

## 高性能化に向けた塗布型有機薄膜太陽電池の成膜評価 Examination of thin film structure for printable organic photovoltaic cells

小島 優子<sup>a</sup>, 安達 健<sup>a</sup>, 吉田 郵司<sup>b</sup>

Yuko Kojima<sup>a</sup>, Takeshi Adachi<sup>a</sup>, Yuji Yoshida<sup>b</sup>

<sup>a</sup>(株)三菱化学科学技術研究センター, <sup>b</sup>(独)産業技術総合研究所

<sup>a</sup>Mitsubishi Chemical Group Science and Technology Research Center, INC., <sup>b</sup>AIST

塗布型有機薄膜太陽電池の p 型材料として期待されるベンゾポルフィリン (BP) 薄膜の結晶性および配向性についてすれすれ入射 X 線回折 (GIXD) により検討した。BP 薄膜は成膜時の加熱温度にかかわらず結晶性良好であることが確認され、その結晶構造は BP 単結晶構造[1]と同じであることが BP 単結晶から計算した粉末 XRD 理論パターンと比較することにより明らかになった。配向性は加熱温度によって多小変化するものの全体的には b 軸が基板に平行であることが示唆された。

キーワード：有機薄膜、X 線回折、配向評価

### 背景と研究目的：

塗布型有機薄膜太陽電池においては電荷発生後の電荷輸送の観点から積層型デバイスの場合には特に薄膜における分子の並び方つまり結晶性および配向性が重要な要素となる。太陽電池における p 型材料である BP 薄膜の場合、有機溶媒に可溶性前駆体を塗布したのち熱変換により BP 薄膜を作製する[2]。よって成膜条件 (加熱温度、時間、膜厚等) による結晶性や配向性の違いが生じ、太陽電池性能を左右する可能性が高いと予想される。そこで我々は最適な成膜条件を検討するために成膜条件のひとつである加熱温度を変化させた 3 種類の BP 薄膜の結晶性、配向性について比較、検討を実施した。

### 実験：

Poly(3,4-ethylenedioxythiophene): poly(styrenesulfonate) (PEDOT:PSS) をスピコートした Indium Tin Oxide (ITO) 基板上に成膜条件の一つである前駆体塗布後の加熱温度を 160°C (Sample 1)、180°C (Sample 2)、200°C (Sample 3) とそれぞれ変化させて作成した 3 種類の BP 薄膜 [ITO/PEDOT:PSS/BP] について面内および面外の GIXD 測定を実施した。比較検討のため、他の成膜条件 (加熱時間、膜厚等) は一定とした。GIXD 測定における X 線波長は 1.0 Å、入射角は 0.12° とした。

### 結果および考察：

測定した3種類全てのサンプルにおいて面内 GIXD 測定、面外 GIXD 測定ともに結晶性ピークが観測された。そのピーク位置を BP 単結晶構造 (Fig. 1) から計算した理論 XRD パターンと比較したところ全てのサンプルにおいて良い一致を見た。よって上記 BP 薄膜はすべて単結晶 BP と同じ結晶構造を有することがわかった。

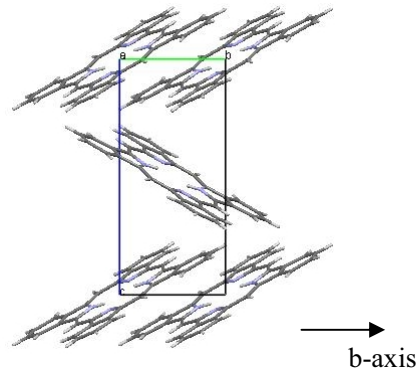


Fig. 1 Single Crystal Structure of BP

次に面内 GIXD 測定と面外 GIXD 測定の回折パターンを比較したところ、サンプル間で多少のバラつきはあるものの、面内では 113, 114 および 115 ピークが、面外では 10-1 および 200 ピークがそれぞれ大きく観測されていることがわかる (Fig. 2)。

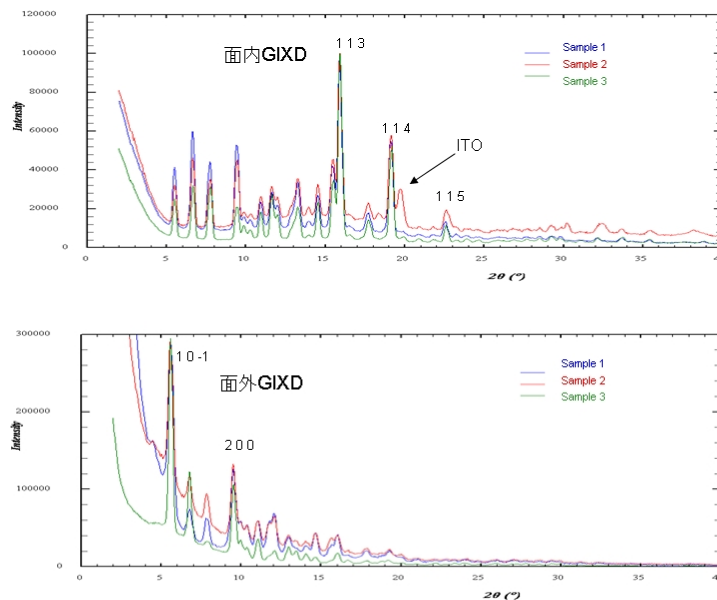


Fig. 2 GIXD profiles of BP thin films

面内および面外で大きく観測されたピークとそれらに対応する結晶面とを比較検討した結果、b 軸が基板に対して平行である可能性が高いことがわかった。b 軸は BP 平面のスタッキング方向であるため (Fig. 1 参照)、b 軸方向に BP 結晶は成長しやすいと考えられる。今回測定した BP 薄膜においては、b 軸方向に成長した結晶子が基板に平行に並んでいると予想される。

#### 今後の課題：

今回、前駆体から熱変換して作製した p 層の BP 薄膜は加熱時間にかかわらず同じ結晶構造を持ち、かつ配向もすべて b 軸が基板に平行であることがわかってきた。今後は他の成膜条件（加熱時間、膜厚等）による結晶性、配向性への影響も明らかにして、太陽電池として最適な BP 薄膜を作製する上での指針を得たい。

#### 参考文献：

- [1] S. Aramaki and J. Mizuguchi, *Acta Cryst.*, E, **59**, 1556 (2003)
- [2] S. Ito, T. Murashima, H. Uno and N. Ono, *Chem. Commun.*, 1661 (1998)