

光吸収・伝導特性に基づく Bi/Sb 系材料の統計的評価

Optoelectronic and Energy Level Exploration of Bi- and Sb-based Materials

阪大院工¹, EPFL², UCM³, IMDEA-Nanociencia⁴, SCITEC-CNR⁵, CEAMR⁶

○(D3) 西久保 綾佑¹, 神田 広之², Inés García-Benito^{2,3}, Agustín Molina-Ontoria⁴,

Gianluca Pozzi⁵, Abdullah M. Asiri⁶, Mohammad K. Nazeeruddin², 佐伯 昭紀¹

Osaka Univ.¹, EPFL², UCM³, IMDEA-Nanociencia⁴, SCITEC-CNR⁵, CEAMR⁶

°Ryosuke Nishikubo¹, Hiroyuki Kanda², Inés García-Benito^{2,3}, Agustín Molina-Ontoria⁴,

Gianluca Pozzi⁵, Abdullah M. Asiri⁶, Mohammad K. Nazeeruddin², Akinori Saeki¹

E-mail: saeki@chem.eng.osaka-u.ac.jp

鉛ペロブスカイトの代替材料として、低毒かつ耐久性の高いビスマス(Bi)やアンチモン(Sb)系材料は有望な候補である。しかし V 族に属する Bi と Sb は 3 価のイオン価数を持ち、単純にペロブスカイトの IV 族カチオンを置換することはできない。そのため、数十通りにわたる様々な組成や結晶構造が考えられ(図 1a)、その中から優れた性能を持つものを見出すのは容易ではない。本研究では、光伝導度や電荷輸送特性を簡便に評価できる時間分解マイクロ波伝導度法(TRMC)^[1,2]をベースに、包括的かつ実験的に各材料の物性と太陽電池性能を探索した^[3]。

本研究では、0 次元から 3 次元構造まで取りえる 6 種類の結晶構造の中で、計 40 種類以上の試料を作製した。評価手法としては、①X 線回折測定による各試料の同定、②光電子収量分光(PYS)と光吸収による準位評価、③単膜および電子輸送層(ETL)を積層した試料の TRMC 光過渡伝導度測定を行った。結果として、Sb 系光吸収材料とチオフェン系 HTL の組み合わせにより電荷輸送効率が大きく増加することが分かり、さらに $\Delta\sigma_{\max}$ (ETL/活性層 2 層膜の光伝導度)が最大変換効率(Best PCE)と線形的な相関を示す傾向が見られた(図 1b)。HTL の種類を変えた素子評価から、高

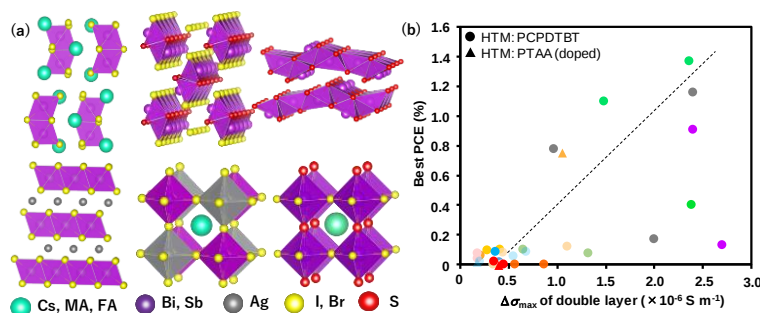


図 1. (a) 様々な結晶構造・組成の Bi/Sb 系材料の時間分解マイクロ波伝導度測定。 (b) PCE vs $\Delta\sigma_{\max}$ プロット。

いホール移動効率を得るための最適な材料および素子構造を見出した。また、素子の光子吸収量と電流密度に基づく解析を行い、光吸収と伝導度が素子性能に与える影響を分離して考察を行った。当日はこれらの知見に関して、より詳細な議論を行う^[3]。

[1] R. Nishikubo, A. Saeki, *J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, 9, 5392–5399.

[2] R. Nishikubo, A. Saeki, *J. Photopolym. Sci. Technol.*, **2019**, 32, 735–740.

[3] R. Nishikubo, H. Kanda, M. K. Nazeeruddin, A. Saeki et al., *Manuscript under revision*.