

多様な結晶構造・組成を有する Bi/Sb 系太陽電池材料の包括的探索

Comprehensive exploration of Bi/Sb-based photovoltaic materials

with various crystal structures and compositions

阪大院工¹, スイス連邦工科大学ローザンヌ校² ○(D2) 西久保 綾佑^{1,2}, 神田 広之²,

Mohammad Khaja Nazeeruddin², 佐伯 昭紀¹

Osaka Univ.¹, EPFL² ○Ryosuke Nishikubo¹, Hiroyuki Kanda²,

Mohammad Khaja Nazeeruddin², and Akinori Saeki¹

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

高効率ペロブスカイト太陽電池は有毒な鉛を含んでいる点が問題視されている。一方、非鉛材料の代表であるスズ系ペロブスカイトは、酸化に弱く耐久性が致命的に低い。そこで、低毒かつ酸化耐性の高いビスマス(Bi)やアンチモン(Sb)系材料が、新たな非鉛材料として期待されている。しかし、V 族に属する Bi と Sb のイオン価数は+3 であるため、単純にペロブスカイトの IV 族カチオンを置換することができず、様々な組成と結晶構造が考えられる。Bi と Sb だけでも数十通りの組成が考えられ、その中から太陽電池材料として優れているものを見出すのは容易ではない。そこで本研究では、光電気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]など複数の分光測定を用いて、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。

本研究では、0 次元から 3 次元構造まで考えられる 5 種類の結晶構造を、金属カチオン(Bi/Sb)やハロゲン(I/Br)を変化させながら作り分け、計 40 種類以上の試料を作製した。まず各試料の X 線回折測定を行い、結晶構造の形成が可能な組成を絞り込んだ。次いで光電気物性の評価では、光電子収量分光(PYS)と光吸収による準位評価や、単膜およびホール輸送層(HTL)・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(図 1)。その結果、複数の Sb 系材料において、電荷輸送層への効率的な電子・ホール移動が観測された。興味深いことに、これらの電荷移動は価電子帯・伝導帯の

準位マッチングよりも、特定の組成を持つ光活性層と特定の化学構造を持つ電荷輸送層に依存して比較的高効率に起こることが判明した。当日はこれらの基礎的知見に加え、素子性能との相関まで含めた議論を行う^[3]。

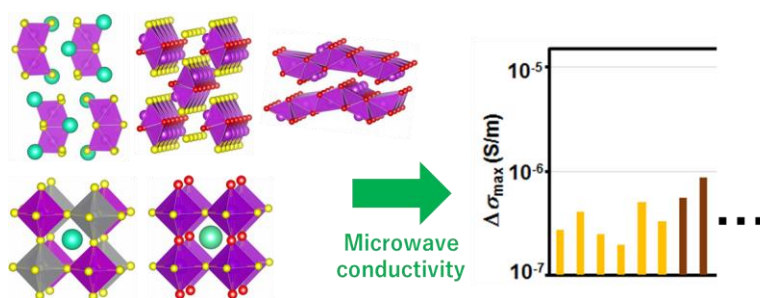


図 1. 様々な結晶構造・組成の Bi/Sb 系材料の時間分解マイクロ波伝導度測定。

[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, *Manuscript in preparation*.