

2002

バルクヘテロ型有機半導体における暗導電率の理論的解析

○成島和男、本田真彬、久保直也

宇部工業高等専門学校電気工学科

(〒755-8555 山口県宇部市常盤台 2-14-1)

【緒言】

現在、軽量、安価、製造のしやすさという点から有機薄膜太陽電池が注目されている。この有機薄膜太陽電池の目下の課題は、変換効率の上昇であるが、このためには、有機半導体自身の導電率を高くしなければならない。光照射によりキャリアが発生しても、導電率が低い場合はキャリアが移動できず、結果として変換効率の下がるためである。有機薄膜太陽電池の一種のバルクヘテロ型を用いると導電率が増加することが実験的に明らかになっている。例えば、p型半導体とn型半導体にそれぞれフタロシアニンとフラーレン C60 を入れると、C60 が 2～3%のときに導電率が最大となる¹⁾。しかし、この導電率上昇の詳しい機構はまだ明らかにされていない。本研究では2通りの方法で理論的に解析することを目指す。

【方法及び結果】

まず、はじめにバルクヘテロ型の複雑に入り乱れたナノ構造層を格子状の回路網として考え、有機半導体の抵抗率を計算した。本研究では、具体的にアルゴリズムを作成し、N88-Basic 言語にてプログラミングを行い、シミュレーションを行った。回路網を Δ -Y変換し、任意の濃度における合成の導電率を計算した。また、回路網でのフラーレンの存在箇所のパターンも考慮し、各組み合わせにより求めた導電率の平均値をその濃度における導電率とした。

その結果、図1のように、C60を混合することにより、導電率が変化することがわかった。さらに、C60濃度の増加に伴い一様に減少した。これは、先に述べたC60が2～3%のときに導電率が最大となる結果とは異なっている。この理由として、フラーレンC60とフタロシアニンが入り乱れると電子の移動が起こり、その結果キャリアが発生して導電率が上昇しているのではないかと推論した。上記の推論を検証するために、Gaussian09 (Gaussian, Inc.) を用いて、分子軌道法にてキャリア挙動の計算を行った。

Gaussian09を用いて計算した結果、C60単体では、電荷の偏りは見られず、また、フタロシアニン単体では、全体では、電荷の偏りは見られなかった。次に、C60とフタロシアニンを近づけると、特にC60に電荷の偏りが見られた。特にフタロシアニンに近い電子に負の電荷が生じていることが分かった(図2)。さらにC60の原子すべての電荷を足していくと負になった。このことから、C60には電子が存在し、これがキャリアとなるため、導電率が増加することが推定される。なお、フタロシアニンの原子すべての電荷を足しても正の値には、ならなかったが、フタロシアニン分子の構造の対称性が崩れ、さらに一部の原子間の結合状態が変わるなどの変化が見られた。これは、フタロシアニン分子内の電子状態が変化していることを示し、正孔が生じている可能性は否定できない

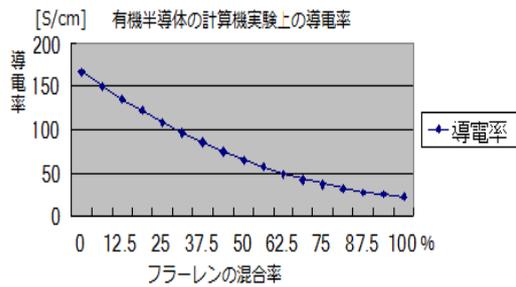


図1：有機半導体の計算上の導電率

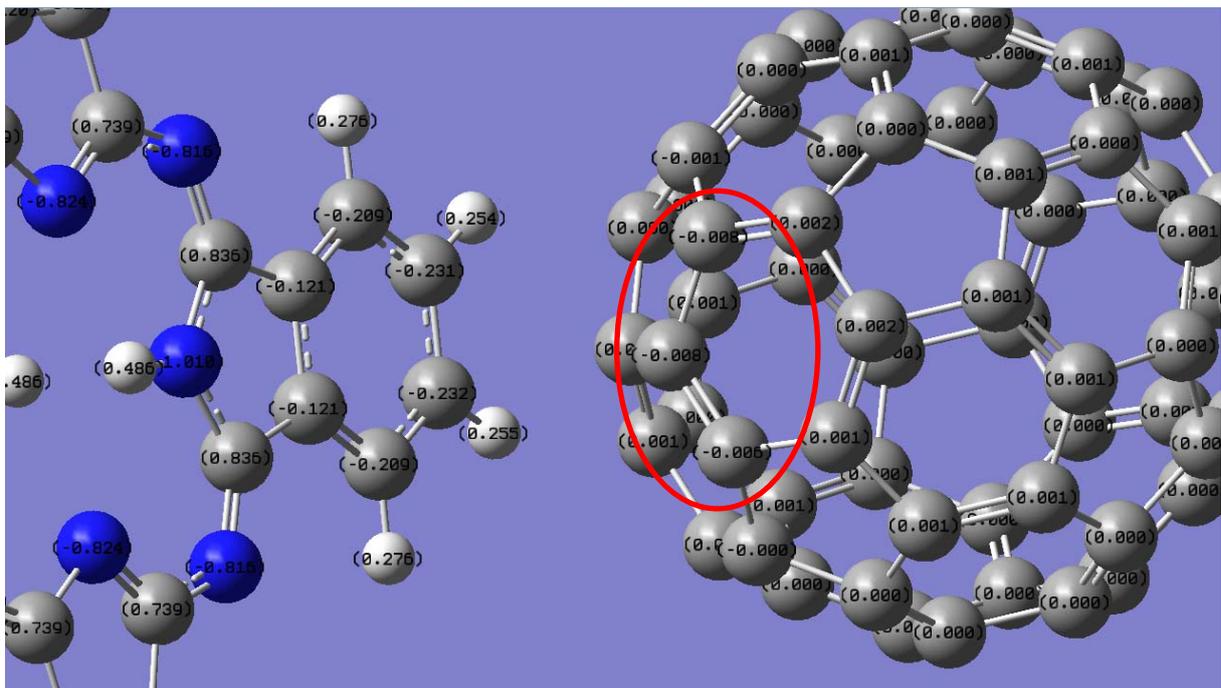


図2 フタロシアニンにより電荷の分布に偏りが生じたフラーレン C60

以上より、バルクヘテロ型有機薄膜太陽電池の電気伝導度の増加機構は、C60 にキャリアである電子が発生しているためであることが推論できた。

参考文献

- 1) 成島和男、博士学位論文「有機半導体薄膜、有機液体におけるキャリア輸送に及ぼすフラーレンドーピングの影響」H10 茨城大学; Kazuo NARUSHIMA, Manabu TAKEUCHI, Masayoshi MASUI and Hiroshi MASE :” Effects of C60-Doping on the Photoelectronic Properties of Phthalocyanine Layers”, Proc. IS&T’ s NIP12 : Int. Conf. on Digital Printing Technol., San-Antonio(Texas, United States), p. 436-439 (1996).