

## 研究成果最適展開支援事業 (A-STEP) FS ステージ (シーズ顕在化) 事後評価報告書

プロジェクトリーダー (企業責任者) : 綜研化学 (株)

研究責任者 : 神戸大学 森 敦紀

研究開発課題名 : 新規触媒系による高立体規則性ポリ 3-ヘキシルチオフェン (P3HT) の合成法の創成

### 1. 研究開発の目的

溶液から塗布による成膜が可能であり、高キャリア移動度を示す立体規則性の P3HT は、有機薄膜太陽電池を始めとする有機デバイス向けの P 型有機半導体分野でその実用化が期待されている。しかしながら、この材料の従来の合成法は立体規則性の制御、安全性及び収率の向上のために、多段工程、工程間で高い禁水性を維持する等の制限があり、量産性を持った合成法は確立されていない。この P3HT の合成において、本シーズを基にした遷移金属触媒及び促進剤を用いた新規な反応系を創成することにより、従来技術に対して工程数の簡略化、禁水性の緩和及び歩留まりの向上などの優位性が期待できる。その実現化に向けた課題を挙げ、これを検証する。

### 2. 研究開発の概要

#### ①成果

新規反応系にて分子量 1 万以上、立体規則性 99% の P3HT 合成を目標とした。モデル反応系におけるカップリング反応では、高収率で生成物を得ることに成功し、チオフェン-チオフェンカップリングでの適用においても収率 60% 程度の生成物が得られ、反応系の有効性が検証できた。得られた知見から P3HT 合成検討を行った結果、収率 15% で分子量 1 万、立体規則性 99% 以上のポリマー合成に成功した。更に、P3HT 反応系での収率向上を目的に、添加剤、触媒の検討およびモデル物質を用い検討した結果、更に温和な条件下で高活性な触媒系を見出すことに成功した。これら触媒および添加剤を用いて、P3HT の合成条件を検討した結果、収率 60% 以上で分子量 4 万、立体規則性 99% のポリマー合成に成功し、目標を達成した。

#### ②今後の展開

今回の事業内で新規合成法による高い立体規則性を有す P3HT 合成の可能性は顕在化出来た。今後、更なる触媒系の検討を共同で進め、更なる高収率化を目指す。また、実際の OPV (有機薄膜太陽電池) での適用評価を行うことで、実用的な材料合成法確立と材料の実用化を行う。更には、用いる単量体を各種共役系材料に拡張し、工業的に有用で簡便な半導体高分子材料合成法を継続して検討する。

### 3. 総合所見

概ね期待通りの成果が得られ、イノベーション創出が期待される。高い立体規則性を有した P3HT ポリマーの量産性を持つ新規な合成法を見出しており、将来の有機薄膜太陽電池や有機 FET に対する社会ニーズに応えることができ、この分野における国際競争力を高める可能性がある。