

ペロブスカイト太陽電池で高い光電変換効率と長期耐久性の両立へ大きな前進
 ~実用環境に近い60℃、効率20%以上で1000時間連続発電まで実現~

配布日時：2024年2月5日14時

NIMS（国立研究開発法人物質・材料研究機構）

概要

1. 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、60℃の高温雰囲気下で1000時間以上の連続発電に耐えるペロブスカイト太陽電池（1cm角）を開発しました。本研究の成果により、ペロブスカイト太陽電池が研究室レベルから屋外設置の実用化レベルに大きく前進しました。
2. 国土面積の小さい我が国で化石燃料を太陽光発電で代替するためには、製造コストが安い、加工しやすい、また高い発電効率の太陽電池が求められます。この観点からペロブスカイト太陽電池は有望ですが、電池の耐久性にはペロブスカイト層に侵入する酸素や水分による欠陥の発生が大きく関与することが分かっており、数10年間安定に発電し続ける事が課題となっています。室温（25℃）での疑似太陽光照射下では、1000時間連続発電が実現できていましたが、太陽光が降り注ぐ屋外では、表面温度が50℃以上（夏場では85℃）になりますので、より高温環境下での耐久性が求められます。
3. ペロブスカイトAサイトに有機アミン類を導入することにより、半導体層と絶縁層が交互に積層した二次元(2D)ペロブスカイトができます。そして2Dペロブスカイトは3次元(3D)ペロブスカイトに比べて水や酸素に強いことが一般的に知られています。本研究では、 $FA_{0.84}Cs_{0.12}Rb_{0.04}PbI_3$ 3Dペロブスカイト/C₆₀界面に有機アミンを導入し、2Dペロブスカイト結晶粒を形成させ、ペロブスカイト/C₆₀界面にある、発電効率を低減させる欠陥を取り除くことにより耐久性と発電効率を向上しました。
4. 今後、NIMSではペロブスカイト太陽電池の高効率化とともに高耐久化のための屋内（より高温条件下における疑似太陽光照射）や屋外試験を行いながら、長期信頼性を保証するための加速試験の確立を進めます。
5. 本研究成果は、Nature Communicationsに2024年1月30日オンライン掲載されました (doi: 10.1038/s41467-024-45228-9)。

ペロブスカイト太陽電池断面構造（模式図）

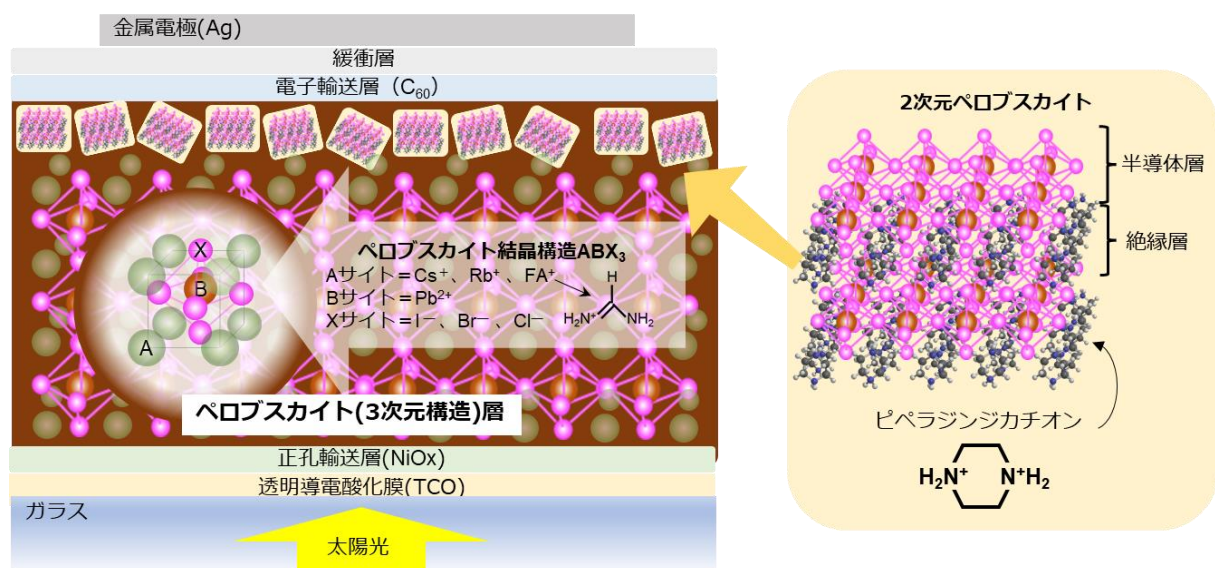


図 ペロブスカイト太陽電池の断面とペロブスカイト結晶構造の模式図

* 物質・材料研究機構は、その略称を NIMS（National Institute for Materials Science）に統一しております。

研究の背景

温室効果ガス削減のために太陽光発電システムの導入が進められています。ペロブスカイト太陽電池は 100 °C 程度の低温プロセスで作製可能で、20%以上の光電変換効率（発電効率）を得られることから、製造プロセスのコスト低減の可能性がある次世代型太陽電池として研究が進められています。太陽電池は 20 から 30 年間、安全に安定して発電し続ける必要がありますが、ペロブスカイト（ ABX_3 で記述される結晶構造）は水分との反応により劣化しやすく、太陽電池として高い光電変換効率と長期耐久性の両立が課題です。

ペロブスカイト太陽電池では、ペロブスカイト層が太陽光を吸収して、電子と正孔が発生します。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すことができます。しかしながら、電子輸送層とペロブスカイト層の界面に欠陥が生じると、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、ペロブスカイト層が形成された際の表面や粒界にある結晶欠損を除去するなど界面を制御することが、発電効率を向上させるための鍵となります。

またペロブスカイト太陽電池はペロブスカイトのイオン性結晶半導体としての特異な性質から、水分によって劣化しやすく、水や酸素は、デバイスのガラス基板、スパッタで形成される正孔輸送層などの緻密な層に対して、真空蒸着や塗布プロセスで形成される金属電極、緩衝層、電子輸送層から侵入しやすいと考えています。そこで電子輸送層とペロブスカイト層の界面に水分子や酸素に対して安定した材料を導入する必要がありました。

研究内容と成果

本研究では、ペロブスカイト太陽電池の実用化の大きな課題である長期信頼性の欠如を克服する目的で、60 °C の高温条件下において 1,000 時間の連続発電する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、TCO 付ガラス、正孔輸送層（酸化ニッケル）、厚さ 400 nm の三次元（3D）構造である $FA_{0.84}Cs_{0.12}Rb_{0.04}PbI_3$ ペロブスカイト層（ペロブスカイトは ABX_3 で記述される結晶構造で $A = \text{ホルムアミジニウムイオン}(FA^+), Cs^+, Rb^+, B = Pb^{2+}, X = I$ ）、電子輸送層（フラーレン、 C_{60} ）、緩衝層、銀電極の順で積層されています。太陽電池の発電効率は、疑似太陽光（1 kW/m²）照射による発電（kW）をデバイスの面積で割ることによって求められます。研究では、実用化を視野に入れ、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。

ペロブスカイトの A サイトに長鎖アルキル基やフェニル基などを有するアミンやジアミン化合物などの有機アミン類を導入することにより、半導体層（ペロブスカイト）と絶縁層（有機アミン類）が交互に重なり合った二次元（2D）ペロブスカイトができます。2D ペロブスカイトは疎水性の絶縁層が結晶内部に存在するため外気中（水や酸素）で安定に存在することが知られています。一方で 2D ペロブスカイトの半導体層で発生した電子と正孔は絶縁層を跨いで移動することが難しいため、ナノメートルサイズの小さな結晶粒として、3D ペロブスカイト層と電子輸送層の界面に導入することにより、ペロブスカイト太陽電池の耐久性が向上すると考えました。ペロブスカイトと電子輸送層の界面に、一般的に知られている 1,4-フェニレンジアミンの二よう化水素酸塩（PEDAI）を用いた 2D ペロブスカイトと、ピペラジンの二よう化水素酸塩（PZDI）に置き換えた場合を比較しました。その結果、ペロブスカイト表面との相互作用の強さ、2D ペロブスカイト結晶粒の形成しやすさ、2D 構造（半導体層と絶縁層との厚み）、2D 結晶粒のサイズなどに依存して、PZDI の 2D 結晶粒が界面に導入されるとより高い発電効率とより高い耐久性を示すことがわかりました。

NIMS は、発電中に温度が上がらないように冷却しながら室温（25 °C）で 1,000 時間の連続発電を実現しました。しかし、実際の屋外での発電では、日照の影響などで太陽電池の温度は 50 °C 以上の高温になると考えられています。これまでペロブスカイト太陽電池では、50 °C 以上で 1,000 時間発電は実現できませんでした。今回、太陽光に対して 20%以上の発電効率を維持しながら、60 °C の高温雰囲気下で 1,000 時間以上の連続発電に耐えるペロブスカイト太陽電池（1cm 角）を開発しました。

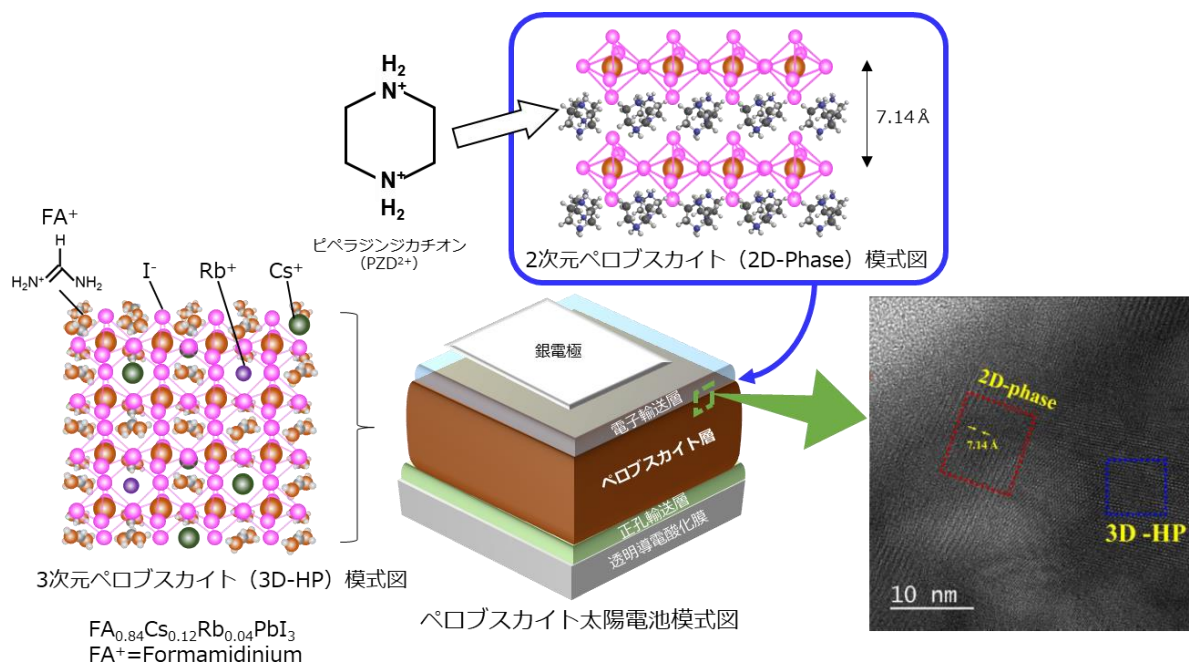


図 ペロブスカイト太陽電池とペロブスカイト結晶構造の模式図、及び3次元ペロブスカイトと電子輸送層界面に存在する2次元のペロブスカイトの透過型電子顕微鏡像。

今後の展開

ペロブスカイト太陽電池は研究が始まってから 15 年しか経っておらず、太陽電池として長期信頼性を保証する手段が求められます。今後、NIMS ではペロブスカイト太陽電池の高効率化や高耐久化とともに、屋内（疑似太陽光照射）とともに（実際の太陽光を照射する）屋外試験を行いながら、加速試験の方法の確立を進めます。

研究プロジェクト

本研究はNIMSのエネルギー・環境材料研究センター 太陽光発電材料グループ（カダカ ビ ドゥラバ (Dhruba B. Khadka) 主任研究員、柳田真利主幹研究員、白井康裕グループリーダー）、蓄電池基盤プラットフォーム 太田 一司（主席エンジニア）らによって行われました。

掲載論文

題目：Defect Passivation in Methylammonium/Bromine Free Inverted Perovskite Solar Cells Using Charge-Modulated Molecular Bonding

著者：Dhruba B. Khadka, Yasuhiro Shirai, Masatoshi Yanagida, Hitoshi Ota, Andrey Lyalin, Tetsuya Taketsugu, and Kenjiro Miyano

雑誌：Nature Communications

掲載日時：2024年1月30日オンライン掲載 (doi: 10.1038/s41467-024-45228-9)。

本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

NIMS エネルギー・環境材料研究センター 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)

NIMS 国際・広報部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

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

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