

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（本格研究）

令和4年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名:若宮 淳志]

[所属:京都大学 化学研究所・教授]

[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:令和5年4月1日～令和6年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1)「若宮」グループ(京都大学)

①研究開発代表者:若宮 淳志 (京都大学化学研究所、教授)

②研究項目

- ・高出力化:材料・デバイス開発
- ・高耐久化:材料・封止技術開発
- ・タンデム化:材料・デバイス開発
- ・材料・デバイスの特性評価

(2)「早瀬」グループ(電気通信大学)

①主たる共同研究者:早瀬 修二 (電気通信大学インフォ・パワードエネルギー・システム研究センター、教授)

②研究項目

- ・高出力化:材料・デバイス開発
- ・高耐久化:材料・封止技術開発
- ・タンデム化:材料・デバイス開発

(3)「大北」グループ(京都大学)

①主たる共同研究者:大北 英生 (京都大学大学院工学研究科、教授)

②研究項目

- ・光物性測定の実験
- ・材料・デバイスの特性評価

(4)「佐伯」グループ(大阪大学)

①主たる共同研究者:佐伯 昭紀 (大阪大学大学院工学研究科、教授)

②研究項目

- ・高出力化:材料・デバイス開発
- ・TRMC の測定
- ・材料・デバイスの特性評価
- ・機械学習を用いた新規材料の探索と開発

(5)「丸本」グループ(筑波大学)

①主たる共同研究者:丸本 一弘 (筑波大学数理物質系、教授)

②研究項目

- ・ESR のオペランド測定
- ・材料・デバイスの特性評価

(6)「沈」グループ(電気通信大学)

①主たる共同研究者:沈 青 (電気通信大学大学院情報理工学研究科、教授)

②研究項目

- ・高出力化:材料・デバイス開発
- ・材料・デバイスの特性評価

(7)「飯久保」グループ(九州大学)

①主たる共同研究者:飯久保 智 (九州大学大学院総合理工学研究科、教授)

②研究項目

- ・理論計算を用いた材料探索
- ・材料・デバイスの特性評価

(8)「吉田」グループ(千葉大学)

①主たる共同研究者:吉田 弘幸 (千葉大学大学院工学研究院、教授)

②研究項目

- ・表面・界面物性測定(UPS、MAES、LIPES 等)
- ・材料・デバイスの特性評価

§2. 研究開発成果の概要

Sn ペロブスカイト太陽電池の効率向上を目指して、ペロブスカイト層の欠陥密度(バルク、粒界、ヘテロ界面)およびバンドオフセットの低減を研究項目として検討を続けてきた。A サイトおよび X、B サイトの組み合わせおよびドーピング効果について検討するとともに、各種メタルハライドを用いた表面パッシベーション法の開発により、 V_{oc} の向上が可能であることを見出した。ペロブスカイト層から電子輸送層への電荷注入のバンドオフセットを小さくするために、従来の材料より LUMO 準位の浅い ICBA や独自材料を用いた太陽電池の作製を検討したところ、 V_{oc} は 1 V を超えることを確認した。バンドギャップからの V_{oc} ロスは従来の 0.6 eV から 0.4 eV 程度にまで低減した。これは、Pb 系の V_{oc} ロスや SQ 限界にも近い値である。しかし、電子輸送層の改良だけでは J_{sc} は低く高効率化には至らなかった。その原因の一つが、電子注入速度が遅いことが原因であることを見出し、これに基づいて、電子輸送層との界面の工夫を行い、効率は 14.6% にまで向上した。さらに表面修飾の最適化を進め、15.3% まで効率が向上した。

より高い電流値が期待できる順型構造にも着目し、 TiO_2 電子輸送層に対してフラーレン誘導体である C_{60} -COOH ならびに C_{60} -BzA のパッシベーション効果を検討し、いずれも開放電圧の向上に有効であることを実証した。

また、耐久性に関しては、Pb 系に対して熱耐久性が劣る要因として、ヨウ化物イオンの拡散に着目し、ブロッキング層の導入を検討したところ、85 °C に対する耐久性は大きく改善することを見出した。

さらに、タンデム化技術開発の試作を進め、顕著な V_{oc} の向上を確認し、要素技術開発を進めることができた。

【代表的な原著論文情報】

1) W. Liu, S. Hu, J. Pascual, K. Nakano, R. Murdey, K. Tajima, A. Wakamiya, "Tin Halide Perovskite Solar Cells with Open-Circuit Voltages Approaching the Shockley-Queisser Limit", *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2023**, *15*, 32487-32495. (DOI: [10.1021/acsami.3c06538](https://doi.org/10.1021/acsami.3c06538))

2) T. Kitamura, L. Wang, Z. Zhang, A. K. Baranwal, G. Kapil, S. R. Sahamir, Y. Sanehira, H. Bi, T. Mac Q. Shen, S. Hayase, "Sn perovskite solar cells with tin oxide nanoparticle layer as hole transport layer", *ACS Energy Lett.* **2023**, *8*, 3565–3568. (doi.org/10.1021/acsenergylett.3c01448)

3) L. Wang, Q. Miao, D. Wang, M. Chen, H. Bi, J. Liu, A. K. Baranwal, G. Kapil, Y. Sanehira, T. Kitamura, T. Ma, Z. Zhang, Q. Shen, S. Hayase, "14.31 % Power Conversion Efficiency of Sn-Based Perovskite Solar Cells via Efficient Reduction of Sn⁴⁺", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2023**, *62*, e202307228. (doi.org/10.1002/anie.202307228)