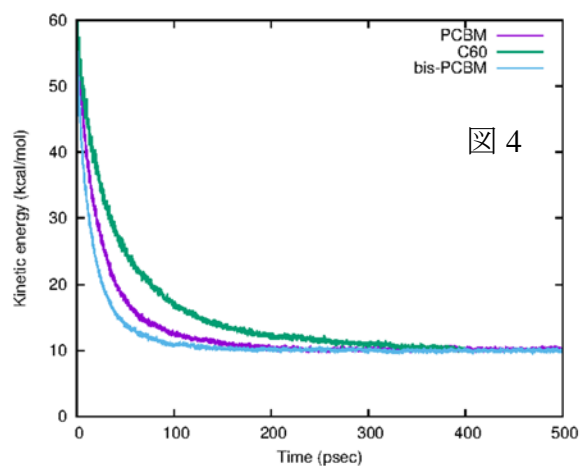
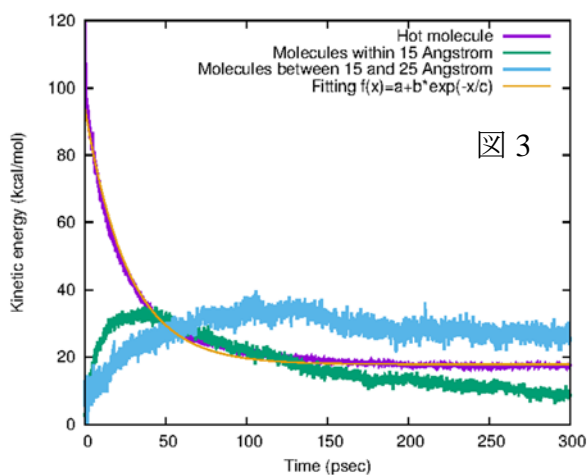
- PCBMから成るアクセプター層での電子拡散についてはShimazaki and Nakajima (参考文献 1)らによるモデルを利用した。このモデルでは電子が各PCBM間を特定の確率でホッピングして移動する。また各PCBMは「hot」「relaxed」の2状態を取ることができ、「hot」状態の電子はある確率で「relaxed」状態に緩和する。ドナー・アクセプター界面で正孔と分離した電子が界面より十分遠くに到達できればエキシトンが解離したと見なし、アクセプター領域に障害物を置いてそのエキシトン解離確率への影響を調べた(図 1)。
- アクセプター層における分子の振動緩和については、層内の単一のPCBM分子に振動エネルギーを与え、周囲の分子へのエネルギー伝達の様子をOPLS力場を利用した分子動力学計算を用いて調べた。

【結果】

- アクセプター層に障害物がある場合の電子拡散とエキシトン解離確率を図 2 に示す。図では横軸に「hot」「relaxed」状態のエネルギー差を示すバンドオフセット、縦軸にエキシトン解離確率を示している。計算結果から不純物が界面近くにある場合は電荷分離が阻害されエキシトン解離確率が低下することが分かる。また、幅 100 Å よりも小さい不純物については電荷分離確率への影響は小さいことが確認された。



- アクセプター層での分子の振動緩和に関する計算結果を図 3 と図 4 に示す。図 3 では初期に振動を与えられた分子から時間とともに周囲の分子に運動エネルギーが伝わって行く様子が示されていて、緩和時間が 20 ピコ秒 程度であることが分かる。図 4 では C₆₀、PCBM、bis-PCBM それぞれについて同様の計算を行い結果を比較している。この結果から付加基が増える程緩和時間が短くなることが示唆される。



【参考文献】

- [1] Shimazaki, Nakajima, Phys. Chem. Chem. Phys. 17 12538 (2015)
- [2] Shimazaki, Tashiro, Nakajima, Phys. Chem. Chem. Phys. 20 14846 (2018).