

審査の結果の要旨

氏名 鐘宇飛

本論文 (Study on Interface and Crystallization of Materials in Organic Solar Cells (有機薄膜太陽電池における材料の界面と結晶性に関する研究) は、有機薄膜太陽電池の性能と有機材料の接合界面の構造、および材料の結晶性を実験的に関連付けることで、有機薄膜太陽電池のさらなる高効率化に向けた指針を得ることを目的とした研究をまとめたものであり、以下の 5 章から構成されている。

第 1 章では、有機薄膜太陽電池に関する研究の背景、目的、及び概要が論じられており、近年までの関連論文の成果や問題点などが詳細に記述され、本論文の意義づけが明確にされている。特に本研究での重要な研究対象となる物質界面の分子レベルでの構造が、電荷分離や再結合などの光物理過程どのように関連しているかが解説されている。さらに、電荷分離過程や電荷輸送の効率に対しての有機半導体材料の凝集状態（結晶性）の重要性が強調されており、それらを詳細に研究するために二層型ヘテロ構造を用いることの利点が解説されている。

第 2 章では、ドナー／アクセプター界面への分子双極子層の挿入が、有機薄膜太陽電池の性能に及ぼす影響について、実験法を含めて詳細に述べられている。界面双極子層の存在によって主に開放電圧が変化するが、この時、太陽電池を作成した後に外部から電場を加える事によって、分子双極子の向きを変化させることができることを初めて明らかにしている。その結果として、二層型有機薄膜太陽電池の開放電圧を外部刺激によって制御できることを初めて示している。またその変化は可逆的に行うことが可能であることを実証している。

第 3 章では、有機薄膜太陽電池の短絡電流密度を下げることなく開放電圧を向上させるための「理想的な」界面構造の設計指針について考察している。二層型ヘテロ接合を使った実験によって、界面に薄い絶縁層を挿入する事によって、開放電圧を向上できることを示している。この太陽電池に関して、温度可変測定や等価回路による解析などを行った結果、この開放電圧の向上が、界面における電荷分離状態の高エネルギー化と、電荷の再結合の抑制の 2 つに帰属

されることを明らかにしている。その後、絶縁層の挿入によって著しく減少した電流密度を向上させる手法として、半導体高分子からの励起エネルギーの移動が可能な有機色素を絶縁層にドーピングする手法を提案している。実際の実験の結果、確かに界面への色素ドーピングによって、電圧と電流の向上を両立させることができることを実証している。有機色素が一種の電荷分離中心として働いている可能性について考察している。

第4章では、有機半導体物質の結晶化の影響について述べられている。最近の研究で最も広く用いられているフラー・レン化合物であるPCBMを用い、加熱による薄膜中での結晶化の挙動と、それに伴うエネルギー準位の変化について、初めて詳細な検討を行っている。その結果、加熱に伴って薄膜密度の増加と結晶化が起こっていることを示した。またイオン化エネルギーと電子親和力の測定を行うことで、結晶化に伴ってエネルギー準位が変化することを示し、その変化が主にPCBM薄膜の密度変化に伴う分極エネルギーの変化によるものであると結論づけている。このPCBMの結晶化にともなって、有機太陽電池の特性がどのように変化するかについて実験を行い、その結果として、観察された電子親和力の変化と太陽電池性能がよく対応していることを示している。また、その過程で発見した混合薄膜中の結晶化の誘起効果についても述べられており、PCBM結晶化の高効率な太陽電池への応用についての可能性が示されている。

第5章では、これらの結果を総括し、有機薄膜太陽電池の効率化に向けた分子レベルの界面制御に関して、本研究で得られた知見の有用性と将来展望について述べられている。特に、本研究で示された界面構造や結晶化の制御法を将来的にどのようにナノ構造をもつバルクヘテロ接合構造に適用し、高効率化するかについての可能性が検討されている。

本研究の成果は、有機薄膜太陽電池におけるドナー／アクセプター界面の重要性や材料の結晶化による変化を、シンプルな二層型ヘテロ接合を用いたモデル系によって実験的に明確にした。高効率な電荷分離と電荷の再結合を同時に抑制する「理想的な」界面構造などを提案し、その有用性を示した点で基礎的に重要な意味を持っており、有機太陽電池の変換効率を限界まで押し上げるための新たな指針を与える、優れた研究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。