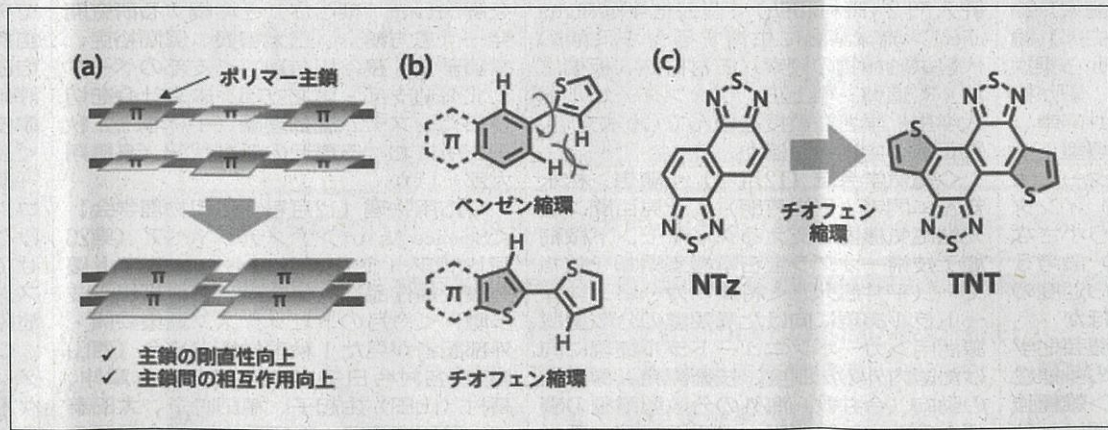


# 広島大 電荷移動度向上に成功

広島大学大学院先進理工系科学研究科応用化学プログラムの尾坂格教授、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らの共同研究チームは、ポリマー半導体に用いる新しい $\pi$ 電子系骨格を開発したと発表した。同骨格を用いて合成したポリマー半導体は電荷移動度が高く、有機トランジスタ（OFET）の電荷移動度と有機薄膜太陽電池（OPV）のエネルギー変換効率を大きく向上させることに成功した。IOT社会や低炭素化社会の実現に貢献することが期待される。成果は国際学術誌「Chemical Science」11月18日付に掲載された。



(a)  $\pi$ 電子系骨格の構造拡張により主鎖の剛直性や相互作用が向上する。(b) 構造末端にチオフェンを縮環することで、例えば6員環（ベンゼン）を縮環したときより5員環（チオフェン）を縮環した方が立体障害が軽減され、ポリマー主鎖の共平面性が向上し、より剛直性や相互作用が向上する。(c) 縮環 $\pi$ 電子系骨格「NTz」と研究で開発したチオフェン縮環 $\pi$ 電子系骨格「TNT」の化学構造。(広島大学の尾坂教授、三木江助教提供)

## ポリマー半導体の $\pi$ 電子系骨格開発

ポリマー半導体は印刷プロセスで簡単に薄膜化できることからOFETやOPVなどの次世代電子デバイスへの応用が期待されている。この中で、ポリマー半導体の電荷輸送性を高める

ためポリマー主鎖の共平面性や剛直性を高めることが課題だった。またこれに対し、ポリマーの主鎖を構成するビルディングユニットとして縮合多環（縮環）系 $\pi$ 電子系骨格の導入、特にチオフェンを構造末端に縮環して $\pi$ 電子系骨格を拡張するユニット

トとの立体障害が軽減されると考えられていた。これまで研究グループは、 $\pi$ 電子系骨格としてナフトビスチアジアンzol（NTz）を有するポリマー半導体を各種開発していた。そこで今回、ポリマー半導体のさらなる高性能化を目指して、NTzの末端にチオフェンを縮環した $\pi$ 電子系骨格であるジチエノナフトビスチアジアンzol（TNT）の開発を進めた。既に開発していたチオフェン縮環反応にマイクロ波を用いることで、反応機構上困難な電子不足性の $\pi$ 電子系骨格にチオフェンを縮環する反応の効果的な進行を実現した。

続いてTNTを有するポリマーPNTNTzとPTNTz-TFを合成し、分析

した結果、TNT系ポリマーはNTz系ポリマーに比べて、ポリマー主鎖の剛直性やポリマー主鎖間の相互作用が向上していることがわかった。これらポリマー半導体を活性層に用いたOFETを作製したところ、TNT系ポリマーはNTz系ポリマーに比べて大幅に高い電荷移動度を示した。さらにPNTNTz-TFを発電層に用いたOPVセルはPNTz-TFを用いたOPVセルよりも1.3倍高いOPVの世界最高水準に匹敵する17.4%のエネルギー変換効率を示した。今後は開発したTNTを用いて新たな有機半導体材料を合成するとともに、さまざまな有機デバイスなどへ応用展開することも検討しているという。

三木江助教の話「この研究成果の鍵は新しい $\pi$ 電子系骨格の合成収率の改善で、当初は1%でしたが最終的には60%まで向上しました。また、骨格の精製にもこだわり、ほぼ100%に近い純度で合成することができました。その結果、高品質なポリマー材料が再現性よく得られるようになり、デバイスの高性能化に成功しました。これは学生たちが根気強く実験を行ってくれたおかげです。今後はさらに太陽電池の効率向上につなげて

いきたいと思っています。」