光誘起 ESR 分光法を用いた順構造ペロブスカイト太陽電池における電荷状態の解明

Elucidation of charge states in regular perovskite solar cells with light-induced ESR spectroscopy

筑波大数物 [1]，京大化研 [2]，筑波大エネ物質科学セ [3]
○戴 文超 [1]，鄒 湘涛 [1]，木全 晴 [1]，本橋 真優 [1]，薛 冬 [1]，
中村 智也 [2]，若宮 淳志 [2]，丸本 一弘 [1,3]
Univ. of Tsukuba[1], Kyoto University[2]; TREMS, Univ. of Tsukuba[3]
°Wenchao Dai[1], Xiangtao Zou[1], Haru Kimata[1], Mayu Motohashi[1], Dong Xue[1], Tomoya Nakamura[2], Atsushi Wakamiya[2] and Kazuhiro Marumoto[1,3]
E-mail: s1920427@s.tsukuba.ac.jp, marumoto@ims.tsukuba.ac.jp

【序論】ペロブスカイト太陽電池（PSCs）は低コスト、大規模生産、フレキシブルなどの利点を持つ太陽電池として注目されている[1,2]。Spiro-OMeTAD などの正孔輸送材料（HTM）は高コストという難点を持っており、最近安価な HTM として P3HT を用いた PSCs が開発され、22%を越える高効率が報告されている[3]。しかし、P3HT を用いた PSCs の詳細な電荷状態や素子動作機構には未解明な点が多い。本研究では、$CH_3NH_3PbI_3$ (PVK)と P3HT を用いた順構造 PSC およびその積層膜試料を作製し、それらの電荷状態について ESR 分光法により研究を行ったので報告する。

【実験】Fig. 1 には P3HT の分子構造を示す。ITO/SnO_2/PVK/P3HT/Au 構造の試料を作製し、ESR 試料管に挿入して窒素雰囲気下で封止し、暗状態と光照射下、室温で ESR 測定を行った。

【結果と考察】Fig. 2a に室温で測定した SnO_2/PVK/P3HT 積層膜試料の ESR スペクトルを示す。得られた g 因子は g = 2.0021 であり、信号の起源は P3HT の正孔と同定された。Fig. 2b に P3HT 薄膜、SnO_2/PVK/P3HT および SnO_2/PVK/P3HT/Au の積層膜の ESR 信号から求めたスピン数（N_{spin}）の擬似太陽光照射下の過渡応答特性を示す。P3HT 薄膜の場合と比べて SnO_2/PVK/P3HT の N_{spin} は擬似太陽光下照射下で増加した。この結果は PVK で光生成された正孔が効率よく P3HT に移動していることを示す。これらの結果より P3HT は未ドープにもかかわらず、PSC の HTM として適用できることが微視的な観点から示された。短絡および開放状態での素子のオペランド ESR 測定結果も用いて、素子の動作機構や劣化機構について議論する。

[1] M. Namatame *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2017**, *110*, 123904.
[2] T. Gotanda *et al.*, *Appl. Phys. Express* **2019**, *12*, 041002.
[3] E. H. Jung *et al.*, *Nature* **2019**, *567*, 511.

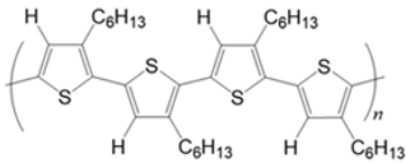

Fig. 1. Chemical structure of P3HT.

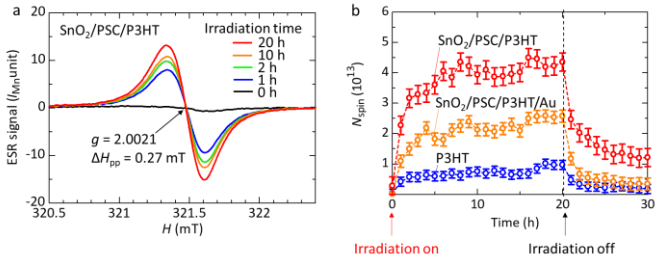

Fig. 2. (a) ESR spectra of SnO_2/PVK/P3HT layered film under simulate solar irradiation at RT. (b) Transient responses of the number of spins (N_{spin}) of layered films on irradiation at RT.