

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
年次報告書(探索研究)

H30 年度 研究開発年次報告書

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（研究科まで）・九州工業大学・生命体工学研究科]

[研究開発課題名：SnGe 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30年11月15日～平成31年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1)「界面制御による性能向上」グループ(九州工業大学(現・電気通信大学))

① 研究開発代表者:早瀬 修二 (九州工業大学生命体工学研究科、教授(現・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 太陽電池のペロブスカイト層の結晶性向上、ヘテロ界面のトラップ密度低減、スパイク構造のバンド構造を導入することにより効率向上を図る。Ge を添加したことによる性能向上の解析を行い、性能向上指針を得る。

(2)「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」グループ(電気通信大学)

① 主たる共同研究者:沈 青 (電気通信大学情報理工学研究科、教授)

② 研究項目

Pb フリーペロブスカイト太陽電池の光吸収層の光物性と光励起キャリアダイナミクス及び太陽電池の各界面における電荷分離と再結合を解明し、10%達成のためのボトルネックを見出し効率向上研究に貢献する。

(3)「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

- ・デバイスシミュレーションによる最適設計
- ・実デバイスの動作解析

(4)「Pb フリーペロブスカイト太陽電池の各層の電子物性」グループ(宮崎大学)

①主たる共同研究者:吉野 賢二 (宮崎大学工学部、教授)

②研究項目

- ・電極の作製および特性評価
- ・Pb フリーペロブスカイトの電子物性

(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(九州工業大学)

①主たる共同研究者:飯久保 智 (九州工業大学生命体工学研究科、准教授)

②研究項目

- ・SnGe 混合金属ペロブスカイト層の相安定性を第一原理計算、自由エネルギー計算により明らかにし、高効率化、耐久性に必要な最適組成、ドーパント組成を提案する。
- ・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 Sn 系 Pb フリーペロブスカイト組成の相変化に関する安定性を計算し、初期耐久性実証に貢献する。

§2. 研究開発実施の概要

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。近年 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）が報告されている。研究提案書提出当時の 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小面積 0.09cm² で 22.1%, 1cm² で 19.7%の高効率が報告されている。ペロブスカイト太陽電池は NEDO が 2030 年目標として設定している 7 円/KWh を達成できる太陽電池としても期待されている。一方ペロブスカイト太陽電池の現状の問題点はペロブスカイト層に鉛を含んでいることである。EU では Restriction of Hazardous Substances(RoHSPb 法)として電気製品に使用する鉛が規制されており、鉛を含むことがペロブスカイト太陽電池の産業化への大きな懸念となっている。これまで MA₃Bi₂I₉, Cs₂SnI₆ などの Bi, Sn 系の擬ペロブスカイト構造が検討されているが、しかし、効率は 2-3%に留まっており十分な成果は得られていない。

Pb 系ペロブスカイト太陽電池は-Pb-I-Pb-I-Pb-Iが連なった構造が特徴である。電子とホールの有効質量が Si 程度に小さく、太陽電池の光吸収層として最適な光学的、電子的物性を有している。Bi, Sn 系擬ペロブスカイト化合物を光吸収層として用いた太陽電池が報告されているがその効率は 2-3%に留まっている。これはハロゲン化ペロブスカイトに特徴的な Metal-I-Metal-I-Metal の構造が上記擬ペロブスカイト化合物には見られないためである。一方-Sn-I-Sn-I-Sn-I結合を有する MASnI₃ ペロブスカイト型太陽電池が研究され、初期に 5%程度の効率が報告されているがその再現性が疑問視されている。この度、Pb-free である MASnI₃ 太陽電池に Ge をドーピングすることにより、太陽電池の効率がドーピング前の 2.2% から 5.3%に向上することを見出した。これをシーズとして Pb free かつ高効率化を達成できる可能性がある化合物として SnGe 系混合金属ペロブスカイトを提案する。SnGe ペロブスカイトの軌道が Pb ペロブスカイトに類似していることも高効率化への期待を増大させる。SnPb 混合金属ペロブスカイト太陽電池の高効率化と同じアプローチでヘテロ界面と結晶層のトラップ密度低減により性能向上を図る。研究グループはデバイス特性を推定できるデバイスシミュレーションを担当する峯元グループ（立命館大学）、光吸収層であるペロブスカイト層の安定性を計算機科学により予測する飯久保グループ（九州工業大学）、界面、結晶性の最適化を図る早瀬グループ（九州工業大学）、全体のキャリアダイナミクスを解析する沈教グループ（電気通信大学）、半導体物性、耐久性を評価する吉野グループ（宮崎大学）からなり、マテリアル設計からデバイスシミュレーションまでを含め、無機太陽電池の研究要素を加え総合的に研究を進める。本提案では SnGe 混合金属ペロブスカイト太陽電池をベースに高効率 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。