

# 硬 X 線光電子分光法を用いたペロブスカイト太陽電池に用いる パッシベーション層の効果 Effect of the Passivation Layer for Perovskite Solar Cells using Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy

柴山 直之, 中村唯我  
Naoyuki Shibayama, Yuiga Nakamura

東京大学大学院  
The University of Tokyo

ペロブスカイト太陽電池を高効率化させる方法として、ペロブスカイト多結晶層にパッシベーション層を設置する方法が提唱されている。しかし、このパッシベーション層の影響は未だ不明確である。そこで、本研究では硬 X 線光電子分光法(HAXPES)を用いて、パッシベーション層がペロブスカイト多結晶層の電子状態に与える影響を調査することを試みた。その結果、パッシベーション層をペロブスカイト多結晶層上に設置することで、ペロブスカイト多結晶層のフェルミ準位がバンドバンドすることを明らかにした。

**キーワード：** ペロブスカイト多結晶、パッシベーション層、硬 X 線光電子分光法

## 背景と研究目的：

太陽光発電は再生可能エネルギーの中で最も普及している技術であるものの、未だ発電コストが高いという課題がある。ペロブスカイト太陽電池は、発電効率が高く、かつ、100 度程度の低温加熱プロセスで作製可能であるため、太陽電池の低コスト化につながると期待されている。そのため、ペロブスカイト太陽電池は、現行のシリコン太陽電池に代わる有力な候補であると位置づけられている[1]。ペロブスカイト太陽電池は、p 型半導体層/i 型ペロブスカイト多結晶層/n 型半導体層からなる p-i-n 構造型太陽電池であり、光吸収層であるペロブスカイト多結晶層で発生した電子と正孔を p 型-n 型半導体層に効率よく電荷分離することで高い変換効率を実現している。

p 型半導体層とペロブスカイト層間にパッシベーション層を設置し、逆電子移動を抑制することで正孔分離をより効率よく生じさせる方法が提案されている。これにより、変換効率が向上することが報告されている[2,3]。しかし、変換効率向上のメカニズムは不明確であり、材料開発の方向性は不明確なままであった。

本研究では、このパッシベーション層がペロブスカイト層に与える影響を調査するために、硬 X 線光電子分光法(HAXPES)を用いて、ペロブスカイト層/パッシベーション層界面のペロブスカイト層のフェルミ準位を調査した。それにより、パッシベーション層により、ペロブスカイト太陽電池の変換効率が向上するメカニズムを明らかにすることを目指した。

## 実験：

実験に用いたサンプルを示す。

サンプル 1：FTO 層/TiO<sub>2</sub> 層/ペロブスカイト層/パッシベーション層

サンプル 2：FTO 層/TiO<sub>2</sub> 層/ペロブスカイト層

HAXPES 測定は BL46XU に設置された光電子分光装置 R-4000 を用いて行った。励起光は、7940 eV を用いており、電子アナライザーには VG シエンタ R4000 を用いた。Pass Energy は 200 eV を用いて、分析深さを変化させるために光電子の取り出し角は 80、45、30、19.5°の 4 条件を用いた。

## 結果および考察

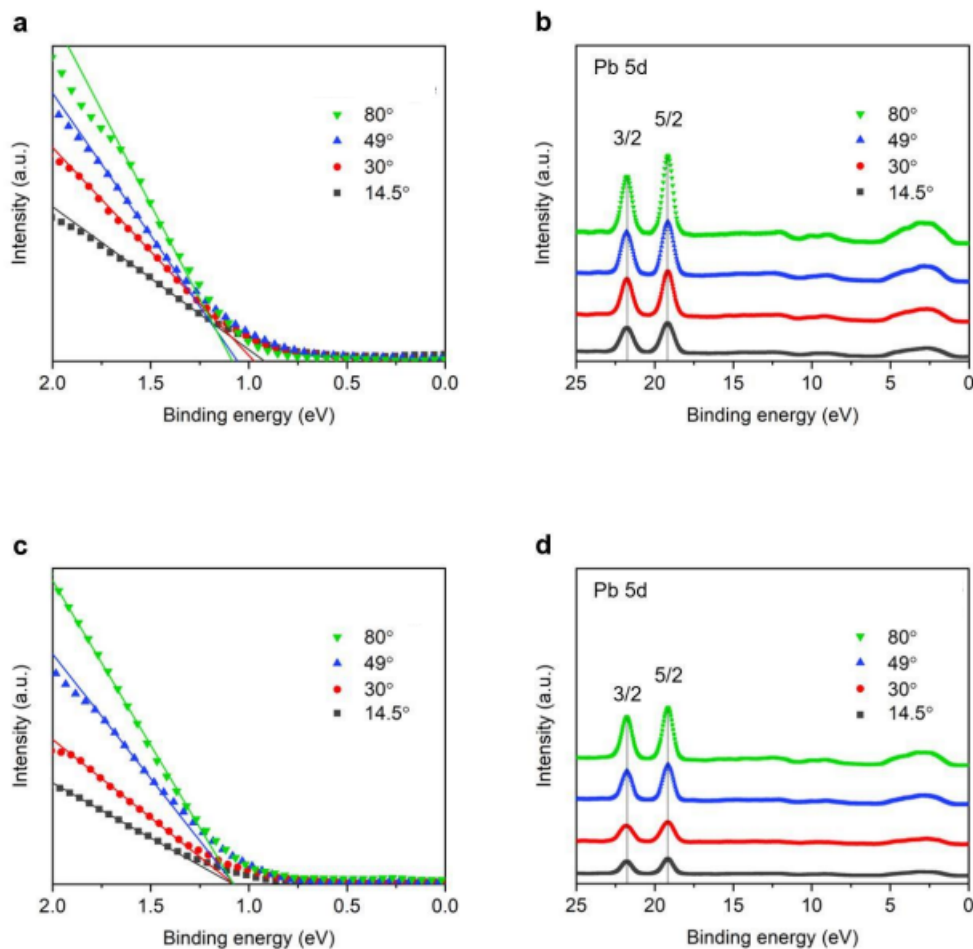


Figure 1. ペロブスカイト層の価電子帯端の測定結果

(a), (b) パッシベーション層ありのペロブスカイト層の価電子帯近傍の HAXPES 測定結果  
(c), (d) パッシベーション層なしのペロブスカイト層の価電子帯近傍の HAXPES 測定結果

Figure 1 にペロブスカイト層の価電子帯の HAXPES の測定結果を示す。この結果から、ペロブスカイト層単独では、フェルミ準位が深さ方向で変化しないことが分かった。一方で、パッシベーション層を設置した場合、フェルミ準位が変化し、バルクから表面に向かって p 型に変化することが分かった。このフェルミ準位の変化が太陽電池特性に影響を与えていると考えられる。[4]

## 参考文献

- [1] A. K. Jena, A. Kulkarni and T. Miyasaka, *Chem. Rev.*, 2019, **119**, 3036
- [2] E. H. Jung, N. J. Jeon, E. Y. Park, C. S. Moon, T. J. Shin, T.-Y. Yang, J. H. Noh and J. Seo, *Nature*, 2019, **567**, 511.
- [3] Q. Jiang, Y. Zhao, X. Zhang, X. Yang, Y. Chen, Z. Chu, Q. Ye, X. Li, Z. Yin and J. You, *Nat. Photonics*, 2019, **13**, 460.
- [4] H. Kanda, N. Shibayama, A. J. Huckaba, Y. Lee, S. Paek, N. Klipfel, C. Roldán-Carmona, V. I. E. Queloz, G. Grancini, Y. Zhang, M. Abuhelaiqa, K. T. Cho, ORCID logo a Mo Li, M. D. Mensi, S. Kingee and M. K. Nazeeruddin, *Energy Environ. Sci.*, in press.