

R1015

## XAFS による有機薄膜太陽電池の局所構造解析

## Local structure analysis of the organic photovoltaics by XAFS

高橋 裕之<sup>a</sup>, 藤村 秀俊<sup>a</sup>, 中西 康次<sup>b</sup>, 太田 俊明<sup>b</sup>  
Hiroyuki Takahashi<sup>a</sup>, Hidetoshi Fujimura<sup>a</sup>, Koji Nakanishi<sup>b</sup>, Toshiaki Ohta<sup>b</sup><sup>a</sup>富士フイルム株式会社 解析技術センター, <sup>b</sup>立命館大学 SR センター<sup>a</sup>Analysis Technology Center, FujiFilm, <sup>b</sup>The SR Center, Ritsumeikan University

有機薄膜太陽電池の光電変換層である P3HT/PCBM バルクヘテロ膜の配向状態を明らかにするため S K-edge XANES 測定を行った。X 線の入射角依存性より、バルクヘテロ膜中の P3HT の主鎖方向は基板面に平行であることが分かった。

We have measured S K-edge XANES spectra of P3HT:PCBM blend film, which is an active layer of an organic photovoltaic to clarify orientation state of the film. We demonstrate main chain of P3HT run parallel to the substrate, by the angle dependency of XANES spectra.

**Keywords:** S K-edge XANES 有機薄膜太陽電池 バルクヘテロ膜 配向

**背景と研究目的:** 有機薄膜太陽電池は低コスト・フレキシブルの観点から次世代の太陽電池として注目を集めており、盛んに研究が進められている。有機薄膜太陽電池としては、ドナー型の材料とアクセプタ型の材料をブレンドした膜を光電変換層として持つバルクヘテロ構造の素子が有望視されている。素子性能向上のためには、膜構造の理解が欠かせないが、電極や修飾電極との界面構造の制御は特に重要な因子である。最近になり、XAFS 法を用いてバルクヘテロ層/修飾電極界面の組成・配向構造を決定している例[1、2]が報告され始めているものの、研究としては緒についたばかりの段階と言える。本研究では、有機薄膜太陽電池を構成するバルクヘテロ膜(P3HT/PCBM)の配向構造をS K吸収端XANESにより解析した。

**実験:** 実験にはITO付ガラス基板にスピコートにより poly(3-hexylthiophene) (P3HT) / [6,6]-phenyl-C61-butyrac methyl ester (PCBM) バルクヘテロ膜(以下、BH膜)を塗布した試料を使用した。

S K吸収端XAFS測定は立命館大学SRセンターBL-10にて行った。分光結晶はGe(111)を用い、エネルギーはK<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>のホワイトラインを2481.7 eVとして校正した[3]。信号検出方法

は試料電流による全電子収量法を使用し、BH膜の配向状態を調べるためX線入射角(偏光)依存性測定を行った。入射角は試料直入射の場合を0°と定義した。

**結果と考察:** 図1にBH膜のS K吸収端XANESスペクトルのX線入射角依存性を示す。入射角0°のスペクトルはP3HTのスペクトル[4]と一致し、BH膜中のP3HTはPCBMと反応することなく、その化学状態が安定であることを示している。また、X線入射角の違いによりスペクトルが変化することから、BH膜中のP3HTは配向していることが示唆される。

ピークの帰属を行うため、図1(右図)に吸収端近傍の拡大スペクトルと、Onokiらのデータを並べて示す[5]。これより、入射角増加に伴い強度が減少する2473 eV付近のピークは、1s→σ\*<sub>s-c</sub>由来の遷移と帰属した。1s→σ\*<sub>s-c</sub>の遷移モーメントの向きはP3HTの主鎖方向であることから、BH膜中のP3HTの主鎖は基板面に対して平行方向に配向していることが分かった。

なお、入射角増加に伴い強度が増加する、2475 eV付近のピークについては、現状帰属はできていない。

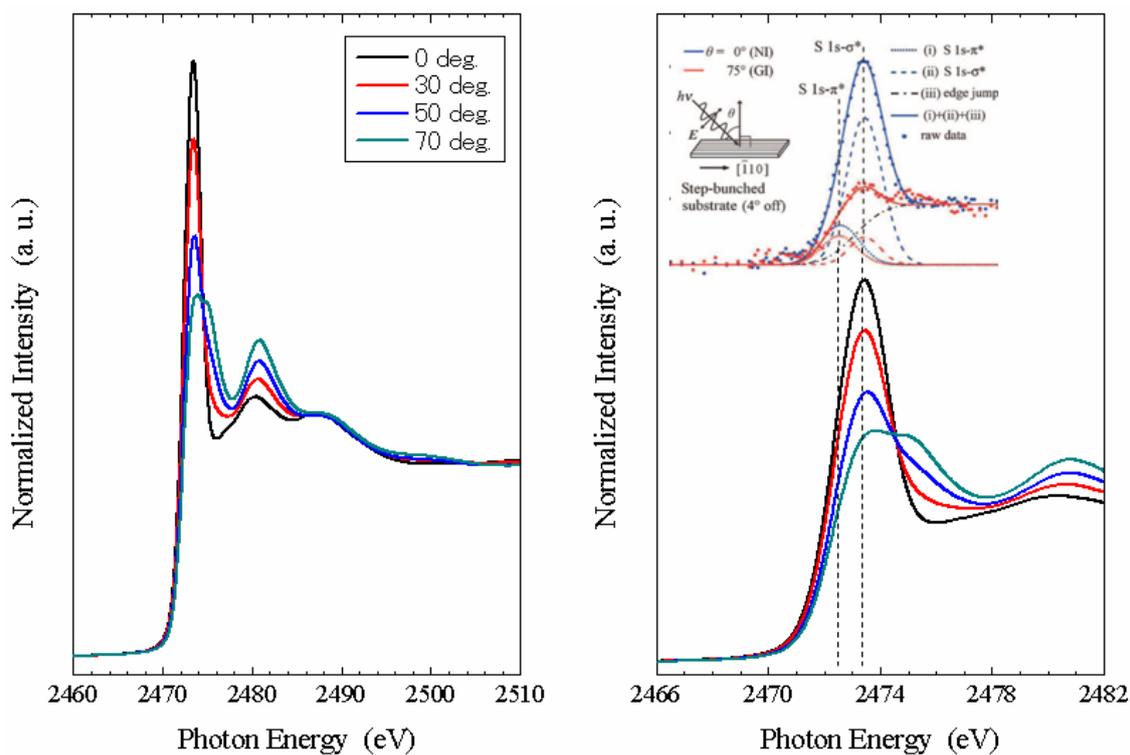


図1 P3HT/PCBM バルクヘテロ膜の S K 吸収端 XANES スペクトル

右図上段には比較のため、Onoki [4]らのデータを示す

今後、C K 吸収端 XAFS の結果とも合わせて、より詳細に BH 膜の配向状態・局所構造解析を行う予定である。

#### 参考文献

- [1] D. S. Germack *et.al.* *Appl. Phys. Lett.* **94**, 233303 (2009).
- [2] B. Xue *et. al.*, *J. Phys. Chem. C* **114**, 15797 (2010).
- [3] K. Nakansihi *et. al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 104214 (2009).
- [4] G. S. Araujo *et. al.*, LNLS 2007 Activity Report.
- [5] R. Onoki *et. al.*, *Langmuir* **24**, 11605(2008).