

原子・分子の自在配列と特性・機能  
2021 年度採択研究代表者

2022 年度  
年次報告書

石割 文崇

大阪大学 大学院工学研究科  
講師

機能団の自在配列を可能にする多面性ポリマーの創製

## 研究成果の概要

本研究では複数の機能団の分子・原子レベルでの自在配列を可能にする「多面性分子・高分子」を開発し、その物性、機能開拓に取り組んでいる。2022年度は、表裏の二面性を有する分子の、異種固体の接合界面での機能開拓に関する研究をおこなった。具体的には、固体薄膜積層型のデバイスであるペロブスカイト太陽電池の、ペロブスカイト層の表面パッシベーション層としての機能開拓に注力した。溶液法で作成されるペロブスカイトの表面にはさまざまな原子(イオン)の欠損が存在し、その欠陥に電子が捕捉されてしまうことによる性能低下が知られている。また、ペロブスカイト層の上には、正孔輸送層が成膜されるが、これらの異種材料層間の親和性を向上させ、キャリア輸送を妨害しない異方的な分子設計、すなわち二面性を持つ分子によるペロブスカイト表面のパッシベーションに着手した。二面性分子の設計指針としては、合成の都合上、片面にオリゴエチレングリコール鎖を有するインデノフルオレンコアに、トリアリールアミン基を導入したものを設計した。光吸収分光と光電子収量分光から二面性分子のエネルギー準位を求めたところ、ペロブスカイト層、二面性分子層、正孔輸送層のエネルギー準位が階段状に並ぶことがわかった。二面性分子によるパッシベーションは、ペロブスカイト層上にスピコートにより成膜することにより行い太陽電池デバイスを作製した。その性能を評価した結果、二面性分子の無いものでは18.43%であった光電変換効率が、19.74%まで上昇した(業績1)。今後は分子設計のさらなる工夫により、その変換効率の向上を目指す予定である。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) “Surface Passivation of Lead Halide Perovskite Solar Cells by a Bifacial Donor- $\pi$ -Donor Molecule”, Nanaki Minoi, [Fumitaka Ishiwari](#), Kazuharu Murotani, Ryosuke Nishikubo, Takanori Fukushima, and Akinori Saeki, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2023, 15, 6708–6715 (DOI: 10.1021/acscami.2c18446).
- 2) “Overcoming the entropy of polymer chains by making a plane with terminal groups: A thermoplastic PDMS with a long-range 1D structural order”, Yugen Chen, [Fumitaka Ishiwari](#), Tomoya Fukui, Takashi Kajitani, Haonan Liu, Xiaobin Liang, Ken Nakajima, Masatoshi Tokita, and Takanori Fukushima, *Chemical Science* 2023, 14, 2431–2440 (DOI: 10.1039/D2SC05491D).
- 3) “3,11-Diaminodibenzo[a,j]phenazine: Synthesis, Properties, and Applications to Tröger's Base-Forming Ladder Polymerization”, Saika Izumi, Keiki Inoue, Yuya Nitta, Tomoya Enjou, Takahiro Ami, Kouki Oka, Norimitsu Tohnai, Satoshi Minakata, Takanori Fukushima, [Fumitaka Ishiwari](#), and Youhei Takeda, *Chemistry A European Journal* 2023, 29, e202202702 (6 pages) (DOI:10.1002/chem.202202702).
- 4) “Supramolecular Recognition within a Nanosized “Buckytrap” that Exhibits Substantial Photoconductivity”, Sajal Sen, [Fumitaka Ishiwari](#), Ramandeep Kaur, Masatoshi Ishida, Debmalya Ray, Koichi Kikuchi, Takehiko Mori, Steffen Bähring, Vincent M. Lynch, Akinori Saeki, Dirk M. Guldi, Jonathan L. Sessler, Atanu Jana, *Journal of the American Chemical Society* 145, 1031–1039 (DOI:10.1021/jacs.2c10555).