

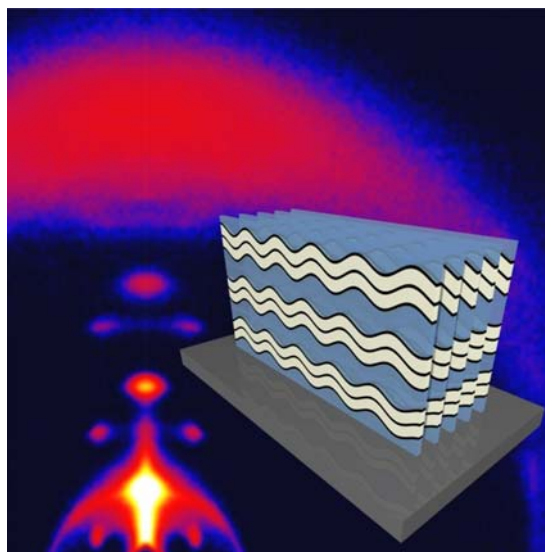
【再生可能エネルギー（太陽電池）】 共役系高分子

仮訳

有機太陽電池材料の二層構造を発見（米国）

本発見が性能向上の手掛かりとなり、改良された特性を有する材料の合成を導く

【2012年4月24日・Upton, NY】最高クラスの性能を持つ有機太陽電池材料のうちの1つを詳細に調査したところ、通常とは異なる二層状の構造が解明された。この二層構造は、材料による太陽光の電力変換における優れた性能の説明となり、さらに向上した特性を有する新たな材料の合成につながる。2012年4月24日の『Nature Communications』誌にて発表された本研究は、米国エネルギー省(DOE)のブルックヘブン国立研究所(Brookhaven National Laboratory)の科学者により実施された。また、米国のStony Brook University、韓国のSeoul National University、ドイツのMax Planck Institute for Polymer Research、および米国のKonarka Technologies社が共同研究を行った。



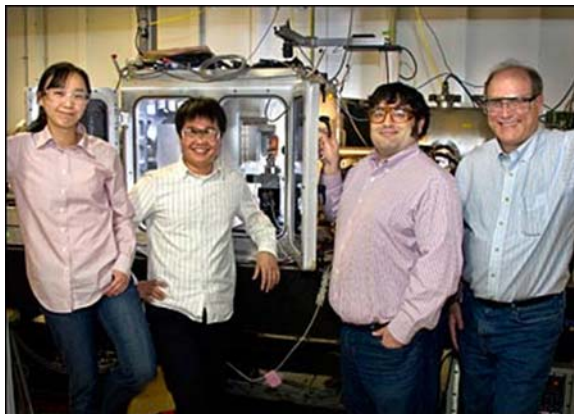
太陽光材料の構造細部：二層高分子主鎖モチーフ(立体画像)は、NSLSのビームラインで獲得されたX線散乱パターン(背景)から得られた。立体画像の黄色い部分はペアになった主鎖で、青い部分は液体に似た側鎖を表している。

PCDTBTという名で知られる材料は、アルキル側鎖を有する鎖状炭素骨格で構成された分子である「ポリカルバゾール(polycarbazole) 共役系高分子」である。電子の移動——電子の「供与」および「受容」の両方の——能力を有するため、PCDTBTは現在使用されている有機太陽電池材料の中でも最良のものであり、有機太陽電池における変換効率を7.2%にまで向上させて太陽光を電力に変換することが可能である。

ブルックヘブン研究所の物理学者Benjamin Ocko氏は次のように語る。「この材料は広く研究されてきたという事実にも関わらず、材料が持つ優れた性能の根拠を示すような詳細な構造上の特色に関して、報告した者は誰もいなかった。この材料の性能が何故大変優れているかを理解すれば、科学者が本材料の本質的な特性を利用でき、それによりディス

プレイや固体照明、トランジスター、そして高性能なPVセルといった幅広い用途に向けた新たな材料の設計が可能となる。」

分子構造を調べるため、ブルックヘブン研究所の国立シンクロトン光源施設 ([National Synchrotron Light Source : NSLS](#))にて、研究者は高分解能X線散乱法を用いて、PCDTBT薄膜フィルムに強力なX線ビームを照射した。強度の低いX線を用いていた以前の研究と異なり、本研究では高温における結晶様相の形成が明らかとなった。さらに、回折X線により生



ブルックヘブン研究所の研究チームのメンバー
Xinhui Lu 氏、Htay Hlaing 氏、David Germack 氏、
そして Ben Ocko 氏

じたパターンによると、この構造は、これまで研究されてきた他のすべての有機太陽電池材料で観察された単一の主鎖の構造とは全く異なるパターンの主鎖の対となるペアで構成されている。

本論文の主執筆者であるXinhui Lu氏は、散乱パターンの分析により、高分子の主鎖に沿ったうねりを発見し、近接する主鎖のうねりが、どのようにそれぞれに対応してシフトするのかを発見した。分子モデル・シミュレーションを実行することにより、著者はどの高分子主鎖の配列が最も安定するかを予測できた。

共役系高分子の中で、この主鎖は電子の導電のパスを提供し、そして普通の油に類似したアルキル側鎖は、プロセスに必要な溶媒となる。この側鎖は必要であるけれども、高分子の電気性能に支障をきたしてしまう。本研究の科学者曰く、PCDTBTは、主にアルキル材料が少ない主鎖で構成されていることから、斬新であるという。「油や水と同様に、高分子の共役主鎖のペアは、アルキル側鎖とは‘相分離’しており、このため二層構造を生じさせる。」と語るのは、本論文の共著者の1人であるDavid Germack氏である。材料の優れた電気特性の一因と想定されるのが、この構造のモチーフであり、これを理解することで、新たな有機太陽電池材料の設計に対するガイドとなりうる。

有機太陽電池の開発や商品化における世界的企業であるKonarka Technologies 社の研究主幹Jeff Peet氏は、次のように語る。「我が社には、合成化学や有機太陽光デバイスの製造における優秀な専門家がいる一方、ブルックヘブン研究所で利用可能であるような綿密に構造を評価するツールに乏しい。こうしたツールや、ブルックヘブンの研究パートナーとの共同研究によって、材料間の非常に微小な相違も解明でき、その結果どのようにすれば次世代の太陽電池材料を設計できるかという決定的な見通しが生まれる。」

本研究に携わるその他の研究者に、ブルックヘブン研究所およびStony Brook UniversityのHtay Hlaing氏、Seoul National UniversityのWon Ho Jo氏、Max Planck Institute for Polymer ResearchのDenis Andrienko氏およびKurt Kremer氏がいる。

本研究の資金提供元には、DOE科学局、Konarka Technologies社、ブルックヘブン研究所Energy Laboratory Research and Development Initiative、ドイツ研究振興協会(German Research Foundation)、およびドイツ教育・研究省がいる。

ブルックヘブンのNational Synchrotron Light Sourceもまた、DOE科学局の支援を受けている。

DOEの科学局は、物理化学の基礎研究をサポートする米国における唯一の大規模な組織で、現代の最も喫緊の課題に取り組んでいる。詳しくはウェブサイトscience.energy.govを参照のこと。

関連リンク

[Scientific paper: "Bilayer order in a polycarbazole-conjugated polymer"](#)

翻訳：NEDO（担当 総務企画部 室井 紗織）

出典：本資料は、ブルックヘブン国立研究所の以下の記事を翻訳したものである。

“Scientists Discover Bilayer Structure in Efficient Solar Material”

http://www.bnl.gov/bnlweb/pubaf/pr/PR_display.asp?prID=1405