ペロブスカイト太陽電池の多脚型正孔回収分子の開発

飛翔する若手研究者

チョン ミンアン　京都大学化学研究所　助教

ペロブスカイト太陽電池の高効率化と高耐久化を目指し，基板上での水平配向を制御した多脚型正孔回収単分子膜材料の開発に取り組んだ。平面性の高いトリアザトリキセン骨格に3つのアルキルホスホン酸アンカー基を導入した三脚型正孔回収分子PATATは，複数のアンカー基を介して基板表面に強固に化学吸着し，水平に配向することで，23% の変換効率と優れた長期耐久性を実現した。本稿では多脚型アプローチによる分子配向制御とその効果について紹介する。

はじめに

ABX_3 型のペロブスカイト半導体を光吸収材料に用いたペロブスカイト太陽電池が，塗布法で作製できる次世代の高性能太陽電池として注目されている。2009年以降[1,2]，ペロブスカイト太陽電池の光電変換効率が急速に向上し，商用シリコン系太陽電池に匹敵する値が得られている。しかしながら，ペロブスカイト太陽電池の実用化に向けては，さらに高い光電変換効率の実現およびデバイスの耐久性の向上が求められている。

ペロブスカイト太陽電池は，光吸収発電層であるペロブスカイト層をp型およびn型の半導体の電荷回収層で挟み込んだ構造をもつ。ペロブスカイト層で生成する電荷（正孔と電子）を各電荷回収層を介して選択的に各電極に捕集することにより発電する。これまでは，主に，ペロブスカイト層の作製法の改良により，光電変換効率が向上してきた。その一方で，ペロブスカイト層で生成した電荷を選択的に取り出す電荷回収材料の開発が，さらなる特性向上のための課題となっている。

正孔回収材料として，従来は高分子材料であるポリトリアリールアミン（PTAA）などの厚膜（10〜40 nm）が一般的に用いられてきた。近年，p型のπ共役骨格にアルキルホスホン酸基などをアンカー基（吸着基）として導入し，透明導電性金属酸化物基板に吸着させることで形成した単分子膜が正孔回収層として効率的に機能すると報告されている[3,4]。単分子膜は分子レベルの膜厚（<2 nm）しか必要としないため，従来の厚膜材料の欠点に由来していた光透過性および電気伝導性の問題を解決することが可能である。

単分子層として用いる材料の開発が注目されつつあるが，これまでの報告例では，π共役骨格にアンカー基を1つ導入した一脚型分子に限られているため，さらなる高性能化に向けては，単分子層の分子配向制御の改善が解決すべき課題の1つとして残されている。以下では，筆者らの多脚型分子のアプローチについて紹介する。

水平配向を制御した多脚型単分子膜材料の開発

これまでの報告例では，π共役骨格にアンカー基を1つ導入した一脚型分子に限られているため，π平面が基板に対して垂直配向（Edge-on）をとっていると考えられている（図1）。しかし，ペロブスカイト層と単分子膜材料の軌道の重なりの観点からは，水平配向（Face-on）の方が電荷の取り出しに有利であり，より高性能なペロブスカイト太陽電池が作製できると期待されている。

上記の背景を踏まえて，筆者らは，基板とペロブスカイト層に対して水平配向の多

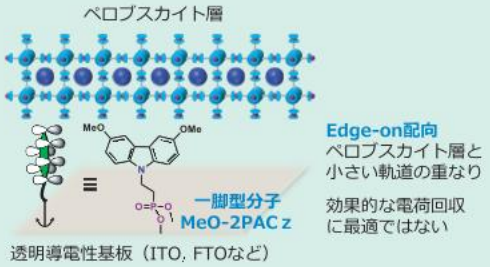


図 1　従来の一脚型単分子膜材料

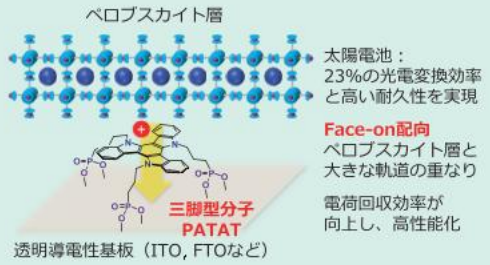


図 2　三脚型単分子膜材料

脚型正孔回収単分子膜材料を開発し，分子配向の太陽電池特性への効果について明らかにした（図 2）[5]。

まず，π 共役骨格として，ベンゼン環に 3 つのインドール骨格が縮環した平面な構造をもつトリアザトリキセン骨格（TAT）に着目し，アンカーとしてアルキルホスホン酸基（PA）を 3 つ導入した PATAT を設計および合成した。

次に，合成した PATAT のホルミルジメチルアミン（DMF）溶液を金属酸化物（ITO）上にスピンコートすることで PATAT の薄膜を作製し，基板上での PATAT 分子の吸着様式について調べた。PATAT の粉末と金属酸化物に吸着した膜に対して，赤外線反射吸収分光測定を行ったところ，粉末状態に比べて吸着膜では P-OH 伸縮振動に対応するピーク（1157，1146 および 945 cm^{-1}）と P＝O 伸縮振動に対応するピーク（1234 cm^{-1}）の比が大きく減少し，PATAT はほぼすべてのアルキルホスホン酸アンカー基が金属酸化物表面に化学吸着していることがわかった（図 3）。

また，紫外光電子分光法（UPS）と準安定原子電子分光法（MAES）を用いることで，基板上での分子配向についても確認した。サンプル表面の数 nm 程度の電子情報が得られる UPS スペクトルと比較するとサンプルの最表面のみの電子情報が得られ

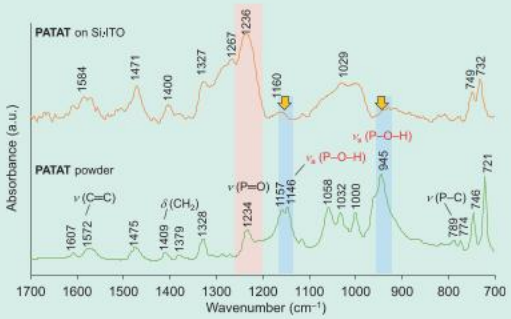


図 3　PATAT 粉末と Si/ITO 上に吸着させた PATAT フィルムの IR スペクトル

る MAES スペクトルでは PATAT のπ軌道に由来するピークが顕著に観測され，また，σ 軌道に由来するピークの寄与が小さくなることがわかった。この結果から，単分子膜では，三脚型 PATAT 分子が水平に配向していることが明らかになった。

実際に，PATAT 単分子膜を正孔回収層として用いたペロブスカイト太陽電池を作製したところ，一脚型分子を上回る最高 23% の変換効率を達成した。さらに，不活性ガス雰囲気下で 2000 時間後も初期特性をほぼ維持し，連続光照射下でも 100 時間後までほぼ 100% を保持する高い耐久性を示した。

おわりに

以上，本稿では，3 つのアンカー基を有する三脚型 PATAT の開発と，水平配向制御による高効率なペロブスカイト太陽電池について紹介した。PATAT の三脚型構造は，一脚型よりも基板に強固に固定され，デバイスの高耐久化にも寄与する。今後は，本コンセプトをさらに発展させ，ペロブスカイト太陽電池の実用化に貢献したい。

最後に，本研究を進めるにあたって多大なるご支援をいただいた若宮淳志教授をはじめとする共同研究者の方々に心より御礼申し上げる。

1）T. Miyasaka et al., *J. Am. Chem. Soc*. **2009**, *131*, 6050.
2）H. S. Kim, N. G. Park et al., *Sci. Rep*. **2012**, *2*, 591.
3）V. Getautis, S. Albrecht et al., *Science* **2020**, *370*, 1300.
4）W. Jiang, A. K.-Y. Jen et al., *Nature* **2025**, *646*, 95.
5）M. A. Truong, A. Wakamiya et al., *J. Am. Chem. Soc*. **2023**, *145*, 7528.

© 2026 The Chemical Society of Japan



チョン・ミンアン
〔経歴〕2016 年東京農工大学大学院工学府博士課程修了（指導教員：中野幸司教授），博士（工学）。同年東京工業大学物質理工学院博士研究員，18 年京都大学化学研究所日本学術振興会外国人特別研究員，20 年より現職（若宮淳志教授研究室）。25 年 7〜9 月カリフォルニア大学サンタバーバラ校訪問研究員（NGUYEN Thuc-Quyen 教授研究室）。〔専門〕材料化学，構造有機化学。〔趣味〕サッカー，陸上。
E-mail: truong.minhanh.2x@kyoto-u.ac.jp