【119】

氏　名（本籍）	豊島　晋（とよしま　すすむ）（茨城県）
学位の種類	博　士（工　学）
学位記番号	博　甲　第　4582　号
学位授与年月日	平成20年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審査研究科	数理物質科学研究科
学位論文題目	**有機薄膜太陽電池における有機分子／金属界面の電子状態**

主　査	筑波大学教授	理学博士	秋本克洋
副　査	筑波大学教授	工学博士	重川秀実
副　査	筑波大学准教授	博士（工学）	末益　崇
副　査	東京大学教授	理学博士	増田　茂

論文の内容の要旨

化石燃料のエネルギー利用は，その枯渇，環境への影響が懸念され，クリーンなエネルギー源が必要とされている。クリーンエネルギー源の一つとして太陽光発電が期待されており，太陽電池はSiや化合物半導体を用いてすでに実用化されている。しかしながらSiや化合物半導体を用いた太陽電池の発電コストは化石燃料利用した発電コストに比べて高く普及が進んでいないのが現状である。太陽電池の高効率化と低コスト化が重要とされている。このような状況の中で，低価格化が可能な有機太陽電池に大きな期待が寄せられている。有機太陽電池の変換効率は4～5%であり，実用に資するためには更なる高効率化のためのブレークスルーが必要である。

本論文では，有機太陽電池の高効率化をめざし，電極と光吸収層の間に挿入するバッファ層の働きについて電子構造の側面から明らかにすることを目的に光電子分光法，準安定励起原子電子分光を用いて解析を行なった。今回用いたバッファ層材料は2, 9-Dimethyl-4, 7-dipheny-1, 10-phenanthroline（Bathocuproine, BCPと略）はバッファ層に使われる代表的材料であり，BCPと電極界面の電子構造を調べた。電極金属には仕事関数が異なるCa，Mg，Ag，Al，In，Auを用いた。電子分光測定用試料は，金属電極を超高真空中で蒸着し，その基板にBCPを蒸着，あるいは金属とBCPを共蒸着したものを用いた。

Au上のBCPでは，Auの光電子スペクトルにBCP関与のスペクトルか重なり，BCPの膜厚を増すに従い徐々にAuのスペクトルが消失し，BCPのスペクトルへと変化した。しかしながら，仕事関数の小さいCa，Mgなどでは，BCPの膜厚が数ナノメートルから十数ナノメートルの時，金属，BCPには見られない新しいピークがフェルミレベル近傍に観測された。電気的にはCaやMg電極のときにのみオーム性接触が得られデバイス特性が向上するため，観測された界面に特有のピークがオーム性を形成するものと結論された。この界面状態が観察される場合は金属のフェルミレベルとHOMOあるいはLUMOとのエネルギー差が常に一定であることから，金属とBCPとの相互作用で界面状態が形成されることを明らかにした。

実験より得られたこれらの結果は，BCPと金属原子1原子との相互作用を第一原理計算によって求めた結果と一致しており，提案したモデルの妥当性を確認した。

審 査 の 結 果 の 要 旨

有機分子と電極金属とのオーム性接触は，相互作用による界面準位の形成が重要な働きをすること，このような界面準位の形成には仕事関数が小さい金属を用いたほうが良い事などデバイス作成上重要な知見である。応用上の重要さだけではなく，分子と金属原子との相互作用を分類しその性質の特徴を明らかにしたことは学術的にも意義がある。

よって，著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。