

## 奨励賞

チョン ミンアン氏 (京都大学化学研究所・助教)



### (業績)「高性能ペロブスカイト太陽電池を志向した多脚型電荷回収単分子膜材料の設計と合成」

ペロブスカイト太陽電池の高性能化には、光吸収によって生成した電荷を効率的に回収する半導体材料の開発が重要である。近年、正孔回収材料を単分子膜として用いることで、優れた光電変換効率と高い耐久性を示すペロブスカイト太陽電池が報告されている。しかし、従来の単分子膜材料は、 $\pi$  共役骨格に ITO などの導電性基板へ吸着可能なアンカー基を 1 つ導入した一脚型分子に限られている。そのため、太陽電池のさらなる高性能化および実用化に向けては、単分子層での分子配向制御をはじめ、依然として解決すべき課題が多く残されていた。チョンミンアン氏は、 $\pi$  共役骨格にアンカー基を複数導入した「多脚型構造」の独自の分子設計により、単分子膜での分子配向や、表面の濡れ性を精密に制御可能な優れた正孔回収単分子膜材料の開発に成功している。以下にその業績の概要を示す。

#### 1. Face-on 配向の単分子膜材料の開発

これまでの一脚型正孔回収分子では ITO 基板上への吸着基を 1 つしかもたないため、 $\pi$  共役骨格は基板とペロブスカイト表面に対して、垂直方向に edge-on 配向をもつ。ペロブスカイト層および ITO 基板との  $\pi$  軌道の重なる観点から、界面で電荷を効率的に取り出すためには、 $\pi$  共役骨格を基板に対して face-on 配向を実現することが理想的である。それに対して同氏は、 $\pi$  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 つ導入した三脚型 PATAT 分子を設計・合成した。PATAT の単分子膜は赤外反射吸収測定および準安定原子電子分光測定などにより、 $\pi$  平面が ITO 基板とペロブスカイト層に対して水平に配向することを明らかにした。PATAT はこの face-on 配向に起因して、高い正孔回収特性をもつ有機半導体の単分子膜として機能し、太陽電池として高い光電変換効率と高耐久性を実現した。

#### 2. 親水性の高い単分子膜材料の開発

これまでに報告されてきた単分子膜材料のほとんどは疎水的である。実際、PATAT ではすべてのアンカー基が ITO 基板に吸着するため、正孔の回収効率は高いものの、単分子膜の表面が疎水的となり、ペロブスカイト材料の極性溶液を塗る際に弾きが生じるため、大面積で高品質なペロブスカイト層の作製が容易でないことが

課題となっていた。それに対して同氏は、 $\pi$  共役骨格として、サドル型を有するシクロオクタテトラエン骨格に 4 つのインドール骨格が縮環したシクロオクタテトラインドール骨格(TTI)に着目し、アンカーとしてアルキルホスホン酸基(PA)を 4 つ導入した四脚型 PATTI を設計・合成した。サドル型構造に起因して、PATTI は ITO 基板に吸着した際に、2 つのホスホン酸基が基板に吸着し、残りの 2 つは上部のペロブスカイト層側に張り出す構造をとることを明らかにした。サドル型構造をもつ PATTI を用いることで、従来の一脚型分子や平面構造をもつ PATAT に比べて、単分子膜の濡れ性を大きく改善することに成功した。

#### 3. 共堆積法による製造工程数削減とそのメカニズム解明

ペロブスカイト太陽電池の製造過程では、電荷回収層とペロブスカイト層を別々に作製する積層塗布法が一般的である。しかし、ペロブスカイト太陽電池の実用化には低コスト化のために製造工程数の低減が求められている。それに対して同氏は、ホスホン酸基をより弱い吸着基として、カルボン酸基を導入した三脚型正孔回収単分子膜材料(CATAT)を新たに合成した。CATAT をペロブスカイト前駆体溶液に混ぜ込んで ITO 基板上に同時に塗布成膜する「共堆積法」でも、高性能なペロブスカイト太陽電池が作製できることを見出した。これまでに開発した PATAT と比較することで、アンカー基の効果を明らかにし、共堆積法のメカニズムを解明することにも成功した。

以上のように、チョンミンアン氏は、「多脚型構造」という独自の分子設計指針に基づいて、ペロブスカイト太陽電池の高性能化および実用化に向けて、分子配向、表面濡れ性、吸着力などを精密に制御した高性能な正孔回収単分子膜材料を次々に開発してきた。同氏が開発した材料は、世界的に高く評価され、ペロブスカイト太陽電池の分野における標準材料として国内外で広く用いられている。よって、同氏の業績は有機合成化学奨励賞に相応しいものと認め、ここに選定した。

[略歴] 平成 28 年 東京農工大学大学院工学府応用化学専攻博士後期課程修了

現在 京都大学化学研究所複合基盤化学研究系分子集合解析研究領域 助教