高効率化ペロブスカイト型太陽電池の三次元イメージング及び分布評価

金属ハロゲン化物ペロブスカイトを用いた太陽電池の効率向上のため、ETL、HTLとペロブスカイト層のそれぞれの界面の修飾により、Sn含有の太陽電池にて23.6%を超える発電効率が得られている[1]。本資料では、GCIB-TOF-SIMSを用いて、修飾層の形成状態および各層の三次元分布を可視化、評価した結果を示す。

[1] Shuaifeng Hu, **Kazuhiro Matsuda**, Atsushi Wakamiya, *et al.* *Energy Environ. Sci.* 2022, *15*, 2096-2107. DOI: 10.1039/D2EE00288D

1. ペロブスカイト太陽電池の構造

サンプル：$EDAI_2$表面修飾, GlyHCl添加ペロブスカイト太陽電池
着眼点：添加剤の分布およびPEDOT: PSS有無での分布変化

sample A (高効率サンプル)　　sample B (PEDOT: PSSなし)

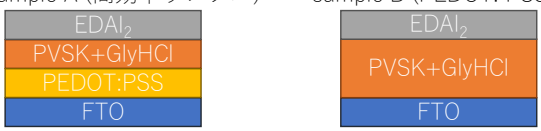

図1　太陽電池試料の積層構造

$EDAI_2$: ヨウ化エチレンジアンモニウム, GlyHCl: グリシン塩酸塩,
PVSK: $Cs_{0.1}FA_{0.6}MA_{0.3}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$ with NH_4SCN, FTO: フッ素ドープ酸化スズ

試料提供：京都大学 若宮 淳志教授

2. GCIB-TOF-SIMSによる3D成分分布評価

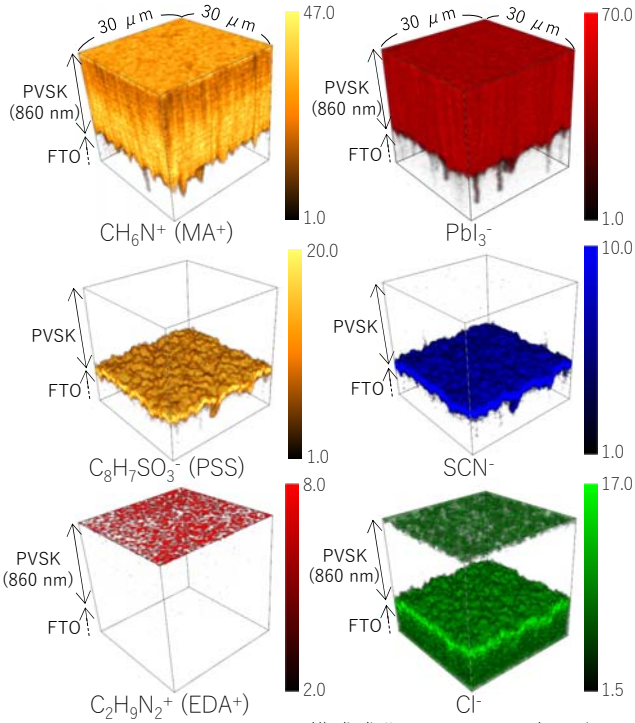

図2　sample Aにおける構成成分の3Dイメージング

PVSK表面でのEDAの存在の他、添加したGly (図3), SCNのPVSK下層界面での偏在（修飾層の形成）を明らかにした

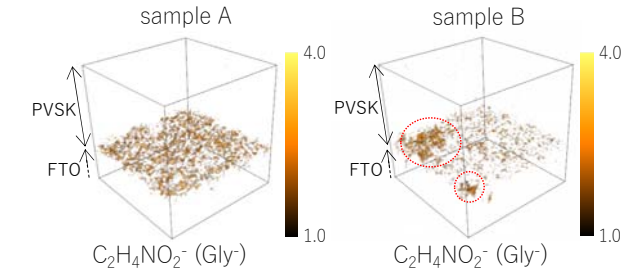

図3　Gly分布の比較

sample AでのGly分布はPVSK下層界面の面内で均一な一方、PEDOT: PSSなしのsample Bでは偏在が確認された

3. 負イオン3Dデータから得たセグメンテーション結果、膜厚評価及びSnO_2に対するGly, SCNの接触率

各相の3D分布の可視化・数値評価のため、GCIB-TOF-SIMSデータにフィルター、セグメンテーション処理を実施した。データ処理結果は、XYZの各面内のスライス像や、スライス動画としてアウトプット可能である。

* GCIB-TOF-SIMSの空間分解能下にてPEDOT: PSSとSCNは分布が類似していたため、これらは同セグメントとして評価した

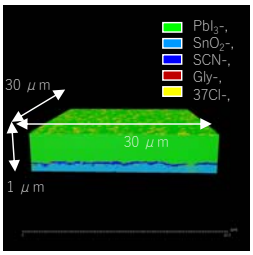

図4　sample Aのセグメンテーション結果

表1　各相の体積(μm³) の比較

Material	sample A	sample B
Cl^- (HCl etc.)	2.616	6.540
PbI_3^- (PVSK)	610.264	604.373
Gly^- (Gly)	1.163	3.973
SCN^- (SCN)	40.624	25.666
SnO_2^- (FTO)	167.180	176.990

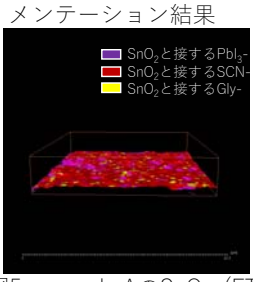

図5　sample AのSnO_2^- (FTO)に対する接触成分結果

表2　SnO_2^-表面に対する接触相の比較

Material	sample A Surface area (μm²)	sample A Fraction	sample B Surface area (μm²)	sample B Fraction
Non	2.13	0.21%	1.41	0.14%
PbI_3^- (PVSK)	255.84	25.81%	713.14	71.97%
Gly^- (Gly)	0.18	0.02%	4.52	0.46%
SCN^- (SCN)	733.12	73.96%	271.77	27.43%
SnO_2^- (FTO)	991.28		990.84	

TOF-SIMS結果の3D分布から体積（上段）、接触率（下段）を評価できた

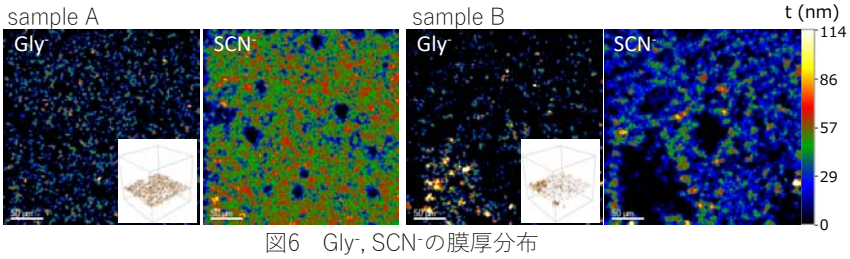

図6　Gly^-, SCN^-の膜厚分布

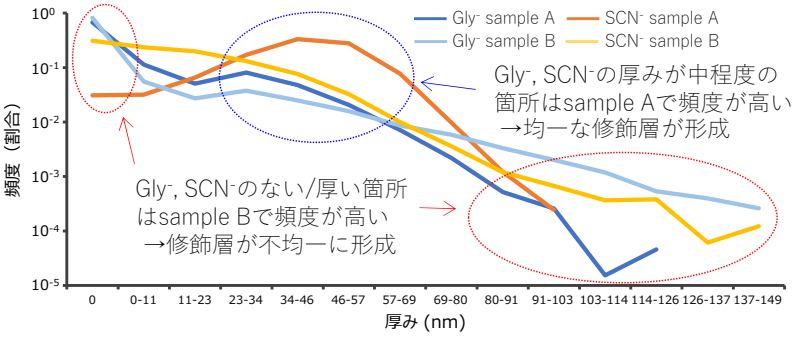

図7　Gly^-, SCN^- 厚みのヒストグラム

sample BでのSCN⁻、Gly⁻の偏在が数値的に確認された。
画像処理により、接触率や各相の膜厚の数値的な評価が可能となる。

Toray Research Center, Inc.　INNOVATION IN EXCELLENCE UP