$FA_xMA_{1-x}PbI_3$ Perovskite における結晶ひずみと電子物性

Relationship between the Crystal Strain and Electronic Properties in $FA_xMA_{1-x}PbI_3$

九州大工生命体工 [1]，電通大情報理工 [2]，立命館大 [3]，宮崎大 [4]，
○(D1)廣谷 太佑 [1]，(P)Muhammad Akmal Kamarudin[1]，西村 滉平、
飯久保 智 [1]，沈 青 [2]，豊田 太郎 [2]，峯元 高志 [3]，吉野 賢二 [4]，早瀬 修二 [1]
Kyushu Inst Tech. LSSE. [1], UEC. [2], Ritsumeikan Univ. [3], Univ. Miyazaki. [4],
°Daisuke Hirotani [1], Muhammad Akmal Kamarudin [1], Kohei Nishimura[1],
Satoshi Iikubo [1], Qing Shen [2], Taro Toyoda [2], Takashi Minemoto [3], Kenji Yoshino [4], Shuzi Hayase [1]
E-mail: hirotani.daisuke285@mailkyutech.jp

1．はじめに

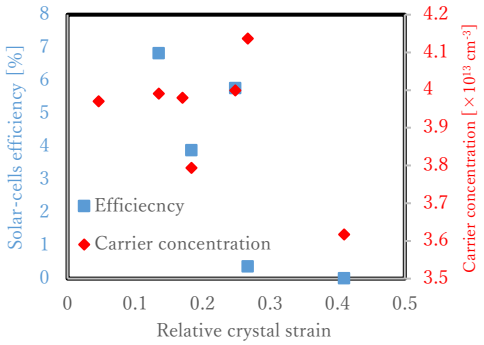
高効率な Perovskite(PVK)太陽電池の実用化に向け、更なる高性能化が求められている。そこで、その研究の基盤や指針となる基礎物性を理解する事が重要である。PVK の結晶性に関する知見は変換効率や耐久性に大きな影響を与えていると考えられるが、実際に PVK の結晶性と太陽電池の性能やそれに関わる電子物性についての相関は明らかとされていない(1),(2)。本研究では、PVK の結晶性を FA 及び MA イオンの比で制御し、結晶性を結晶ひずみとして理解し、太陽電池性能と電子物性との関係を理解した。

2．実験装置及び方法

XRD 測定に用いたサンプルは、Glass/ITO/PVK の構造で作製した。$FA_xMA_{1-x}PbI_3$ (x=0.1, 0.2, 0.3, 0.5, 0.8, 1.0)となるよう調整して PVK 膜を形成した。結晶ひずみを、Williamson-hall 法で確認した。同系統の PVK で太陽電池を Glass/ITO/PEDOT:PSS/PVK/C_{60}/BCP/Ag 作製して性能評価した。また、それぞれのエネルギーバンドダイアグラムを実験的な測定から作成した。また、状態密度分布関数からキャリア密度の算出を行った。

3．実験結果及び考察

Fig. 1 に FA の比(x)を変化させて XRD 測定した結果から算出した結晶ひずみと太陽電池性能及び、キャリア密度の関係を示す。太陽電池の変換効率はひずみが大きくなると著しく低下する結果となっている。一方、キャリア密度は相対ひずみ $\varepsilon > 0.3$ においてほとんど変化していない。しかし、$\varepsilon < 0.4$ の領域では著しい減少が見られた。



Fig,1. Relationship between the relative strain and solar cells efficiency and carrier concentration.

本結果から、結晶ひずみがキャリア密度に依存する閾値が存在している事が示唆された。一方で、太陽電池性能については、ひずみとの関係が明らかであり、ひずみが大きいほど変換効率が低下する結果となった。

(1) Zhao et al., Sci. Adv. 2017;3: eaao5616
(2) Tsai et al., Science 360, 67–70 (2018)