

効率20%超で1000時間以上の太陽光連続発電を実現

～界面制御したペロブスカイト太陽電池のブレイクスルー～

配布日時：2022年9月16日14時

国立研究開発法人物質・材料研究機構

概要

1. 物質・材料研究機構（NIMS）は、太陽光に対して20%以上の光電変換効率（発電効率）を維持しながら、1,000時間以上の連続発電に耐える耐久性の高いペロブスカイト太陽電池（1cm角）を開発しました。この太陽電池は、約100℃でプラスチック上に作製できるため、汎用太陽電池の軽量化も可能にします。
2. 太陽電池は脱炭素政策の一翼を担い、世界各国で精力的に研究が進められています。従来の太陽電池よりも製造コストが安く加工しやすい次世代太陽電池として、ペロブスカイト太陽電池が注目されています。しかし、ペロブスカイト太陽電池は水分との反応により劣化しやすく、高い光電変換効率と長期耐久性の両立が課題でした。
3. 一般的なペロブスカイト太陽電池は、ペロブスカイト層が太陽光を吸収して、電子と正孔を発生させ、この電子と正孔は、ペロブスカイト層に隣接する電子輸送層（電子を取り出して輸送する）と正孔輸送層（正孔を取り出して輸送する）へ移動することで電流として取り出されます。そのため、各層と界面での電子と正孔のスムーズな移動を保ちつつ、水分子を遮蔽する界面制御が、発電効率と耐久性を両立させる鍵でした。
4. 本研究では、電子輸送層とペロブスカイト層（ ABX_3 で記述される結晶構造で $A=$ ホルムアミジニウムイオン (FA^+), Cs^+ , Rb^+ , $B=Pb^{2+}$, $X=I$ の $FA_{0.84}Cs_{0.12}Rb_{0.04}PbI_3$ ペロブスカイトを形成しました）の界面にフッ素原子を有する（撥水性を有する）ヒドラジン誘導体（5F-PHZ）を導入しました。これにより、電子輸送層を通じてペロブスカイト層に侵入する水分子を遮断することで、太陽電池の耐久性を高め、発電ロスの原因となるペロブスカイト表面欠陥の形成を抑えることに成功しました。また、正孔輸送層とペロブスカイト層の界面にホスホン酸誘導体（MeO-2PACz）を導入することにより、正孔輸送層の欠陥を極小化でき、太陽電池の効率を向上させることができました。
5. 本成果を利用して、界面に導入可能な種々の分子をデータベース化し、データ駆動型研究により、界面制御のための分子設計を行うことによって、さらに高効率で耐久性の高いペロブスカイト太陽電池の研究を進めていきます。
6. 研究成果について、Advanced Energy Materials 2022年、ページ2202029.及びACS Omega 2022年, Vol.7, ページ12147-12157に掲載されました。

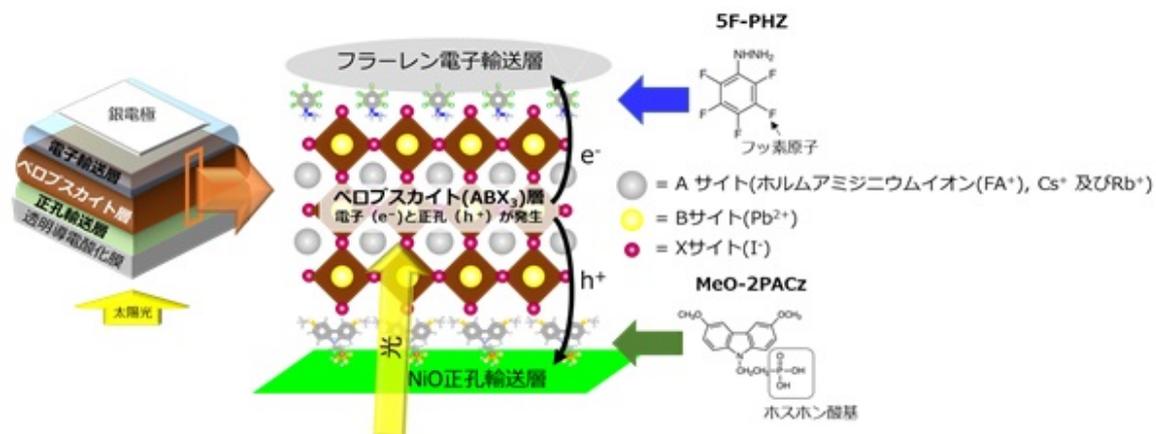


図 ペロブスカイト太陽電池、デバイス構造と各界面に導入された分子の模式図

研究の背景

日本では温室効果ガス削減目標として、2030年までに2013年度比46%削減（2050年度、ネットゼロ）を掲げています。そのためには、2030年までに、これまでとほぼ同じ量の太陽光発電を設置する必要があります。しかし日本の太陽光発電の設置率(国土面積あたりの太陽光発電の導入量)は主要国で1位であり、追加設置できる場所が限られています。そのため、建物の屋根や屋上だけでなく、壁面や窓への設置、自動車への導入などが検討されており、低コスト、軽量、高効率の太陽電池の開発が求められています。

ペロブスカイト太陽電池は、スピノコート法やドクターブレード法によって、100℃程度の低温で製造できるため、熱に弱いプラスチック基板上に製造できます。そのため、低コストで軽量の次世代太陽電池として注目されており、国の内外の企業や大学、国立研究機関の間で研究開発競争が激化しています。

一般的なペロブスカイト太陽電池は、ペロブスカイト層が太陽光を吸収して、電子と正孔を発生させ、この電子と正孔は、それぞれペロブスカイト層に隣接する電子輸送層（電子を取り出して輸送する）と正孔輸送層（正孔を取り出して輸送する）へ移動することで電流として取り出されます。電子輸送層または正孔輸送層との界面に欠陥があると、太陽光によってペロブスカイト層に発生した電子と正孔の一部は、欠陥を介して電子と正孔が再び結びつく事（電氣的に短絡してしまう事）により失われ、電力として取り出せなくなります。そのため、発電効率を向上させるためには界面を制御することが重要です。

また、ペロブスカイト太陽電池は水分によって劣化しやすく、高効率を実現しても100時間程度の連続発電で効率が半分に以下に低下します。耐久性を向上させるためには、電子輸送層または正孔輸送層との界面で水分子をブロックし、ペロブスカイト層への侵入を防ぐことも課題となっていました。

以上のように、界面で電氣的に短絡してしまう事無く、また電子と正孔のスムーズな移動を保ちつつ、水分子を遮蔽する（水分子の遮蔽によって、電子や正孔の移動を妨げてもいけません）界面制御が、発電効率と耐久性を両立させることが大きなポイントになっていました。

研究内容と成果

本研究では、ペロブスカイト太陽電池実用化の課題に向けて、界面制御をしたペロブスカイト太陽電池を開発しました。本研究のペロブスカイト太陽電池は、光照射側から、導電性酸化膜付ガラス、正孔輸送層（酸化ニッケル）、ペロブスカイト層、電子輸送層（フラーレン）、銀電極の順で積層されています。各層の厚さはナノスケール（30～400 nm）です。

太陽電池の効率は、太陽光の放射照度（1 kW/m²）あたりの発電量をデバイスの面積で割ることによって求められます。今回の研究では、実用化を視野に入れ、研究室レベルのサイズ（約0.3 cm²）よりも大きい世界標準の評価サイズである1 cm 角（1 cm²）のデバイスを作製しました。

均一なナノスケールの厚さの多層構造を持つ1 cm 角の大面积デバイスを作製するのは、0.3 cm²サイズのデバイスに比べて高度な技術が必要で、今回の研究では、次の2つの界面制御に取り組みました。

(1) ペロブスカイト層と電子輸送層の界面にフッ素原子を有する（撥水性を有する）ヒドラジン誘導体（5F-PHZ）を導入しました。その結果、界面欠陥が最小限に抑えられ、結晶性が向上し、発電ロスが低減しました。また、電子輸送層を通じてペロブスカイト層に侵入する水分子が界面で遮断されるため、耐久性が向上しました。

(2) 正孔輸送層とペロブスカイト層の界面にホスホン酸誘導体（MeO-2PACz）を導入しました。その結果、酸化ニッケルの欠陥構造をMeO-2PACzが埋めることによって、発電ロスが抑制されました。また、酸化ニッケルとペロブスカイト層の直接接触に由来する分解反応を防ぐことができ、結晶性の良好なペロブスカイト層を形成することができました。

以上により、20%以上発電効率を維持しながら、1,000時間以上の連続発電に耐える耐久性の高いペロブスカイト太陽電池（1 cm 角）を開発しました。

今後の展開

太陽電池の各界面に導入可能な種々の分子を1種類ずつ導入して性能評価を行うことによって、分子導入の効果を明らかにするには、非常に時間がかかります。しかし、グローバルな研究開発競争に負けないよう、研究を加速させなければなりません。そこで種々の分子について、効率と耐久性などの太陽電池性能に対して、界面導入方法、各層の結晶や表面構造、界面での電子や正孔移動特性の要素に分けて、データベース化し、データ駆動型研究により、性能を予測しながら界面制御のための分子設計を行うことによ

って、さらに高効率で耐久性の高いペロブスカイト太陽電池の研究を進めていきます。

研究プロジェクト

本研究は国立研究開発法人科学技術振興機構（JST） 未来社会創造事業「低環境負荷超高効率ペロブスカイト太陽電池の開発」（課題番号 JPMJMI21E6）及び、公益財団法人矢崎科学技術振興記念財団(2020年度 奨励研究助成 エネルギー)の支援を得て、NIMS のエネルギー・環境材料研究拠点 太陽光発電材料グループ (カダカ ビ ドゥラバ (Dhruba B. Khadka) 研究員、柳田真利主幹研究員、白井康裕グループリーダー)を中心に、宮野健次郎フェロー、磁性・スピントロニクス材料研究拠点 磁性理論グループ 只野中将主任研究員らによって行われました。

掲載論文

① 題目：Interfacial Embedding for High-Efficiency and Stable Methylammonium-Free Perovskite Solar Cells with Fluoroarene Hydrazine

著者：Dhruba B. Khadka, Yasuhiro Shirai, Masatoshi Yanagida, Terumasa Tadano, and Kenjiro Miyano

雑誌：Advanced Energy Materials 2022 年, ページ 2202029.

DOI：doi.org/10.1002/aenm.202202029

② 題目：Surface Passivation of Sputtered NiO_x Using a SAM Interface Layer to Enhance the Performance of Perovskite Solar Cells

著者：Amira R. M. Alghamdi, Masatoshi Yanagida, Yasuhiro Shirai, Gunther G. Andersson, and Kenjiro Miyano

雑誌：ACS Omega 2022 年, Vol.7, ページ 12147–12157.

DOI：10.1021/acsomega.2c00509

本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

国立研究開発法人物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 太陽光発電材料グループ
グループリーダー 白井康裕 (しらい やすひろ)

E-mail: shirai.yasuhiro@nims.go.jp

TEL:029-860-4792

URL: <https://www.nims.go.jp/nims-green/members/member.html>

(報道・広報に関すること)

国立研究開発法人物質・材料研究機構 経営企画部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp

(補助事業に関する問い合わせ先)

国立研究開発法人科学技術振興機構（JST） 未来創造研究開発推進部

〒102-0076 東京都千代田区五番町 7 K's 五番町

TEL 03-6272-4004

公益財団法人矢崎科学技術振興記念財団

〒105-0001 東京都港区虎ノ門 1-13-3 虎ノ門東洋共同ビル 6階

TEL：03-5501-9831