

ペロブスカイト型構造における配位子の効果

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 山下良之

ペロブスカイト型構造を基本構造とするペロブスカイト型太陽電池はシリコン太陽電池と比較して、安価、軽量、柔軟性を有する。作製が簡単であることから、近年世界中で研究が盛んに行われている材料である。加えて、ペロブスカイト型太陽電池の構成元素の1つであるヨウ素の産出量は日本が世界2位（1位はチリ）であることから、サプライチェーンを他国に頼らず安定して確保でき、経済安全保障においても利点を有する太陽電池として注目を集めている。

近年、配位子を用いることにより、ペロブスカイト型太陽電池の物性を制御する試みがなされている。H. Zhang らは配位子にチオールもしくはカルボン酸基を有する配位子を用いる事により、MAPbI₃ (MA:CH₃NH₃) 太陽電池の変換効率の向上を報告している¹⁾。S.M. Park らは、この変換効率の向上は MAPbI₃ 構造表面の配位子による表面最高占有準位 (HOMO) 及び表面最低空準位(LUMO)のエネルギー準位のシフトに由来すると結論づけている²⁾。

一方、L. Zhao らは配位子にアミン基もしくはホスホン酸基を有する配位子を用いると配位子は MAPbI₃ 構造内部に拡散し、欠陥を修飾し MAPbI₃ 太陽電池の安定性を向上させると報告している。しかしながら、配位子の内部拡散による MAPbI₃ 太陽電池の変換効率の減少も報告している³⁾。S.M. Park et al らは、この変換効率の減少は表面に存在する配位子が MAPbI₃ 構造表面の HOMO 及び LUMO のエネルギー準位をシフトさせたことに由来すると結論づけている²⁾。

一方、Yandri らはオレイン酸、リノール酸、もしくは両方を用いることにより、作製方法がほぼ同じであるにも関わらず CsPbBr₃ ペロブスカイトの結晶構造を直方晶、立方晶、正方晶に制御できることを見いだしている⁴⁾。

このように、配位子を用いる事によりペロブスカイト型太陽電池の物性を変化させる事ができることから、今後ペロブスカイト型構造における配位子の効果に関する研究がより盛んになると思われる。

1) H. Zhang et al., *Adv. Energy Mater.*, **9**, 1803573 (2019).

2) S.M. Park et al., *ACS Energy Lett.*, **5**, 799 (2020).

3) L. Zhao et al., *ACS Energy Lett.*, **1**, 595 (2016).

4) Valdi Rizki Yandri et al., *Heliyon*, **10**, e23276 (2023).