

CH(NH₂)₂PbI₃ の構造及び反射スペクトル

日大生産工 (院) ○日野里海
 日大生産工 山根庸平 山田康治

1. 緒論

近年, 地球温暖化やエネルギー枯渇の問題から自然エネルギーを用いた発電方法が重要視されている. 中でも太陽エネルギーを利用した太陽電池の開発が盛んに行なわれており, シリコン系太陽電池や化合物系太陽電池, 有機系太陽電池など様々な種類の太陽電池がある. その中で, 最近高い変換効率を示す太陽電池として注目されているのがペロブスカイト型ハロゲン化合物を用いたペロブスカイト太陽電池である¹⁾.

ペロブスカイト型ハロゲン化合物の構造を Fig.1 に, ペロブスカイト太陽電池の構造を Fig.2 に示した. ペロブスカイト型ハロゲン化合物は ABX₃(A=カチオン, B=金属イオン, X=ハロゲン化物イオン)と表現でき, 各サイトにおいて異種元素の固溶が可能である. そのため, 固溶体の合成によってバンドギャップを制御することが可能である. なお, 太陽電池の光吸収材料として最も変換効率が良いバンドギャップは 1.4eV 付近とされている.

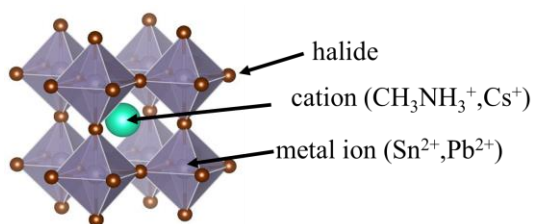


Fig.1 Structure of Perovskite.

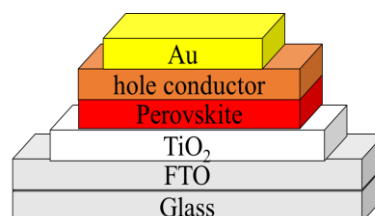


Fig.2 Structure of Perovskite solar cells.

ASnI₃ ではカチオンサイズの減少に伴い, バンドギャップが減少するが, APbI₃ ではカチオンサイズの減少に伴いバンドギャップが増加する傾向が観察されている. 本研究では CH(NH₂)₂PbI₃ (以下 FAPbI₃) とカチオンサイズがより小さい CH₃NH₃PbI₃ (以下 MAPbI₃) の構造と物性を比較し, 構造とバンドギャ

で Yellow phase へ戻った. さらに, Black phase の結晶で DTA 測定を行ったところ, 3つの相が確認された.



Fig.3 Photographs of Yellow (left) and Black (right) phase.

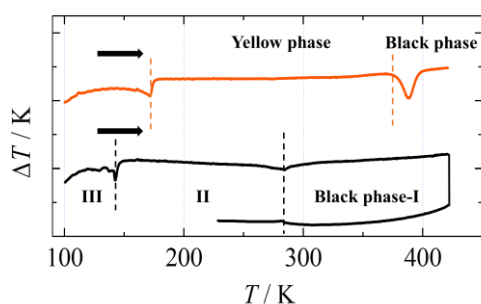


Fig.4 DTA curves for FAPbI₃.

拡散反射スペクトル測定

Yellow phase と Black phase で拡散反射スペクトル測定を行った結果, Yellow phase と Black phase のバンドギャップはそれぞれ 2.76eV と 1.46eV であった.

XRD 測定

Rietveld 解析から求めた Yellow phase と Black phase の各構造をそれぞれ Fig.5 に示した.

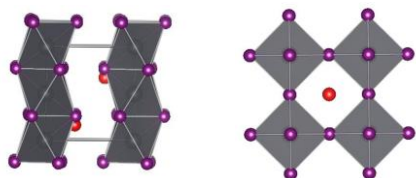


Fig.5 Structures of Yellow (left) and Black (right) phase.

Yellow phase は PbI₆ の八面体が面を共有し, 一次元鎖を形成しているが, Black phase では八面体が頂点を共有して一次元

鎖を形成しているペロブスカイト構造であった.

4. 考察

Black phase は 1 週間程度維持されていたことから, Yellow phase から Black phase 間の相転移は結合の切断を伴う再編型相転移である.

FAPbI₃ の Black phase のバンドギャップは 1.46eV であり, MAPbI₃ のバンドギャップ(1.55eV)より減少していた. この理由として以下のことが考えられる.

Fig.8 に MAPbI₃ の構造を示した. Fig.8 より MAPbI₃ ではカチオンが小さいため, PbI₆ の八面体がチルトしており, Pb-I-Pb が折れ曲がった結合を形成する. 一方, Fig.5 (right) の FAPbI₃