



小さい励起子束縛エネルギーを示す有機半導体材料の開発と光電変換機能の追求

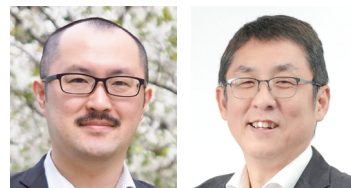
産業科学研究所 ソフトナノマテリアル研究分野

助教 陣内 青萌

 <https://researchmap.jp/jinnai.seihou>

教授 家 裕隆

 <https://researchmap.jp/read0105668>



研究の概要

次世代の環境調和型技術として、有機半導体を活性材料として利用した光電変換デバイスや光化学エネルギー変換触媒が注目を集めています。これらのデバイスや触媒の性能は「有機半導体が光エネルギーを受け取って生じる励起子が、自由電子と正孔に解離する効率」に大きく依存します。しかし、有機半導体は励起子を束縛する力（励起子束縛エネルギー）がシリコンなどの無機半導体に比べて一桁以上大きい場合、光エネルギーを受け取っても自由電子と正孔への変換過程が進行しにくいことが大きな課題となっています。

当研究グループはこの課題を克服するため、独自の鞍型有機半導体分子やスピロ型有機半導体分子を開発し、分子の会合特性やフロンティア軌道の空間配置を制御することで、従来材料よりも小さい励起子束縛エネルギーを示す有機半導体材料の開発に成功しました。さらに、これらの有機半導体分子を活性材料として利用することで、バルクヘテロ接合型有機太陽電池の発電効率が向上するのみならず、単成分有機太陽電池や不均一系有機光触媒として駆動しうることを明らかとしました。

研究の背景と結果

有機太陽電池や不均一系有機光触媒の特性は、励起子が自由電荷（自由電子と正孔）へと分離する効率に依存します。この分離効率を左右する主要因の一つが、励起子を束縛する力である「励起子束縛エネルギー」です。一般的な有機半導体の励起子束縛エネルギーは0.3～1 eVと大きく、無機半導体と比較して一桁以上大きいことが知られています（例えば、シリコンの励起子束縛エネルギーは約0.015 eV）。そのため、有機系太陽電池や不均一系有機光触媒においては、ドナー・アクセプターという2種類の有機半導体を組み合わせたヘテロ接合や、半導体界面を大きくする構造設計が不可欠とされています。しかし、これらの構造はエネルギー変換ロスや駆動安定性の低下、高い材料・開発コストを招く要因となっていることから、新たな視点に基づく有機半導体・デバイス開発が求められています。

当研究グループは、励起子束縛エネルギーの低減に焦点を当てた有機半導体開発に取り組んでいます。励起子束縛エネルギーはクーロンの式で表現することができ、有機半導体の分子デザインを通じて材料の比誘電率 (ϵ_r) を大きくするか、または励起状態における電荷間距離 (R) を大きくすることで励起子束縛エネルギーを低減することができます。我々は独自の鞍型有機半導体分子やスピロ型有機半導体分子を設計・合成し、分子会合特性やフロンティア軌道の空間配置を精密に制御することで、大きい ϵ_r や、 R を有する材料をそれぞれ開発しました。これらの有機半導体は従来と比較して低い水準の励起子束縛エネルギーを示すことを見出しています。さらに、開発した有機半導体を活性材料に利用することで、バルクヘテロ接合型有機太陽電池の発電効率向上を達成しただけでなく、単成分有機太陽電池や不均一系有機光触媒としても駆動しうることを実験的に明らかとしました。

研究の意義と将来展望

本研究成果は、有機半導体における分子会合挙動やフロンティア軌道の空間配置が励起子束縛エネルギーに及ぼす影響を解明した先駆的成果であると同時に、バルクヘテロ接合型有機太陽電池、単成分有機太陽電池、さらには有機光触媒の可能性を実験的に示した重要な一歩となります。

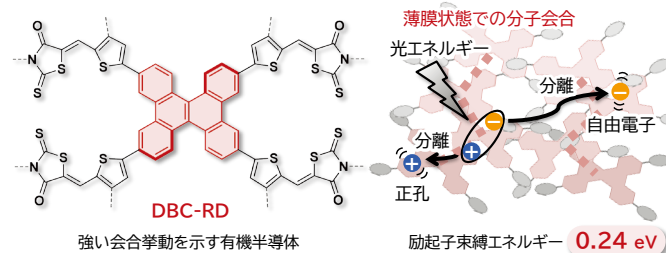
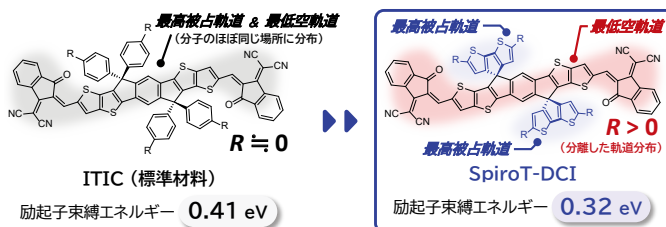


図1：励起子束縛エネルギーと電荷分離過程。

$$\text{励起子束縛エネルギー} \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \times \epsilon_r \times R}$$

e : 電気素量
 ϵ_0 : 真空の誘電率
 ϵ_r : 材料の比誘電率
 R : 電荷間の距離

図2：クーロンの式。



有機太陽電池（バルクヘテロ接合型・単成分型）、不均一系有機光触媒として駆動

図3：小さい励起子束縛エネルギーを示す有機半導体材料の開発。

特許

論文

Mori, Hiroki; Jinnai, Seihou; Ie, Yutaka et al. A dibenzo[g,p]chrysene-based organic semiconductor with small exciton binding energy via molecular aggregation. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63(41), e202409964. doi: 10.1002/anie.202409964
 Wang, Kai; Jinnai, Seihou; Ie, Yutaka et al. Nonfullerene acceptors bearing spiro-substituted bithiophene units in organic solar cells: tuning the frontier molecular orbital distribution to reduce exciton binding energy. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63(47), e202412691. doi: 10.1002/anie.202412691

参考URL <https://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/omm/>

キーワード 有機太陽電池、有機半導体、有機光触媒、有機機能材料、励起子束縛エネルギー