

イソトリアザトルキセン誘導体を用いた正孔回収単分子膜材料の開発

(京大化研¹) ○ノリエガ パブロ¹・足立 裕太¹・中村 智也¹・マーデュー リチャード¹・チョン ミンアン¹・若宮 淳志¹

Development of Isotriazatruxene Derivatives as Hole-Collecting Monolayer Materials for Perovskite Solar Cells (¹*Institute for Chemical Research, Kyoto University*) ○Pablo Noriega,¹ Yuta Adachi,¹ Tomoya Nakamura,¹ Richard Murdey,¹ Minh Anh Truong,¹ Atsushi Wakamiya¹

The development of efficient charge-collecting materials is important to further improve the performance of perovskite solar cells (PSCs). Recently, we have developed a series of triazatruxene derivatives as hole-collecting monolayer materials in PSC devices.^{1,2} The corresponding devices exhibit superior efficiency and stability.

In this study, a series of halogen-substituted isotriazatruxene derivatives bearing three phosphonic anchoring groups (**iso-PATAT-X**, Figure 1) was designed as hole-collecting monolayer materials. By using commercially available indole derivatives as starting materials, target molecules were successfully synthesized via three steps, including Cu-catalyzed cyclization, nucleophilic substitution, and deprotection reactions. In this presentation, molecular design and characterization as well as device fabrication and evaluation will be discussed in detail.

Keywords : Perovskite Solar Cells; Monolayer; Hole-Collecting Materials; Isotriazatruxene; Chemisorption

ペロブスカイト太陽電池の高性能化には、光吸収により生成する電荷を効率的に回収する半導体材料の開発は重要となっている。最近、当研究室では、トリアザトルキセン誘導体の単分子膜を正孔回収層に用いることで、高い光電変換効率と優れた安定性を示すペロブスカイト太陽電池が得られている^{1,2}。

本研究では、新たな正孔回収単分子膜材料の基本骨格として、二つのインドール部位が向き合うイソトリアザトルキセン骨格に着目した。具体的には、ハロゲンを置換したイソトリアザトルキセン骨格に金属酸化物表面への吸着力を有するホスホン酸基を三つ導入した一連の化合物 (**iso-PATAT-X**, 図1) の設計をした。入手容易なハロゲンを置換したインドール誘導体から、銅触媒による環化反応、求核置換反応および脱保護反応を用いて標的分子群を合成した。本発表では、これらの分子設計と基礎特性、また、これらの単分子膜を正孔回収層に用いたペロブスカイト太陽電池の作製と特性評価について詳細に報告する。

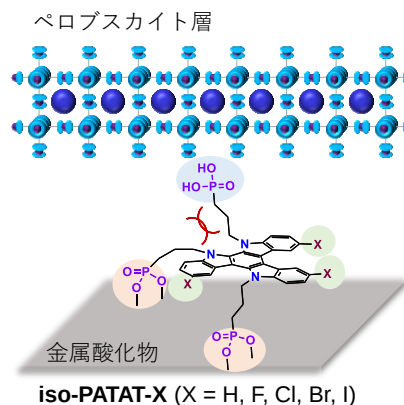


図1. **iso-PATAT** 誘導体の構造

1) M. A. Truong, A. Wakamiya et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 7528.

2) M. A. Truong, A. Wakamiya et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, ASAP (DOI: 10.1021/jacs.4c15857).