

審査の結果の要旨

氏名 宮西 将史

本論文において、学位請求者（宮西 将史）は有機薄膜太陽電池のドナーとアクセプターのナノ構造を分子設計によって合理的に制御し、光電変換素子の性能を向上させる手法を示すことを目的とした研究を行なった。本論文は第6章から構成されている。

第1章では、研究の背景、目的が論じられており、近年までの関連論文の成果や問題点などを示すことで、本論文の研究の意義づけが明確にされている。

第2章の架橋可能ポリチオフェンにおいては、光電変換素子の初期特性と架橋性を両立する立場から、末端二重結合を有するポリマーの設計とそれを精密に合成する手法が示されている。このような分子構造の制御されたポリマーを用いて薄膜中で架橋反応を進行させ、ポリマーの結晶化が阻害されることで、混合薄膜中の相分離構造を安定化させることに成功している。その結果として光電変換素子の熱安定性を向上させることに成功している。本研究はポリマーの架橋反応を用いて光電変換素子の熱安定性を向上させた初めての研究成果であり、その後同様の手法を用いた研究論文が多く報告されていることから、有機薄膜太陽電池のナノ構造を安定化させる先駆的な手法を示したと評価できる。

第3章と4章においては、ドナーとアクセプターの混合に頼らずに、両者が連結された単一分子を用いて効率的かつ安定性の高い混合ナノ構造を合理的に構築する手法が述べられている。これまで、単一分子を用いた光電変換素子ではドナー部位とアクセプター部位がオーダー（結晶性）の高いドメインを形成することが難しく太陽電池のFFが非常に低いという問題があった。そこで本論文では、結晶性のドナーである P3HT ブロックとアクセプターであるフラレンの連結された半導体ポリマーブロックからなるブロックコポリマーを設計することでこのような問題を解決する手法を提示している。

第3章において、擬リビング重合を用いた機能性半導体ブロックコポリマーの合成、クリックケミストリーを用いたフラレンとポリマー側鎖の結合という手法を用いることによって、設計された通りの分子構造の制御されたフラレン連結半導体ブロックコポリマーの合成に成功している。

第4章において、分子構造の精密に制御されたブロックコポリマーを用いることで、自発的に結晶性のドナー部位とアクセプターの連結部位が 20nm スケールで相分離した構造を構築することに成功している。このように、ドナーとアクセプターの相分離構造を自己組

織化によって得ることによって、130度という高温で80時間熱処理を行なっても光電変換効率がほとんど低下しないことを確かめている。物理混合の系では熱による相分離の進行と光電変換特性の劣化が不可避であることから、本手法は単一分子を用いた構造制御の有用性を初めて示した研究として認められる。

また、合成したブロックコポリマーのブロック比率を最適化することで最終的にFFの値が63となり、光電変換効率2.5%を達成するに至っている。この光電変換効率は単一成分を用いた系では最高値であり、FFの値、外部量子収率EQEの値が従来の単一分子を用いた系より飛躍的に向上し、物理混合の系とほぼ同等の値となっている。この結果は、精密に設計された単一分子を用いて光電変換に効率的な構造を構築することが可能であることを示しており、単一分子による構造制御が物理混合の系に置き換わる手法となりうることを示している。さらに、配向制御などを可能にする分子設計を行うことで将来的に物理混合を超える構造を構築できる可能性が期待できる点で本研究成果は精密な分子設計に基づいたナノ構造制御の重要性を十分に示せたといえる。

第5章では大面積太陽電池において分子の自己組織化を用いた構造制御の重要性を論じている。

第6章では本研究の総括及び今後の展望が論じられている。

本論文における、機能性半導体の分子設計やナノ構造制御の手法は、今後の有機デバイスの高効率化や安定性の向上に向けての新規材料の創出や構造制御の手法に指針を与える、素晴らしい成果であるといえる。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。