

常識を覆す新材料で有機薄膜太陽電池の性能向上に成功 ～低コスト、大面積化に向けた実用化研究が前進～

論文掲載

【本研究成果のポイント】

- ポリマー鎖の中心部分（コア）同士が重なり合う「core - to - core スタッキング」により、ポリマー鎖が規則正しく並んでいない（結晶性が低い）ポリマー半導体でも従来より一桁高い電荷移動度（電気の流れやすさ）を実現。
- ポリマー半導体において、「溶けやすくすると電気が流れにくくなる」「電気を流れやすくすると溶けにくくなる」というトレードオフを解消。
- 低コスト材料（フラーレン）を用いた有機薄膜太陽電池（OPV）において、世界最高水準のエネルギー変換効率を実現。

【概要】

広島大学大学院先進理工系科学研究科の尾坂格 教授、三木江翼 助教、京都大学大学院工学研究科の大北英生 教授、日本電子株式会社の西山裕介 博士らの共同研究チームは、広島大学のグループが以前に開発したポリマー半導体[1]である PTNT2T について、その高い電荷移動度[2]の起源を明らかにするとともに、有機薄膜太陽電池(OPV) [3]において世界最高水準のエネルギー変換効率を達成しました。

従来、ポリマー半導体では、ポリマー主鎖が規則正しく並んだ結晶構造を形成することが電荷輸送性向上に不可欠であると考えられてきました。しかし、PTNT2T は結晶構造の秩序（結晶性）が低いにもかかわらず高い電荷輸送性を示すことが以前の研究で分かっていました。今回、共同研究チームは、ポリマー主鎖を形成する TNT 骨格同士が分子レベルで重なり合う「core-to-core スタッキング」によって、低結晶性ながら効率的な電荷輸送経路が形成されることを発見しました。さらに、PTNT2T をドナー材料として発電層に用いた OPV は、発電層を厚膜化しても高いフィルファクター(FF) [4]を維持できることを実証しました。特にフラーレン[5]誘導体（PCBM）をアクセプター材料とする OPV では、300 nm を超える厚膜において、世界で初めて FF 80% 超を達成し、世界最高の変換効率 12%を実現しました。OPV を大面積化する場合、製造手法上、発電層を厚膜化することが必須であるため、厚膜化しても性能を維持できることは極めて重要です。また、比較的安価なアクセプター材料である PCBM を用いても高い変換効率を実現できたことは、低コスト化に向けて重要です。

本研究成果は、高結晶性に依存しない高移動度ポリマー半導体の新しい材料設計指針を提示するものであり、近年、次世代型太陽電池として注目が高まっている OPV の実用化を加速することが期待できます。

本研究成果は、2026 年 7 月 13 日（月）（日本時間 18 時）に英国王立化学会の総合科学誌「Chemical Science」にオンライン掲載されます。

＜論文情報＞

- 論文のタイトル: “Core-to-Core Overlap Enables Efficient Interchain Charge Transport beyond Crystalline Domains in a Conjugated Polymer: High Fill Factors in Thick Organic Photovoltaic cells ”
- 著者: Tsubasa Miki*, Tomokazu Morioku, Kodai Yamanaka, Momoka Hada, Hiroyuki Ishii, Yuki Sato, Jihun Jeon, Yutaka Ie, Kyohei Nakano, Keisuke Tajima, Yusuke Nishiyama*, Hyung Do Kim, Hideo Ohkita*, Itaru Osaka*
- 掲載雑誌: Chemical Science
- DOI: 10.1039/d6sc01947a

【背景】

ポリマー半導体は、塗布プロセスで簡単に薄膜化できる半導体材料であり、有機トランジスタや有機薄膜太陽電池（OPV）など、有機デバイスへの応用が期待されています。これらのデバイスの高性能化において、高い電荷移動度を示すポリマー半導体の開発は重要な課題です。

これまで、ポリマー半導体の電荷移動度を高めるためには、ポリマー主鎖間の秩序（結晶性）を高めることが重要であると考えられてきました。一方で、結晶性を高めて高移動度化することによって、溶媒への溶解性は低下するため、塗布プロセスによる成膜が難しくなるというトレードオフがありました。また、OPV では一般的に、ポリマー半導体の電荷移動度が低いため、発電層の膜厚が 100 nm を超えると、性能が大きく低下することが問題となっていました。しかし、大面積モジュールを作製する上で、発電層を均一にするために 300 nm 以上の厚さにすることが必須です。そのため、高い溶解性を維持しながら優れた電荷輸送性を実現するポリマー半導体の開発は、OPV を実用化する上で極めて重要な課題となっていました。

【研究成果の内容】

今回、共同研究チームは、広島大学のグループが以前に開発したポリマー半導体 PTNT2T（図 1）に着目しました。PTNT2T は、従来のポリマー半導体とは異なり、低結晶性で溶解性が高いにもかかわらず、電荷移動度が高いという興味深い特性をもつことが分かっていました。そこで、ポリマーの電荷輸送機構について詳しく調査するとともに、OPV 素子への応用を検討しました。

まず、理化学研究所の但馬敬介チームディレクターと中野恭兵上級研究員による多入射角分光エリプソメトリー測定[6]から予想されるポリマー主鎖の配列方向や、筑波大学の石井宏幸教授による量子化学計算から予想される主鎖方向の有効質量[7]などを基にすると、PTNT2T が低結晶性ながら高い移動度を示す理由は、ポリマー主鎖方向の電荷輸送性が優れていることにあったと分かりました。一方で、さらに詳しく PTNT2T の集合体構造を調査すると、ポリマー主鎖間には、ある強い相互作用があることが分かりました。日本電子株式会社の西山裕介博士による固体 NMR 測定[8]や、モデル化合物の結晶構造解析の結果、PTNT2T ではポリマー主鎖を形成する TNT 骨格同士が大きく重なり合った core-to-core スタッキングが形成されていることを発見しました（図 2）。さらに、大阪大学産業科学研究所の家裕隆教授による量子化学計算から、この core-to-core スタッキングにより、 π 電子の重なりは通常の 3 倍も大きいことが分かり、PTNT2T は主鎖間の電荷輸送に非常に有利であることが明らかとな

りました。これにより、PTNT2T はポリマー主鎖方向のみならず、このユニークな分子レベルの相互作用によってポリマー主鎖間においても効率的な電荷輸送経路が形成され、低結晶性ながら高速な電荷輸送（高い移動度）が実現されていることが示されました。また、京都大学の太北英生教授らのグループによる電氣的解析の結果、電荷回収に比べて電荷再結合[9]が大幅に抑制されていることが明らかになりました。

そこで、PTNT2T をドナー材料として発電層に用いた OPV 素子を作製したところ、特に PCBM をアクセプター材料とした場合、300 nm を超える通常の3倍もの厚さの発電層においても、FF が80%を超える極めて高い値を示しました。さらに、エネルギー変換効率は、このような厚膜ながら世界最高水準となる 12%を示しました。また、アクセプター材料に非フラーレンを用いた場合でも、エネルギー変換効率は 15.6%と高い値を記録しました。

本研究は、広島大学大学院先進理工系科学研究科の尾坂格 教授、三木江翼 助教、山中澁大 特任助教、森奥友和 氏（R2 年度博士課程前期修了）、羽田百伽 氏（大学院博士前期課程 2 年）、京都大学大学院工学研究科の大北英生 教授、キムヒョンド 助教、佐藤友揮 氏（大学院博士後期課程 3 年）、ジョンジフン 氏（大学院博士後期課程 3 年）、大阪大学産業科学研究所の家裕隆 教授、理化学研究所の但馬敬介 チームディレクター、中野恭兵 上級研究員、筑波大学数理解析系の石井宏幸 教授、日本電子株式会社の西山裕介 博士らの共同研究によるものです。

本研究成果は、科学技術振興機構（JST）の未来社会創造事業および ALCA-Next（研究開発課題名：「革新的有機半導体の開発と有機太陽電池効率 20%への挑戦」、研究開発代表者：尾坂格（広島大学 教授）、研究開発期間：令和 2 年 11 月～令和 7 年 3 月、令和 7 年 4 月～令和 11 年 3 月）、および新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）太陽光発電主力電源化技術開発事業（研究開発課題名：「シースルー型有機薄膜太陽電池の高効率化およびモジュール化技術開発」、研究開発代表者：尾坂格（広島大学 教授）、研究開発期間：令和 5 年 7 月～令和 7 年 3 月）の支援を受けて行われました。

【本成果の位置づけと今後の展開】

本研究は、「結晶性を高めなくても、高い電荷輸送性を実現できる」という従来のポリマー半導体の常識を覆す重要な成果です。これにより、トレードオフであった高い溶解性と高い電荷移動度を両立することが可能となり、高性能で実用的なポリマー半導体の開発が加速されることが期待されます。また、安価なアクセプター材料である PCBM を用い、300 nm と厚膜の発電層を用いても高い変換効率を実現できたことは、OPV の社会実装に向けた大きな前進であると言えます。

【参考資料】

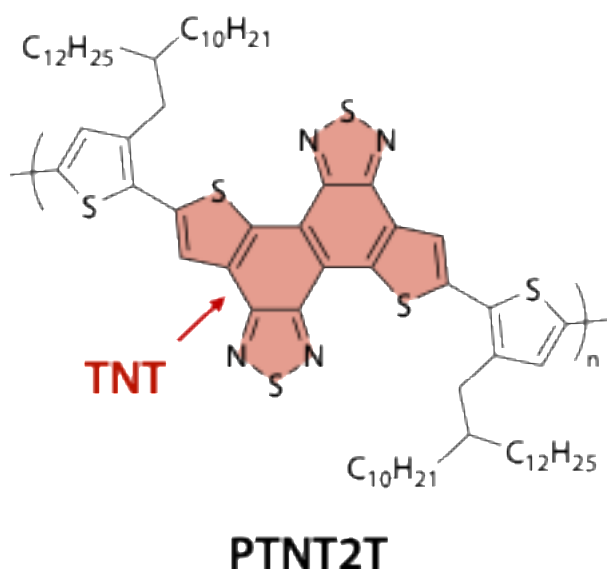


図 1 広島大学のグループが以前に開発した TNT 骨格（赤色部位）を有するポリマー半導体 PTNT2T の化学構造（2024 年 11 月 18 日プレスリリース：[構造拡張によりポリマー半導体の電荷移動度向上に成功～有機薄膜太陽電池の性能向上にも大きく貢献～](#)）。

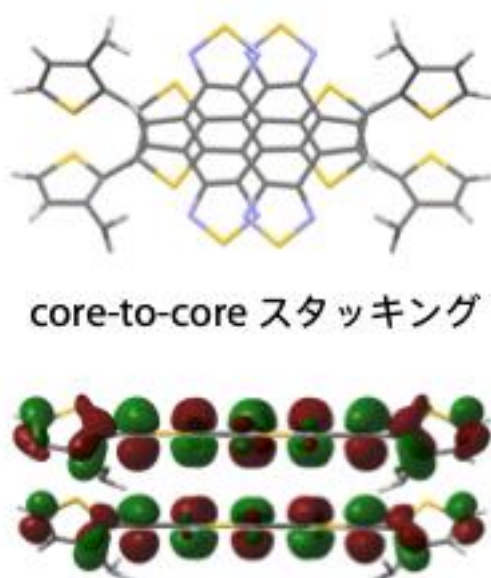


図 2 PTNT2T のモデル化合物の結晶構造：（上）真上から見た構造、（下）真横から見た構造に分子軌道を重ね合わせた。TNT 骨格同士が大きく重なり合う core-to-core

スタッキングが形成されている。このスタッキング構造により、分子軌道の重なりが通常の3倍となり、分子間でも効率的に電荷を輸送できる。

<用語解説>

[1] ポリマー半導体

炭素-炭素単結合と二重結合が交互に連なった π 共役構造を主鎖にもつ有機高分子化合物（プラスチック）。 π 共役系ポリマーとも呼ばれ、起源は白川英樹（2000年ノーベル化学賞受賞）らにより開発されたポリアセチレンにあり、日本発祥の材料である。プラスチックでありながら半導体の性質を持つ。有機溶剤に溶けて、薄膜を形成するため、印刷できる半導体として、次世代型薄膜デバイスへ用いられる。

[2] 電荷移動度

物質中における電荷（正孔や電子）の流れやすさの指標。この値が高いほど、電流が流れやすい。

[3] 有機薄膜太陽電池（OPV）

有機半導体を発電層として用いた薄膜太陽電池の総称。特に有機半導体の溶液を塗布して作製する有機薄膜太陽電池を塗布型OPVと呼ぶ。正孔を輸送するp型有機半導体（ドナー材料とも呼ぶ）と電子を輸送するn型有機半導体（アクセプター材料とも呼ぶ）を混合して発電層とする。ドナー材料としてポリマー半導体、アクセプター材料として、フラレン誘導体や π 共役分子（非フラレン）が一般的に用いられる。ペロブスカイト太陽電池のように発電材料に鉛のような重金属を含まないため、環境にやさしい新型太陽電池として注目されている。

[4] フィルファクター（FF）

光吸収により生成した電荷を効率よく電極へ回収できることを示す指標。

[5] フラレン

炭素原子だけでできたサッカーボールに似た形状の分子構造を持つ炭素の同素体の総称。電子を受け取りやすい性質を持つため、有機薄膜太陽電池では発電時に生じた電子を受け取る「アクセプター材料」として広く利用されている。

[6] 多入射角分光エリプソメトリー測定

基板上の薄膜に照射した光の偏光状態の変化から、薄膜の膜厚や屈折率などの光学構造を逆算する分析手法。膜厚や誘電関数、屈折率、消衰係数、配向パラメータなど様々な物性を求めることができる。

[7] 有効質量

材料の中で電荷がどれだけスムーズに動けるかを示す指標。量子化学に基づき、化合物のエネルギーバンド構造を求め、それに基づいて有効質量を知ることができる。有効質量が小さいほど電荷は加速しやすく、移動しやすくなる。逆に、有効質量が大きいと

電荷は動きにくくなる。

[8] 固体 NMR 測定

核磁気共鳴 (NMR) 分光法の一つで固体そのものを測定する方法。物質の固体中における結晶性や結晶化度、配向度、架橋度などの構造情報を得ることができる。

[9] 電荷再結合

物質内で生成した正孔と電子が出会い、互いに打ち消し合って消失する現象。太陽電池において、電極に電荷が回収される前に電荷再結合が起こると、発生した電荷を電力として取り出せなくなるため、太陽電池の性能が低下する。