

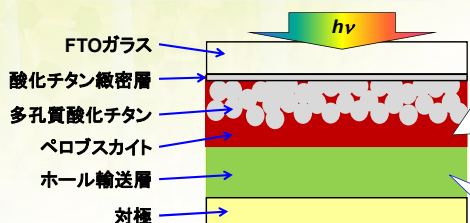
# トリフェニルベンゼン骨格を持つ 芳香族アミン誘導体を用いたペロブスカイト太陽電池

船木 敬・小野澤 伸子・村上 拓郎・近松 真之  
産業技術総合研究所 太陽光発電研究センター 有機系薄膜チーム

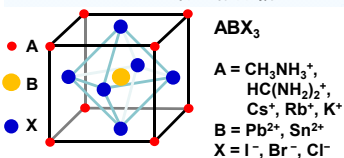
## 研究の目的

ペロブスカイト太陽電池の高効率・高耐久化を目指し、新規材料の開発を行っている

### ペロブスカイト太陽電池の模式図



### ペロブスカイト層の結晶構造

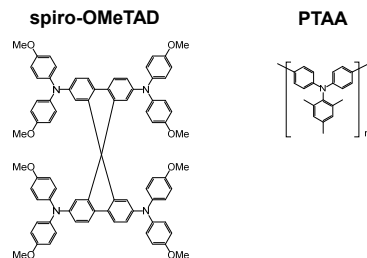


高性能化のための新規ホール輸送材料の開発が求められている

### ペロブスカイト太陽電池

- アルキルアンモニウム鉛系ペロブスカイト材料を光吸収層に用いる太陽電池
- ここ数年で光電変換効率が大幅に向上し、実用太陽電池並みの高い変換効率を達成
- 信頼性に関しては、まだ多くの課題が残っている

## ホール輸送材料の代表例

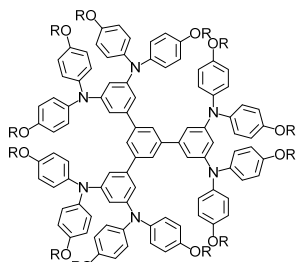


### 有機ホール輸送材料の課題

- 伝導性が低い
- コストが高い
- 伝導性を向上するために添加剤が必要 (Li塩、塩基、Co錯体など)
- 光、水、酸素、熱に対する安定性が不明

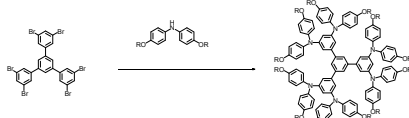
## 本研究で合成したホール輸送材料

### 芳香族アミン部分を分子内に6個持つ円盤状の化合物

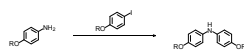


- R = CH<sub>3</sub> (OMe)
- R = C<sub>3</sub>H<sub>7</sub> (OPr)
- R = C<sub>6</sub>H<sub>13</sub> (OHex)

### 合成



### 2、及び3の場合

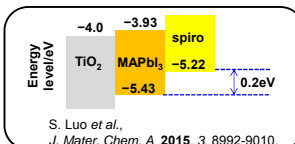


置換基にメキシ基を持つ化合物1は、原料に市販の試薬を用いて一段の反応で合成できた

### E<sub>HOMO</sub>の比較

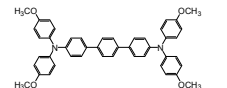
材料	E <sub>ox</sub> / V vs. Fc	E <sub>HOMO</sub> / eV
spiro-OMeTAD	0.14	-4.94
比較1	0.24	-5.04
比較2	0.47	-5.27
1	0.51	-5.31
2	0.55	-5.35
3	0.68	-5.48

$$E_{\text{HOMO}} = -4.8 - E_{\text{ox}}$$



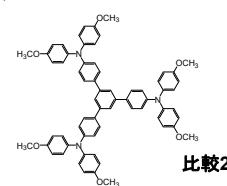
S. Luo et al., J. Mater. Chem. A 2015, 3, 8992-9010.

### 比較物質



比較1

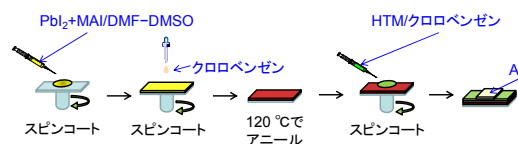
J. Wu et al., RSC Adv. 2017, 7, 45478-45483.



比較2

## 太陽電池特性の評価

### 太陽電池の作製方法



### HTM溶液中の材料のモル比

- spiro-OMeTAD : LiTFSI : TBP = 1.5 : 1 : 4
- 化合物1-3 : LiTFSI : TBP = 1 : 1 : 4
- 比較物質 : LiTFSI : TBP = 1 : 1 : 4



基板 : 1.5 cm x 1.5 cm  
Active area : 0.119 cm<sup>2</sup>

### 太陽電池特性

材料	濃度 / mM	J <sub>sc</sub> / mA cm <sup>-2</sup>	V <sub>oc</sub> / V	FF	PCE / %
spiro-OMeTAD	70	19.6 ± 0.9	1.05 ± 0.01	0.77 ± 0.02	15.7 ± 0.5
spiro-OMeTAD	23	18.7 ± 1.3	1.01 ± 0.01	0.80 ± 0.05	15.1 ± 0.2
比較1	25	10.5 ± 0.8	0.92 ± 0.01	0.77 ± 0.03	7.4 ± 0.5
比較2	25	16.0 ± 1.2	1.02 ± 0.01	0.86 ± 0.05	14.0 ± 0.8
1	25	19.8 ± 1.1	1.02 ± 0.02	0.76 ± 0.06	15.3 ± 0.6
2	25	19.8 ± 0.4	1.01 ± 0.01	0.67 ± 0.01	13.4 ± 0.2
3	25	6.9 ± 0.5	0.92 ± 0.04	0.42 ± 0.03	2.7 ± 0.3

- 置換基にメキシ基を持つ化合物1はspiro-OMeTADとほぼ同等の光電変換効率が得られた
- 分子内の芳香族アミンの数や置換基の種類が光電変換効率に大きな影響を与えることがわかった

## 結論

- トリフェニルベンゼン骨格を持つ芳香族アミン誘導体を3種合成し、ホール輸送材料としての機能を評価した
- 置換基にメキシ基を持つ化合物1は、原料に市販の試薬を用いて一段の反応で合成でき、spiro-OMeTADとほぼ同等の変換効率が得られた
- 中心骨格だけでなく分子内の芳香族アミンの数や置換基の種類が光電変換効率に大きな影響を与えることがわかった
- 今後、材料の構造最適化と電池作製条件の最適化を検討する予定である
- 本研究は、新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託により実施されたものである