2026 年 8 月 28 日

特異な非平面形状を有する電子輸送材料を開発
～ペロブスカイト太陽電池の低コスト化と次世代スピントロニクスへの利用に期待～

【本研究のポイント】

・結合開裂法という独自の合成技術を基盤に、特異な「キラル[注 1)]X 形」の分子形状を有する電子輸送材料[注 2)]を開発した。
・本材料はペロブスカイト太陽電池[注 3)]の電子輸送層として機能し、汎用（はんよう）されるフラーレン系材料に匹敵する性能を示した。
・加えて、同材料は片方のスピン状態を有する電子[注 4)]だけを選択的に流すことも可能で、次世代スピントロニクス[注 5)]材料としても期待される。

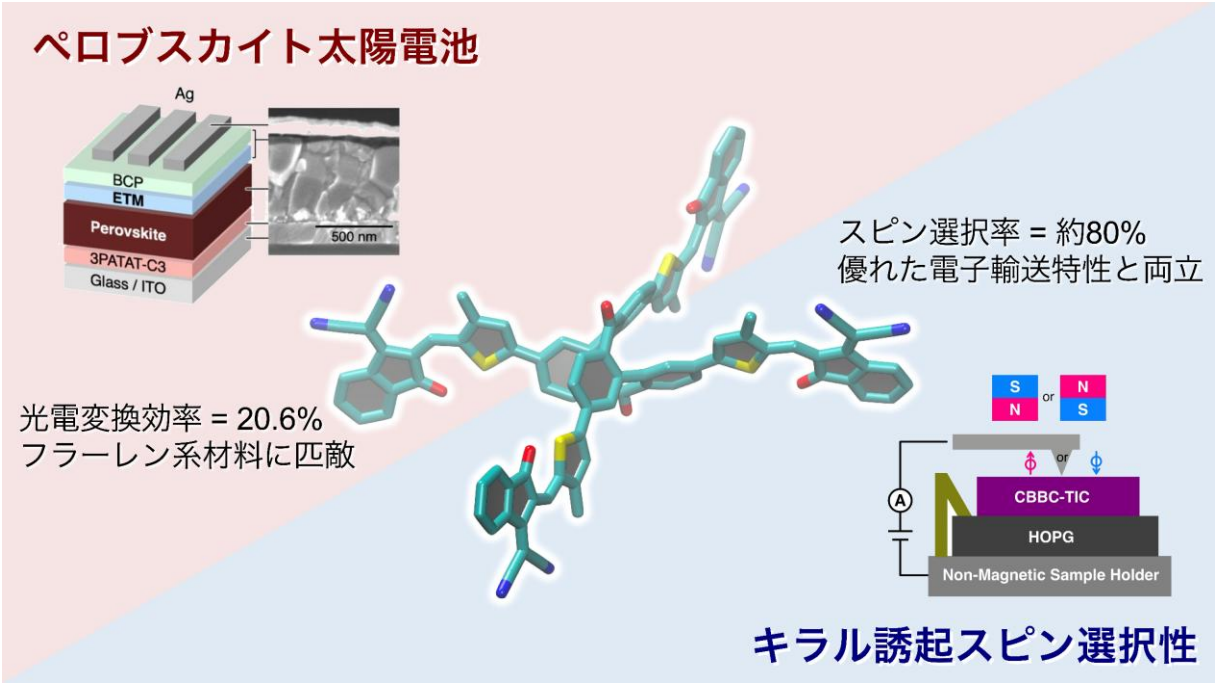
【研究概要】

名古屋大学大学院工学研究科の福井 識人 准教授らの研究グループは、京都大学化学研究所の若宮 淳志 教授、中村 智也 准教授、梶 弘典 教授、京都大学大学院工学研究科の浦谷 浩輝 助教、東京都立大学大学院都市環境科学研究科の石割 文崇 准教授との共同で、「キラル X 形」という特異な分子形状を有する電子輸送材料を開発しました。

電子輸送材料はさまざまな有機電子デバイスの基本的な構成要素です。特に、次世代太陽電池として期待されるペロブスカイト太陽電池では、溶液塗布によって成膜が可能な電子輸送材料が必要です。現在はこのような材料としてフラーレン系電子受容体[注 6)]が広く用いられています。しかし、フラーレンは材料コストが高いことと分子の設計性が限られていることが課題でした。加えて、近年ではキラルな有機分子が片方のスピン状態を有する電子だけを選択的に流す現象（キラル誘起スピン選択性[注 7)]）を示すことが分かり、次世代スピントロニクスへの応用が期待されています。しかし、優れたスピン選択率を示す電子輸送材料は限られており、新材料の探索が求められています。

本研究では、グループが独自に開発した8の字型 π 共役分子（CBBC）の変換によって新規電子輸送材料を開発しました。この電子輸送材料は、「キラル X 形」という複雑にねじれた分子形状を有するにもかかわらず、分子内結合開裂法という独自の合成技術を基盤として、高価な原料を用いずに、簡便に合成が可能です。重要なことに、今回開発した材料を電子輸送層として含むペロブスカイト太陽電池素子は、汎用されるフラーレン系材料から成る素子に匹敵する光電変換効率[注 8)]を示しました。さらに、同材料は優れた選択率でキラル誘起スピン選択性を示しました。本成果は、CBBC が電子輸送材料の基本骨格として有効であることを実証するものであり、次世代材料を開発する上で重要な技術基盤を与えます。

本研究成果は、2026 年 8 月 26 日（現地時間）付で国際学術誌『Angewandte Chemie International Edition』に掲載されました。



【研究背景と内容】

電子輸送材料は有機エレクトロニクスにおける重要な構成要素です。現在主流の電子輸送材料はフラーレンおよびその誘導体です(図 1a)。通常の有機 π 共役分子[注 9)]は主として平面構造を示す一方、フラーレンは特異な球形構造を示します。そのため、固体中で等方的な電子輸送経路を構築し、高い移動度を示します。しかし、フラーレンは合成コストが高いとともに、多彩な誘導化が困難であることが課題です。そのため近年では、フラーレンを基本骨格としない電子輸送材料(通称、非フラーレン系電子受容体)の開発が世界的に進められています(図 1b)。ただし、その多くは平面形の構造を有するものであるため、フラーレンのように非平面形の構造を有する骨格の利用が期待されます。しかし、優れた電子受容性と合成容易性を両立する非平面分子はわずかであり、候補物質の探索は十分には行われていません。

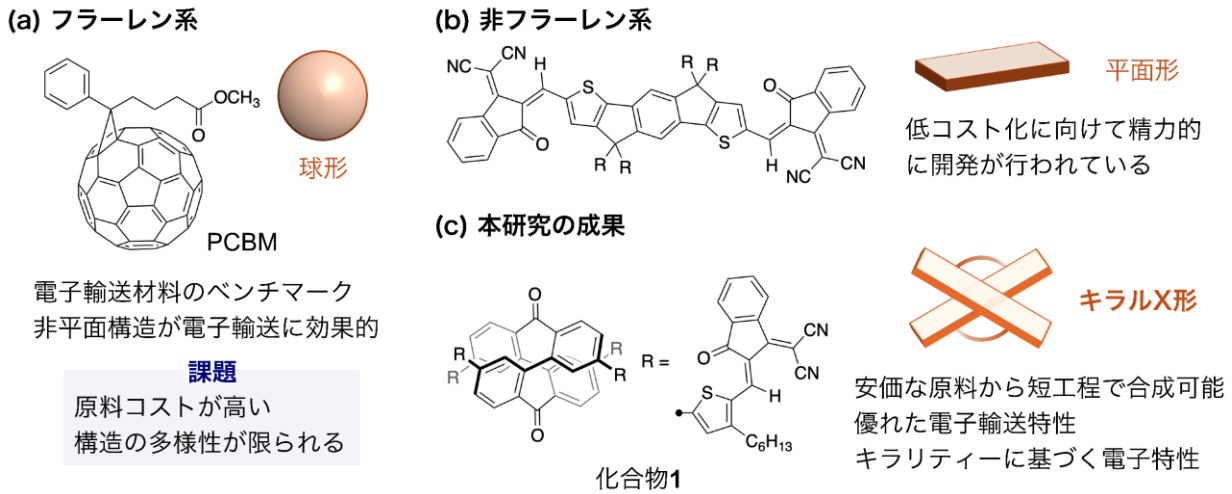
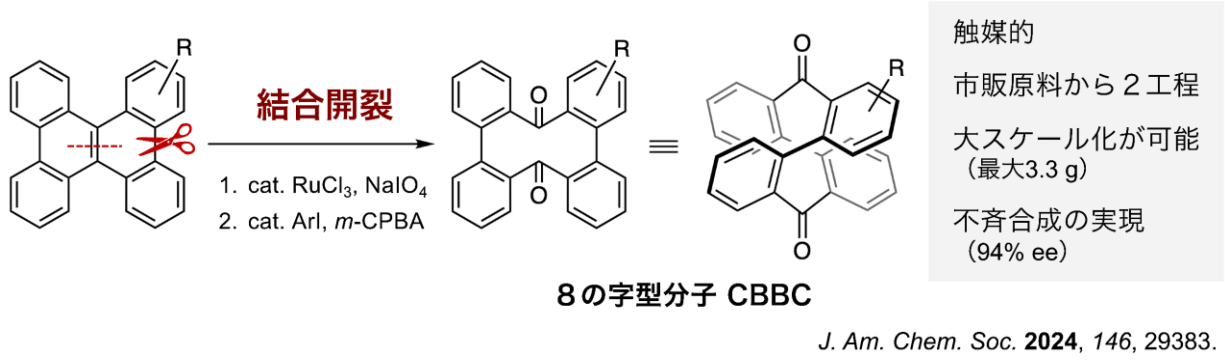


図 1 電子輸送材料の構造と特徴

電子輸送材料の利用先の一つにペロブスカイト太陽電池があります。ペロブスカイト太陽電池は次世代太陽電池の一つであり、現在は実用化を目指した素子の最適化が進められています。ペロブスカイト太陽電池の中でも逆型と呼ばれる素子構造は、正孔回収単分子膜材料[注 10)]の飛躍的な発展により、実用化に向けた有力候補となっています。この素子構造ではペロブスカイト層の上部に電子輸送材料を溶液プロセスで塗布するため、溶液塗布可能で高移動度を示す電子輸送材料が求められています。

加えて近年では、キラルな構造を有する電子輸送材料にも注目が寄せられています。このような分子は、片方のスピン状態を有する電子だけを選択的に流す現象（キラル誘起スピン選択性）を示すため、次世代スピントロニクスへの応用が期待されています。ただし、優れた電子移動度と高いスピン選択性を両立する材料は未開拓です。

ごく最近、研究グループは、市販の π 共役分子であるジベンゾクリセンの骨格内部の結合を酸化的に開裂することで、8の字型にねじれた π 共役分子（CBBC）が簡便かつ大スケール、高エナンチオ選択的[注 1)]に合成できることを報告しています（図 2）。CBBC は共役系内にカルボニル基を有するため電子受容性に優れています。また、CBBC の非平面構造は、フラーレンのように、固体中で等方的な電子輸送経路を構築することに有利です。



J. Am. Chem. Soc. **2024**, *146*, 29383.

図 2 結合開裂法による8の字型分子 CBBC の簡便合成

今回、研究グループは CBBC の骨格周辺部位に電子受容性の官能基を導入した新たな化合物 **1** を創出しました（図 1c）。化合物 **1** の合成は、簡便かつ大量に合成が可能な臭素化 CBBC を出発原料として、わずか 3 工程で行われました（図 3a）。そのため、構造の多様化が容易であり、本成果では他にも 2 種類の類縁体の合成に成功しています。化合物 **1** は、「キラル X 形」という特異な分子形状を示し、この骨格において二つの電子受容性に優れた直線状の部分構造（化合物 **2** に相当）はねじれながら立体交差するように配列されています（図 3b）。化合物 **1** は電子受容性に優れ、真空準位に対して約−4.6 eV に LUMO 準位[注 11)]を示します。また、化合物 **1** は加熱したテトラクロロエタンに可溶で、得られた溶液をスピンコートすることで、溶液プロセスによって薄膜を作製できました。重要なことに、作製した薄膜は、参照分子 **2** と比べて、2 倍近く高い電子移動度を示しました。この結果は、理論計算によるシミュレーションによっても支持されており、化合物 **1** の特異な立体交差構造において二つの直線状の部分構造が有効に相互作用したためだと解釈できます。さらに同材料を用いて作製したペロブスカイト太陽電池素子は、光電変換効率 20.6%を記録しました（図 3c）。この効率は同分野におけるベンチマーク材料で

あるフラーレン誘導体(PCBM)[注 6)]を用いた場合の効率(21.2%)に匹敵しています。また、化合物 1 の片方の光学異性体[注 1)]のみからなる薄膜はキラル誘起スピン選択性を示しました(図 3d)。測定によって得られたスピン選択率は約 80%であり、過去に報告されたキラル電子輸送材料と比べて十分に高く、分子性のキラル正孔輸送材料や高分子材料、無機材料と比較してもトップレベルの値です。

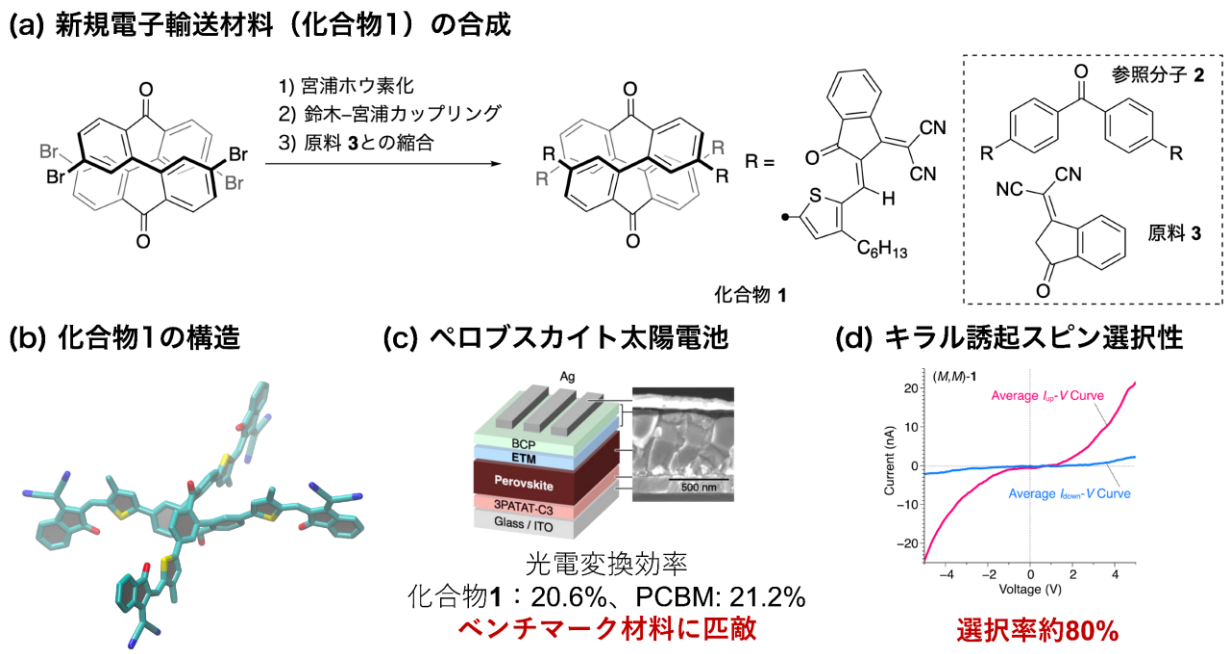


図 3 本研究で開発した新規電子輸送材料の合成、構造、ならびに素子特性

【成果の意義】

非フラーレン系電子輸送材料の開発は、世界中で精力的に進められているものの、その基本骨格はインダセノジチオフェンやペリレンジイミドといった一部の分子に限られていました。これに対して本成果は、独自分子である CBBC が新規電子輸送材料を設計する上での基本骨格として有用であることを示しています。今後は CBBC の変換によって数多くの電子輸送材料が創出され、次世代材料の開発につながることが期待されます。

【付記】

本研究は以下の支援のもとで行われたものです。

- 日本学術振興会：科学研究費助成事業 学術変革領域研究(A)「高密度共役の科学：電子共役概念の変革と電子物性をつなぐ」(JP20H05863; JP20H05867)、学術変革領域研究(A)「動的エキシトンの学理構築と機能開拓」(JP23H03947; JP20H05840; JP20H05836; JP20H05831; JP23H03976)、学術変革領域研究(A)「π 分子複雑性の追究が紡ぐ機能科学」(JP25H01262; JP26H01343)、学術変革領域研究(A)「フォトキネティシズム：励起現象のマルチスケール速度論と革新的光機能」(JP26H00371; JP26H00372; JP26H00381)、基盤研究(B)「π共役分子の骨格内部の結合開裂を基盤とする新物質創製」(JP24K01467)、基盤研究(B)「材料化学アプローチによる鉛フリーペロブスカイト太陽電池の高性能化」(JP24K01607)、挑

戦的研究（萌芽）「8の字型構造を有する液晶用キラルドーパントの開発」（JP24K21766）、基盤研究(A)「Sn系ペロブスカイト半導体の薄膜界面の電子・構造制御」（JP24H00481）
- 科学技術振興機構：戦略的創造研究推進事業 さきがけ「π共役分子の内部を探索空間とする未来材料の創製」（JPMJPR21Q7）、さきがけ「界面構造制御による高感度ペロブスカイト光センサの開発」（JPMJPR25H6）、さきがけ「機能団の自在配列を可能にする多面性ポリマーの創製」（JPMJPR21A2）、CREST「マルチモーダル計測に基づく光機能デバイスのマルチスケールダイナミクス解析」（JPMJCR2431）、CREST「光電変換薄膜探索法の開発とマイクロ波誘電学理」（JPMJCR23O2）、ERATO「山本量子キラル変換プロジェクト」（JPMJER2503）、創発的研究支援事業「発想の逆転が拓く8の字型π共役分子の機能創発」（JPMJFR232G）、創発的研究支援事業「高度な非対称物性を発現するキラル二面性物質」（JPMJFR246J）、未来社会創造事業「Snからなる Pbフリーペロブスカイト太陽電池の開発」（JPMJMI22E2）
- 新エネルギー・産業技術総合開発機構：「界面材料化学を基軸とする高性能オールペロブスカイトタンデム型太陽電池の研究開発」（JPNP25011）、グリーンイノベーション基金事業「設置自由度の高いペロブスカイト太陽電池の実用化開発」（JPNP21016）
- 理研 TRIP イニシアティブ

【用語説明】

注 1）キラル、エナンチオ選択的、光学異性体：
右手と左手のように、鏡写しの関係にありつつもそれぞれを重ね合わせることができない性質をキラルという。ここで鏡写しの関係にある二つの化合物を光学異性体と呼ぶ。光学異性体のうち片方を化学的に与える合成手法をエナンチオ選択的合成という。

注 2）電子輸送材料：
固体中において電子を効率的に輸送する材料。n 型有機半導体とも呼ばれる。

注 3）ペロブスカイト太陽電池：
ペロブスカイト結晶構造を持つ物質を光電変換層に利用した次世代太陽電池。変換効率を向上させるためには、光電変換層から効率的に電子を抽出する必要があり、そのためには適切な電子輸送層をペロブスカイト層の上に成膜させる必要がある。

注 4）スピン状態を有する電子：
電子が持つ量子力学的な性質の一つで、小さな磁石のような役割をする固有の角運動量のこと。古典的には、電子が自転していると考えた場合に生じる、上向きと下向きの二つの異なる状態に相当する。

注 5）スピントロニクス：
電子の持つ電荷とスピンの両方を同時に利用・制御する技術。省電力半導体や大容量メモリなどの基盤技術として期待される。

注 6）フラーレン系電子受容体、フラーレン誘導体（PCBM）：
フラーレンに対して化学変換を施すことで合成される電子輸送材料の総称。代表的な分子はフェニル C_{61} 酪酸メチルエステル（PCBM）。

注 7)キラル誘起スピン選択性:
CISS(Chirality-Induced Spin Selectivity の略)効果とも言われる。キラルな分子や物質において、電子のスピンの向きによって電流の流れやすさが異なる現象。本研究では、強磁性電極の磁化方向を反転させた際に生じる電流値の差として評価した。

注 8)光電変換効率:
太陽電池素子が吸収した太陽光エネルギーのうち電力に変換された割合。

注 9)有機 π 共役分子:
主として sp^2 炭素から成る有機分子の総称。プラスチックのような汎用材料から有機半導体や有機 EL といった次世代材料に至るさまざまな材料に含まれ、機能の根幹を担っている。

注 10)正孔回収単分子膜材料:
ペロブスカイト太陽電池の基板である金属酸化物の表面に電子供与性に優れた自己組織化単分子膜を形成させる材料。素子の高性能化と材料コストの低下の両面から効果的である。

注 11)LUMO 準位:
分子の最低空軌道のエネルギー準位。LUMO 準位が低いほど、分子は電子を受け取りやすくなる。

【論文情報】

雑誌名:Angewandte Chemie International Edition
論文タイトル:An X-Shaped Chiral Non-Fullerene n-Type Semiconductor: Application in Perovskite Solar Cells and Chirality-Induced Spin Selectivity
著者:坂本 祐樹(名古屋大学)、大塚 宏樹(名古屋大学)、石原 蔵人(京都大学)、Shuang Li(大阪大学)、嶋﨑 愛(京都大学)、原松 恵(京都大学)、平野 純一朗(名古屋大学)、野上 純太郎(名古屋大学(当時))、忍久保 洋(名古屋大学)、浦谷 浩輝*(京都大学)、梶 弘典*(京都大学)、石割 文崇*(東京都立大学)、佐伯 昭紀(大阪大学)、中村 智也*(京都大学)、若宮 淳志*(京都大学)、福井 識人*(名古屋大学)(*は責任著者)
DOI:10.1002/anie.9296585

【報道連絡先】

名古屋大学 総務部広報課
TEL:052-558-9735　FAX:052-788-6272
E-mail:nu_research@t.mail.nagoya-u.ac.jp

京都大学 広報室 国際広報班
TEL:075-753-5727　FAX:075-753-2094
E-mail: comms@mail2.adm.kyoto-u.ac.jp

東京都公立大学法人 東京都立大学 管理部企画広報課広報係
TEL:042-677-1806
E-mail:info@jmj.tmu.ac.jp

科学技術振興機構 広報課
TEL:03-5214-8404　FAX:03-5214-8432
E-mail:jstkoho@jst.go.jp

【JST 事業に関する連絡先】
科学技術振興機構 創発的研究推進部
加藤 豪(かとう ごう)
TEL:03-5214-7276
E-mail:souhatsu-inquiry@jst.go.jp