

非鉛ペロブスカイト型太陽電池材料の結晶構造解析 Crystal Structure Analyses of Lead-free Perovskites for Solar Cell

浦野 年由^a, Ivan Turkvý^a

^a次世代化学材料評価技術研究組合

毒性が問題になっている鉛タイプのペロブスカイト太陽電池材料に代わる Ag_3BiI_6 などを利用する新規ビスマスタイプペロブスカイト非鉛太陽電池の性能向上を目指し、SPing8 放射光 X 線回折実験によるビスマスタイプ非鉛太陽電池材料の精密な結晶構造および不純物の解析を行った。

キーワード： ペロブスカイト、ビスマス、X 線回折、太陽電池

近年、エネルギーや資源・環境意識の高まり共に、クリーンなエネルギー源となる太陽電池が注目を集めている、特に最近、鉛ペロブスカイトを用いた太陽電池は、その発電効率(PCE)が 22% を超えるまでになっており、従来のシリコン系太陽電池の性能をしのぐ勢いで進歩している。ペロブスカイト型太陽電池はさらに原料が安価で塗布による成膜が可能であることから大幅なコストダウンが可能で、フレキシブルモジュール化や、吸収光波長選択や透明化が可能、且つ低照度においても電圧変化が少ないといった従来のシリコン太陽電池にはない特徴も有している。そのためシリコン太陽電池の代替のみならず、ゼロエナジーファーム(ZEF)、曲面を有するビルディングの建材(BIPV)、自動車などへの新しい大きな市場への展開が期待されている。

しかし、鉛の毒性が大きな問題となっており、鉛を含まない材料の開発が強く求められている。申請者らは、鉛ペロブスカイトに代わる非鉛太陽電池材料の探索を行っており、その中で最近、ビスマスを含む材料(Ag_3BiI_6 など)が太陽電池として機能することを見出した[1]。これらの新規材料は、いまだ正確な結晶や不純物がわかっておらず、また現在のところ鉛ペロブスカイトと比べると PCE も低い値に留まっている。今回の SPing8 による放射光 X 線回折実験により、実験室系での X 線解析では解析困難なビスマスを含んだ新規非鉛材料の精密な結晶構造および不純物の解析と、電池特性との相関を解明し非鉛太陽電池の開発を著しく加速することを目的としている。

< Ag_3BiI_6 発電材料の合成と SPing8 による測定結果 >

1) Ag_3BiI_6 粉体試料の作成

3 モル濃度の AgI と 1 モル濃度の BiI_3 を含有するジメチルスルホキシド(DMSO)溶液を調液、スライド基板にスピコート法により塗布、110°C のホットプレートを用いて 10 分間加熱処理し膜厚 500 nm の黒色 Ag_3BiI_6 光電変換層を成膜した。次いで本黒色層をスパチラーにより剥離し Ag_3BiI_6 粉体試料を作成した。

2) SPing8 による放射光 X 線回折測定

Ag_3BiI_6 粉体試料を直径 0.1 mm のガラスキャピラリーに封入、波長 0.5 Å、ビームサイズ 300 μm × 3 mm にて粉末サンプルの X 線測定をおこなった。 Ag_3BiI_6 粉体試料の前駆体である AgI と BiI_3 粉体のガラスキャピラリー資料も同様にして SPing8 による放射光 X 線回折測定を行い、 Ag_3BiI_6 粉体試料 X 線ピークパターンと比較検討した。得られた結果を図 1 に示す。

3) 解析結果

図 1 の Ag_3BiI_6 粉体試料と駆体である AgI と BiI_3 粉体との比較から、 Ag_3BiI_6 光電変換層は、 AgI を不純物として含有しているが BiI_3 は含有していないことが明らかになった。現在 Ag_3BiI_6 の精密な結晶構造を求める為、他の組成比のビスマス含有材料(AgBiI_4 , AgBi_2I_7 , Ag_2BiI_5) の X 線パターンと Ag_3BiI_6 X 線パターンの温度依存性測定結果との比較も含め解析を進めている。

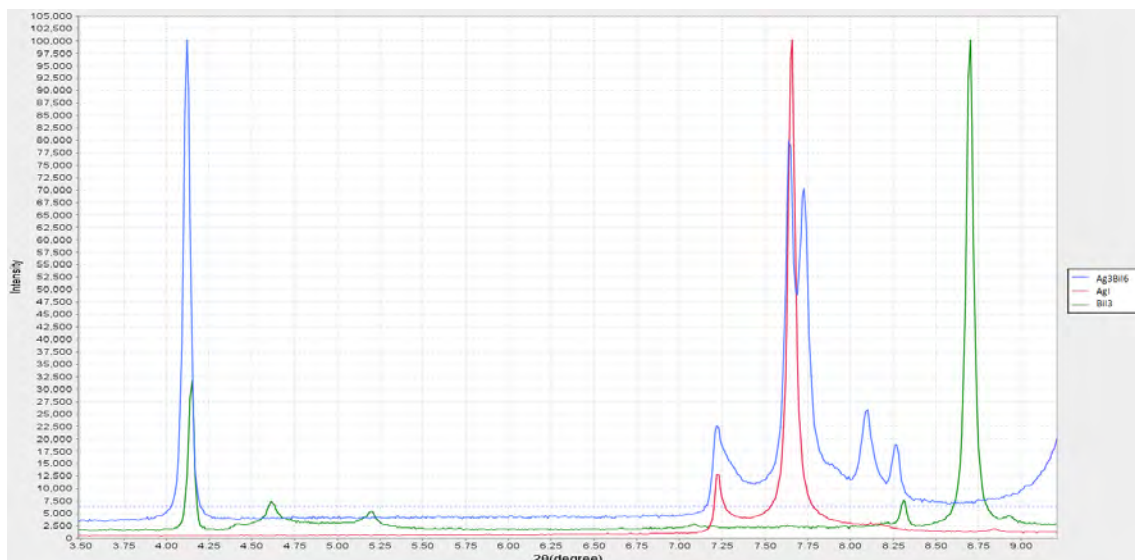


図 1 . Ag₃BiI₆、AgI と BiI₃ 粉体試料 X 線回折測定結果

謝辞

実験にご協力頂いた京都大学、若宮淳志准教授、島川祐一教授、齊藤高志助教に深く感謝いたします。また、本研究の一部はエネルギー・産業技術総合機構(NEDO)の委託事業で行っております。

参考文献：

[1] I.Turkevych, T. Urano, H.Yamagishi, K.Yamada(CEREBA), JP2016161737, 2016.