



太陽電池高効率化を目指すイッテルビウム (Yb) ドープした量子切断 (quantum cutting) ペロブスカイトナノ粒子の構造研究

Lee Hyunju
豊田工業大学

キーワード：量子切断，太陽光発電，ペロブスカイトナノ粒子，Yb ドーピング

1. 背景と研究目的

近年，太陽光発電はエネルギー環境問題を解決するクリーンエネルギーとして大きな注目を集めています。中でも，結晶シリコン太陽電池は，その長期信頼性，比較的高い変換効率などの利点をもつため太陽電池生産量のおよそ 90% を占めています。太陽光スペクトルと結晶シリコン太陽電池の感度曲線を見ると，太陽光スペクトルは 500 nm 付近に最大値を持ち，結晶シリコン太陽電池はその感度のピークを 1000 nm 付近に持ちます。このため，結晶シリコン太陽電池の変換効率の最大値は 29% となっています。太陽電池は，基本的に半導体の光起電力効果を利用しており，バンドギャップよりも大きなエネルギーを持つ光子が入射したときのみ，光子から 1 電子正孔対を生じます。入射光子の過剰エネルギーは熱となって失われます。この熱によるロスが太陽電池効率を低くする原因の一つとなっています。そして，解決策の一つとして量子切断蛍光体があげられます。量子切断蛍光体は，1 つの高エネルギー光子を吸収して，より低エネルギーの 2 つの光子を放出する蛍光体です。太陽電池応用として，Yb³⁺ をアクセプターに，CsPbCl₃ ペロブスカイトナノ粒子をドナーに用いた蛍光体が報告されています。Yb³⁺ イオンは，4 f 準位に 2 準位のみをもつ，2 準位間の遷移は高い発光量子効率をもち，遷移波長はおおよそ 1000 nm と結晶シリコン太陽電池の感度ピークと一致するという利点を持ちます。本研究では量子切断 Yb³⁺ ドープした量子切断ペロブスカイトナノ粒子の化学的構造の分析により，ナノ粒子構造によるドーピング特性および量子切断メカニズムを究明することを目指しています。本研究により，新たな高効率量子切断ナノ粒子の開発および太陽電池への応用を促進することが予想されます。

2. 実験内容

CsPbCl₃、Yb ドーピングされた CsPbCl₃、Yb、Cr 共ドーピングされた CsPbCl₃ ナノ粒子を合成し、透過法を利用して Pb-L3、Yb-L3、Cr-L 吸収端の X 線吸収スペクトルを測定しました。

3. 結果および考察

図 1 は、Yb³⁺ ドープされた CsPbCl₃ ナノ粒子の Yb-L3 エッジ EXAFS スペクトルと対応するフーリエ変換 (FT) です。よく知られているように、R 空間のピークは吸収原子と周囲の原子の間の原子間距離に相当します[1]。光電子の位相シフトにより、FT のピーク位置は実際の原子間距離に対して 0.5 Å 減少する可能性があります。光電子の位相シフトを考慮した結果、R 空間には約 2.07 Å (位相補正されていない距離) のピークがあり、これは CsPbCl₃ の Pb-Cl の結合長よりわずかに小さいですが、Cs-Cl の結合長よりはるかに小さいで

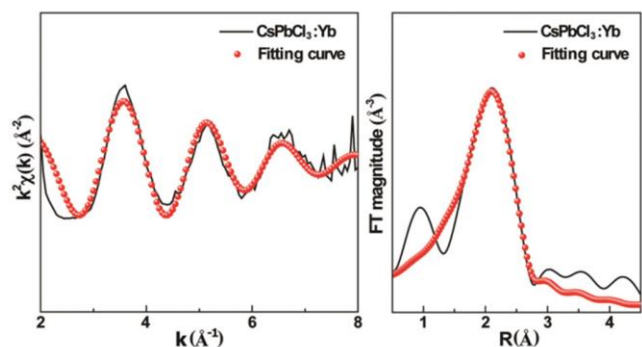


図 1 Yb³⁺ドープされた CsPbCl₃ ナノ粒子の(左) k²-weighted Yb-L3-エッジ EXAFS および(右)対応する FT。

す。これは、 Yb^{3+} イオンが Cs^+ イオンの代わりに Pb^{2+} イオンを置換する可能性が最も高いことを強く示唆しています。この可能性を調べるために、IFEFFIT ソフトウェアパッケージを使用して、 $1.35\sim 4.0\text{\AA}$ の R 範囲でシングルシェルフィットを介して得られた EXAFS スペクトルを分析しました[2]。この分析には、 CsPbCl_3 の Pb^{2+} サイトにある Yb^{3+} イオンのモデルを使用しました。このモデルは、IFEFFIT ソフトウェア パッケージの FEFF プログラム コードを使用して *ab initio* で構築されました。スペクトルは、 $\text{CN} = 4.50$ でうまく適合できます。この結果は、組み込まれた Yb^{3+} イオンが Pb^{2+} サイトにあることを示しています。

4. 参考文献

1. Z.-J. Yong, S.-Q. Guo, J.-P. Ma, J.-Y. Zhang, Z.-Y. Li, Y.-M. Chen, B.-B. Zhang, Y. Zhou, J. Shu and J.-L. Gu, J. Am. Chem. Soc., 2018, 140, 9942–9951.
2. B. Ravel and M. Newville, J. Synchrotron Radiat., 2005, 12, 537–541.