

界面の振動分光学

Vibrational Spectroscopic Study of Surface Chemistry

京都大学 化学研究所 分子環境解析化学研究領域 塩谷 暢貴

研究成果概要

近年、ペロブスカイト太陽電池の正孔回収層に有機単分子膜を用いることで、高い光電変換効率が実現されている。このペロブスカイト太陽電池では、ガラス上に酸化インジウムスズを製膜した透明電極基板に正孔回収層として単分子膜材料を化学結合させ、その上にペロブスカイト光吸収層が製膜された逆型のデバイス構造をとる。この場合、正孔回収層の分子配向が、ペロブスカイト太陽電池の高い光電変換効率に大きく寄与していると考えられている[1]。しかし、これまで有機正孔回収層の分子配向を議論するための解析手法が確立されておらず、推測に基づいて分子の凝集構造が描かれている。本研究では、単分子レベルでの構造解析が行える赤外反射吸収分光法に注目して、代表的な正孔回収層材料であるカルバゾール基を有するホスホン酸系材料 (Figure 1) の自己組織化単分子膜の構造解析に応用した。密度汎関数法による振動バンドの帰属に基づいて、実測スペクトルを解析することで、分子の化学結合状態や配向を明らかにした。

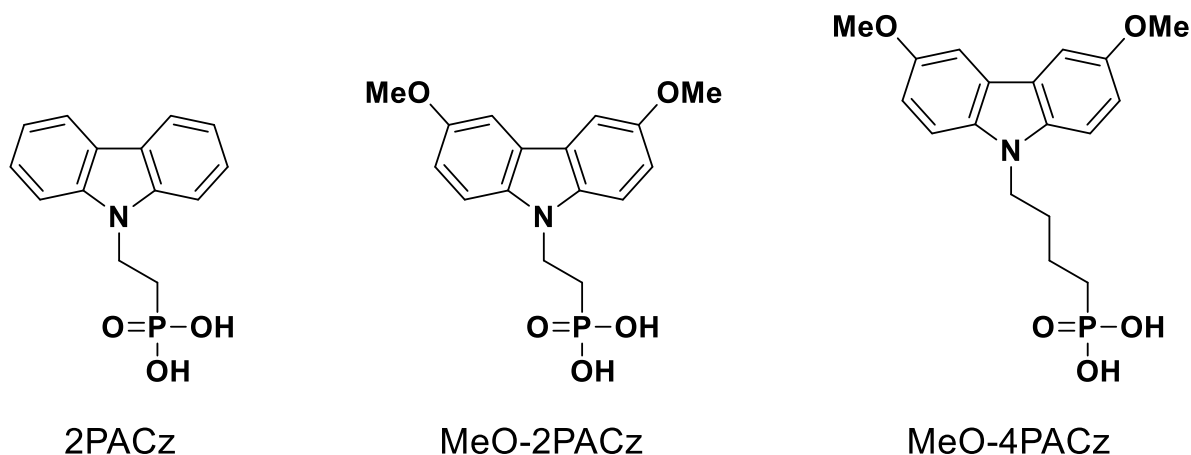


Figure 1. Chemical structures of carbazole-based self-assembled monolayer materials: 2PACz, MeO-2PACz, and MeO-4PACz.

参考文献

[1] Truong, M. A.; et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 7528.