



## 高分子半導体の熱運動が光電荷生成に及ぼす影響を初めて解明 ～有機薄膜太陽電池の更なる高性能化に期待～

### 概要

九州大学大学院工学研究院／カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 (I<sup>2</sup>CNER)／未来化学創造センター長の田中敬二教授、九州大学分子システムデバイス国際リーダー教育センターの川口大輔准教授らの研究グループは、高分子半導体 (※1) 中の電荷が生成する際のメカニズムを初めて明らかにしました。ポリ (3-ヘキシルチオフェン) (以下、P3HT) は代表的な高分子半導体であり、光エネルギーを電気エネルギーに変換できる能力を持ったプラスチックです。P3HT に光照射を行うと、正電荷と負電荷との対が形成された後、自発的に正および負電荷に分離されることを見出しました。また、この電荷生成は P3HT の熱運動によって速くなることも明らかにしました。以上の研究成果は P3HT をはじめとする高分子半導体の分子設計および有機・高分子エレクトロニクスデバイスの材料設計の指針となり、ひいては、より薄いディスプレイの開発やペンキのように塗るだけで簡単に作れる太陽電池の開発につながります。

本研究成果は 2015 年 2 月 13 日 (金) 午前 10 時 (英国時間) に、国際学術誌 Nature 姉妹誌のオンラインジャーナル『Scientific Reports』に掲載されました。

### 背景

近年、有機薄膜太陽電池 (※2) や有機電界効果トランジスタ (※3) に代表される有機・高分子エレクトロニクスデバイスが注目を集めています。有機薄膜太陽電池は軽量で、設置が容易であるため、強度の足りない屋根や壁面などに簡単に取り付けられるため、太陽電池の普及に大いに役に立ちます。その一方、光エネルギーを電気エネルギーに変換する (光電変換) 効率が低いことが課題となっています。

有機・高分子エレクトロニクスデバイスの主な構成成分である高分子半導体の中でも、ポリ (3-ヘキシルチオフェン) (以下、P3HT) が注目されています。P3HT は電気を流す能力が高く、溶剤に溶かして塗布することが可能です。P3HT はチオフェン環と呼ばれる硫黄原子 (S) を含むユニットにヘキシル基が結合した剛直な高分子で (図 1)、チオフェン環が重なり合うような構造を形成しています (図 2)。

これまで、P3HT は光を吸収すると電荷を生成することは知られていましたが、そのメカニズムは十分に解明されておらず、実際に使用する際に重要な温度変化による効果などは明らかになっていませんでした。

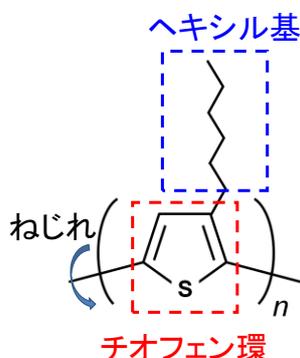


図 1. P3HT の化学構造

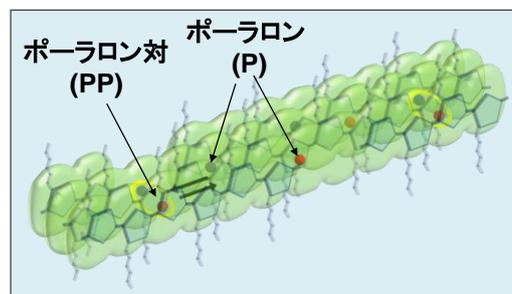


図 2. P3HT 分子の集合状態と電荷生成の模式図

P3HT 分子の

## ■内 容

研究グループは、P3HT に光を照射すると、正電荷と負電荷のペア（ポーラロン対とよばれます：図 2 中の赤丸と青丸のペア（PP））が生成した後、それらが自ら自由電荷（ポーラロンとよばれます：図 2 中の距離の離れた赤丸および青丸（P））に分離することを実験的に明らかにしました。また、ポーラロン対からポーラロンが生成する過程は、室温付近（約 27℃）で速くなることも明らかにしました。温度が高くなると P3HT 中のチオフェン環がパタパタとねじれ始めます。研究グループは、このチオフェン環のねじれ運動が室温付近を境に低温では凍結され、高温では解放されることを見出しました。以上のことから、チオフェン環のねじれ運動がポーラロン形成に関与する重要な因子であると結論しています。

## ■効果・今後の展開

本研究成果により、ポーラロン対の生成率を高め、チオフェン環のねじれ運動（図 1）を起こりやすくするという二つの要件を満たした、電荷生成率の高い分子設計が可能になります。

有機エレクトロニクスデバイスにおいて高分子半導体は薄い状態で使用され、電極や絶縁層など様々な材料と接することになります。チオフェン環のねじれ運動は、電極や絶縁層などの接触界面の影響を受けるため、界面での電荷生成過程も異なることが予想されます。今後は界面における高分子半導体の運動と光電荷生成過程について明らかにしていきます。

これらの研究成果は、有機エレクトロニクスデバイスの高性能化につながる基礎科学技術であり、将来的には、より薄いディスプレイの開発や太陽電池の性能向上につながると期待されます。

論文名：An Effect of Molecular Motion on Carrier Formation in a Poly(3-hexylthiophene) Film  
(ポリ (3-ヘキシルチオフェン) 膜中での電荷生成に及ぼす分子運動の影響)

雑誌名：Scientific Reports, 5, 8436; DOI: 10.1038/srep08436 (2015).

著 者：Yudai Ogata, Daisuke Kawaguchi, Keiji Tanaka

※本研究は、文部科学省科学研究費補助金・新学術領域研究・「元素ブロック高分子材料の創出」の「元素ブロックによる高分子界面の構造・物性制御」（研究代表者：田中敬二教授）の一環として行われました。

### 【用語解説】

(※1) 高分子半導体：

半導体とは、電気をよく通す導体と電気を通さない絶縁体の中間の性質を持つ材料です。半導体の性質を持った高分子（プラスチック）のことを高分子半導体と呼びます。

(※2) 有機薄膜太陽電池：

光エネルギーを電力に変化する機器のことを太陽電池といいます。高分子や有機化合物の薄い膜でできた太陽電池のことを有機薄膜太陽電池と呼びます。

(※3) 有機電界効果トランジスタ：

トランジスタとは電気信号の増幅やオン・オフの制御を行う素子のことです。高分子や有機化合物でできたトランジスタのことを有機電界効果トランジスタと呼びます。

### 【お問い合わせ】

大学院工学研究院

カーボンニュートラル・エネルギー

国際研究所 (I<sup>2</sup>CNER)

未来化学創造センター

教授 田中 敬二 (たなか けいじ)

電話：092-802-2878

FAX：092-802-2879

Mail：k-tanaka@cstf.kyushu-u.ac.jp

分子システムデバイス国際リーダー教育センター

准教授 川口 大輔 (かわぐち だいすけ)

電話：092-802-2879

FAX：092-802-2879

Mail:kawaguchi@molecular-device.kyushu-u.ac.jp