

未来社会創造事業 探索加速型
「地球規模課題である低炭素社会の実現」領域
終了報告書(探索研究)

令和3年度
研究開発終了報告書

平成 29 年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名]

早瀬 修二

[所属・役職名]

国立大学法人・電気通信大学・インフォワードエネルギーシステム研究センター

[研究開発課題名 : Sn からなる Pb フリーペロブスカイト太陽電池の開発]

実施期間 : 平成 29 年 1 1 月 1 日～令和 4 年 3 月 3 1 日

§ 1. 研究実施体制

「1-1 Pbフリー太陽電池の高効率化と耐久性向上」グループ(電気通信大学)

① 研究開発代表者:早瀬 修二 (電気通信大学 i-パワーエネルギーシステム研究センター、特任教授)

② 研究項目

・SnGe ペロブスカイトの結晶欠陥、ヘテロ界面欠陥、スパイク構造のバンド構造の導入、マルチイオン化により性能向上を図るとともに、2D ペロブスカイトプリカーサーの添加、F 化合物のパッシベーション、無機膜パッシベーションにより、耐久性向上を達成する。

「1-2 Pbフリーペロブスカイト太陽電池の最適設計と動作解析」グループ (立命館大学)

① 主たる共同研究者:峯元 高志 (立命館大学理工学部、教授)

② 研究項目

・太陽電池用 1次元デバイスシミュレーションを用いた Pb フリーペロブスカイト太陽電池の最適設計と動作解析を行う。

「1-3 Pbフリーペロブスカイト太陽電池の電子物性と耐久性」グループ (宮崎大学)

① 主たる共同研究者:吉野 賢二 (宮崎大学工学教育研究部、教授)

② 研究項目

・Pb フリーペロブスカイト太陽電池のキャリア移動層の電子物性と耐久性、高効率化の指針を提案する。

「1-4 Pbフリーペロブスカイト太陽電池の光物性と電荷分離機構の解明」グループ (電気通信大学)

①主たる共同研究者:沈 青 (電気通信大学基盤理工学専攻、教授)

② 研究項目

・Pbフリーペロブスカイト太陽電池のペロブスカイト光吸収層の光物性(バンドギャップとアーバックエネルギー)と光励起キャリアダイナミクスを評価し、これらの特性と Pb フリーペロブスカイトの作製条件の相関性を検討する

「1-5 第一原理計算、自由エネルギー計算などの計算機科学を駆使したペロブスカイト組成の提案」グループ (九州大学)

①主たる共同研究者:飯久保 智 (九州大学、教授)

③ 研究項目

・Pbフリーペロブスカイト太陽電池の光吸収層について、第一原理計算、自由エネルギー計算などの計算機科学を駆使したペロブスカイトの高効率化、高耐久性化に関する提案を行う。

「2-1 材料化学に基づく高性能 Pbフリーペロブスカイト太陽電池の作製と特性評価」グループ (京都大学)

①主たる共同研究者:若宮 淳志 (京都大学、教授)

② 研究項目

・Pbフリーペロブスカイト太陽電池を構成する独自の材料を開発し、各材料層の作製法を開発する。

「2-2 Pbフリーペロブスカイト太陽電池の物性評価とデバイス解析」グループ（京都大学）

①主たる共同研究者：大北 英生（京都大学 教授）

②研究項目

・各種先端分光測定を駆使して Pb フリーペロブスカイト太陽電池を構成する材料の物性評価を行うとともに素子特性をデバイス物理の観点から解析することによりエネルギー損失過程を明らかにする。

「2-3 Pbフリーペロブスカイト太陽電池の光電気特性評価と素子評価」グループ（大阪大学）

①主たる共同研究者：佐伯 昭紀（大阪大学 教授）

②研究項目

・時間分解マイクロ波伝導度法（TRMC）を用いて、Pb フリーペロブスカイトの電荷ダイナミクス（電荷移動度とキャリア寿命）、および非鉛材料に特化したホール輸送層へのホール移動を直接観察し、基礎電気物性の解明と材料スクリーニングを行う。

「2-4 Pbフリーペロブスカイト太陽電池の ESR 分光評価と素子特性の低下・劣化機構の解明」グループ（筑波大学）

①主たる共同研究者：丸本 一弘（筑波大学 教授）

②研究項目

・Pb フリーペロブスカイト太陽電池を構成する材料やデバイスの電子スピン共鳴（ESR）測定を行い、材料やデバイス中の長寿命の電荷・スピン状態を検出し、高効率化・長寿命化に不可欠なデバイス特性の低下・劣化機構を、分子・原子レベルの微視的な観点から明らかにする。

§ 2. 研究実施の概要

本研究は Pb を含まないハロゲン化ペロブスカイト太陽電池に関する。研究プロジェクトが発足した当時、Si 系太陽電池に肉薄する 20%を超える高効率のハロゲン化ペロブスカイト太陽電池（プリンタブル太陽電池）が報告されていた。MAPbI₃(MA:methylammonium cation)を光吸収層とするハロゲン化ペロブスカイト太陽電池は本プロジェクト研究開発時に小面積 0.09 cm²で 22.1%, 1 cm²で 19.7%の高効率が報告されているが、有害な Pb を含有していることが大きな問題点でありボトルネックであった。これまで MA₃Bi₂I₉, Cs₂SnI₆などの Bi, Sn 系擬ペロブスカイトが報告されているが、しかし、効率は 2-3%に留まっている。本提案では 20%を超える Pb フリーペロブスカイト太陽電池を達成するための指針を提案し実証する。鉛を含まない錫系ペロブスカイト太陽電池の効率を上げるために、以下の点に着目した研究を行った。①Sn⁴⁺不純物濃度を低減するための高純度化技術の開発、および Ge イオンの添加によるアロイ化技術に関する研究、②表面パッシベーション技術とパッシベーション分子デザインにより、トラップ濃度を低減し、またキャリア収集率をバランス化する研究、③ABX₃の A サイトイオンの設計により、バンドエネルギー準位を最適化する技術の開発、および結晶化速度の遅延と結晶粒を大きくするための研究、④ABX₃の X サイトの最適化、およびアロイ化技術により、バンド準位の最適化、および欠損密度減少に関する研究、⑤新 n 型、p 型材料の分子設計による n 型/ペロブスカイト/p 型間のバンドオフセットを小さくする研究により、当初の効率 5%程度から 2022/3 月時点で 13.6%, Maximum Power Point Tracking(MPPT)法による効率評価で 14.2%まで効率を向上することができた。今後これらの方法を組み合わせることにより相乗効果でさらなる高効率化が見込める。