

# 逆型ペロブスカイト太陽電池の単分子膜正孔輸送層の界面電子準位接続

## Interface Energy Level Alignment of Self-Assembled Monolayer Hole Collection Layer in Inverted Structure Perovskite Solar Cells

千葉大院工<sup>1</sup>, 千葉大 MCRC<sup>2</sup> °吉田 弘幸<sup>1,2</sup>, 赤塚有杜<sup>1</sup>

Chiba Univ.<sup>1,2</sup>, °Hiroyuki Yoshida<sup>1,2</sup>, Aruto Akatsuka<sup>1</sup>

E-mail: hyoshida@chiba-u.jp

ペロブスカイト太陽電池において、ペロブスカイト層と正孔収集層と電極の界面電子準位接続は、正孔収集効率を決定する重要なファクターである。この界面電子準位は表面終端や表面構造と密接に関わっている。しかし、溶液法で作製したペロブスカイト層や透明電極上に形成した薄膜は表面粗さが大きいため、通常の構造分析法である走査プローブ顕微鏡や光学測定では解析が困難である。我々は、紫外光電子分光法 (UPS)、準安定励起原子電子分光法 (MAES)、低エネルギー逆光電子分光法 (LEIPS) を組み合わせることで、表面構造と界面電子準位接続を調べる方法を提案してきた[1]。本講演では、近年、逆型ペロブスカイト太陽電池の正孔収集層として注目されているカルバゾール誘導体の自己組織化単分子膜の界面電子準位接続を中心に議論する。

この電極/単分子膜/ペロブスカイト層の電子準位接続については、研究者によって異なるモデルが使われている。しばしば用いられるのが真空準位を基準として正孔伝導準位を比較する方法、単分子膜を電極の仕事関数を調整する層として電極/単分子膜をひとつの電極として扱い、ペロブスカイト層とのショットキー接続を考える方法である。我々は、単分子膜を有機半導体として扱い、単分子膜/ペロブスカイトに無機半導体のヘテロ接合の理論が適用できること提案している[2]。

このモデルでは、単分子膜とペロブスカイトの仕事関数の差がバンドの曲がり、単分子膜とペロブスカイトのイオン化エネルギーが界面のエネルギー障壁を決定する。それでは、単分子膜の仕事関数は、何によって決まるのだろうか？単分子膜を構成する分子は、大きな永久双極子をもつものが多い。そこで、量子化学計算で求めた永久双極子モーメントと電子分光法から見積もった分子配向を用いて、界面電気二重層の大きさをヘルムホルツの式に基づいて計算したところ、仕事関数の大きさと良い相関があることが分かった。さらに、電極の仕事関数を変えると、単分子膜の仕事関数もこれに応じて変わることもわかってきた。

この結果は、単分子膜が電気二重層を形成して仕事関数を変化させる役割を果たすことを意味する。一方、イオン化エネルギーは物質に固有の値である。これらの知見をもとにすると、界面電子準位を決定する仕事関数とイオン化エネルギーは、単分子膜の分子に固有の永久双極子とイオン化エネルギーに加えて、基板の仕事関数と分子配向というパラメータで決定されることになる。現在、多くの単分子膜正孔輸送層が開発されているが、界面電子準位接続の観点からは、永久双極子とイオン化エネルギー、分子配向に注目すれば、適切な分子の選択や開発が可能である。

[1] A. Mirzehmet, H. Yoshida et al., *Adv. Mater.* **33**, 2004981 (2021).

[2] A. Akatsuka, H. Yoshida, et al. (in preparation); 赤塚ら、第 55 回応用物理学会 22p-C601-16 (2023).