

太陽電池デバイスシミュレーションによる MA(Sn, Pb)(I, Br)₃ ペロブスカイト光吸収層の最適バンド設計 Optimizing band grading of MA(Sn,Pb)(I,Br)₃ perovskite absorber by solar cell device simulation

立命館大 °河野 悠, 西村 昂人, Abdurashid Mavlonov, Jakapan Chantana, 峯元 高志

Ritsumeikan Univ., °Yu Kawano, Takahito Nishimura, Abdurashid Mavlonov,

Jakapan Chantana, Takashi Minemoto

E-mail: kawano@fc.ritsumei.ac.jp

ペロブスカイト太陽電池は光吸収層に ABX₃ 型のペロブスカイト結晶構造を持つ材料を用い、高効率な単接合太陽電池や、他接合型太陽電池のトップ層に使用されている。一方で、光吸収層のバンド構造に傾斜のある仮定でのデバイス設計例は少なく、その最適構造を示すことで、さらなる高効率化への指標が得られると期待される。

本研究は、1次元の太陽電池デバイスシミュレータの SCAPS(Solar Cell Capacitance Simulator) [1] を用いて、バンド構造に傾斜を持つペロブスカイト太陽電池の最適構造を明らかにした。光吸収層は、報告値[2,3]を元に MA(Sn,Pb)(I,Br)₃ 膜の Sn/(Pb+Sn)比、Br(I+Br)比によって価電子帯側のみが変化すると仮定した。このとき、バンド構造変化の影響のみを明らかにするため、光吸収層と HTL(正孔輸送層)との価電子帯のエネルギー差が無い、理想の HTL を仮定した。また、ETL(電子輸送層)には TiO₂ 膜、透明導電膜には SnO₂:F 膜の物性値を用いた。バンド図を Figure 1(a)に示す。

計算結果を Figure 1(b)に示す。TiO₂ 側が 1.47eV (MA(Sn_{0.07}Pb_{0.93})I₃ 相当)、理想 HTL 側が 1.33eV(MA(Sn_{0.38}Pb_{0.62})I₃ 相当)にて最高の変換効率 25.5%が示された。他に、MAPb(I,Br)₃, (FA,MA)PbI₃らの組合せにおいても、25%に近い変換効率が示された。この結果より、ペロブスカイト太陽電池を高効率化するバンド構造の実現において、材料の選択に柔軟さがある事を示した。

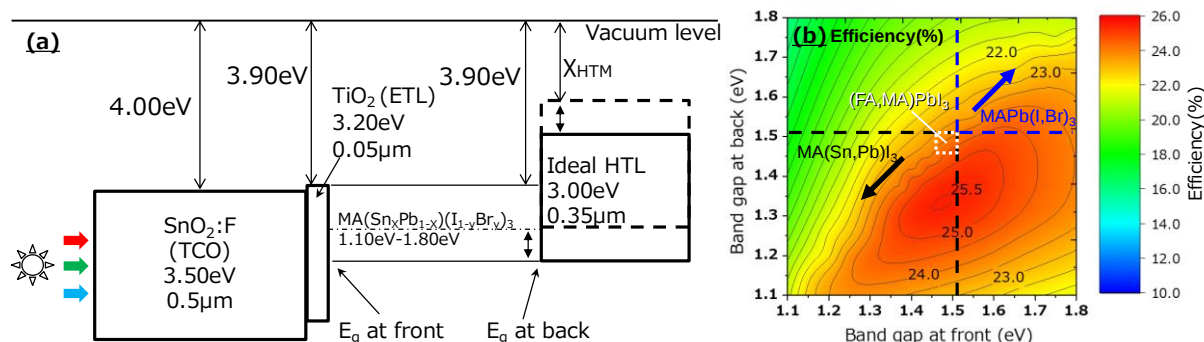


Figure 1(a) Band diagram of simulation model, (b) contour map of cell performances under the variation of the E_g at front and E_g at back.

(謝辞)本研究の一部は NEDO の支援によって実施されました。

[1] M. Burgelman et al., Thin Sol. Films 361-362(2000)527.

[2] Y. Ogomi et al., J. Phys. Chem. Lett. 5(2014) 1004. [3] X. Zhou et al., Appl. Phys. Lett. 109(2016)233906.