



## 次世代太陽電池向け高移動度透明電極の 新たな設計指針の発見

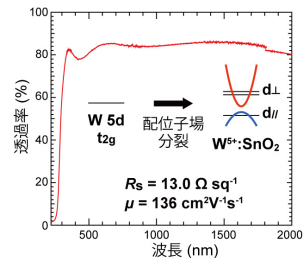
近年、赤外光でも発電可能な高効率太陽電池の開発が盛んに進められている。太陽電池の電力を外部に取り出すには透明電極が用いられるが、Snドープ $\text{In}_2\text{O}_3$ などの実用材料は伝導電子の移動度が低いため、低抵抗化に必要な高濃度のキャリア電子によって赤外光が反射される。そのため、低電子濃度で高い電気伝導性が示す高移動度の材料が求められている。

最近、sブロックの酸化半導体( $\text{In}_2\text{O}_3$ や $\text{SnO}_2$ )にドナーとして遷移金属を添加すると、d軌道が母半導体の伝導帯と混成しない(電子状態を乱さない)ため、高移動度の赤外透明電極となることが報告されている。これらの材料では、移動度低下の要因であるイオン化

不純物散乱を最小とするために、ドナーである遷移金属の価数を母結晶の金属イオンよりも+1の状態に安定化することが重要だが、その設計指針は完全には確立されていない。

最近、東京大学、ノルウェー科学技術大学、名古屋工業大学、筑波大学、ロンドン大学の研究グループは、 $\text{SnO}_2$ にタングステン(W)をドープし、 $13 \Omega \text{sq}^{-1}$ のシート抵抗と約80%の赤外光透過率をもつ透明電極を実現した(図)。また、6族元素であるWが $\text{W}^{5+}$ としてSnを置換することでイオン化不純物散乱を抑制し、高移動度を発現することを明らかにした。第一原理計算によると、Wの5d軌道は伝導帯下端よりも高いエネルギーをもつ準位とバンドギャップ内の深い準位に分裂しており、後者が電子を1つトラップすることで $\text{W}^{5+}$ が安定していた。また、この5d軌道の分裂は、W周囲の $\text{O}^{2-}$ の負電荷による結晶場分裂では説明できず、 $\text{O}^{2-}$ のp軌道との混成による配位子場分裂を考慮する必要があることも示された。従来の透明電極の研究では、遷移金属ドーパントに対して結晶場分裂しか考慮していなかったが、今回明らかになった配位子場分裂の効

果も考慮することで、ドーパントの価数の正確な予測や設計が可能になると期待される。本成果はAdvanced Functional Materials誌に掲載された(DOI: 10.1002/adfm.202110832)。



東京大学大学院理学系研究科  
准教授 廣瀬晴

連絡先: 〒 113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1

E-mail: hirose@chem.s.u-tokyo.ac.jp

URL: <http://www.chem.s.u-tokyo.ac.jp/users/sschem/>

[2022年2月1日]