

2017年4月27日

2016年度研究推進プログラム（科研費獲得推進型）研究成果報告書

採択者	所属機関・職名：理工学部電気電子工学科・教授 氏名：峯元 高志
研究課題	最適バンドオフセット理論に基づく高効率ペロブスカイト太陽電池

I. 研究計画の概要

平成 29 年度科学研究費助成事業－科研費－申請時の研究計画について、概要を記入してください。

有機・無機ハイブリッドのペロブスカイト新材料である $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ は高効率太陽電池の光吸収層として注目されている。太陽電池の高効率化には、光吸収層だけでなくバッファ層・ホール輸送層を含めた総合的なデバイス設計（即ちバンド設計）が重要である。本研究では、1次元デバイスシミュレーションを用いた最適なバッファ層・ホール輸送層の設計、新規ペロブスカイト材料の開発、デバイス作製と詳細な動作解析を行い、cm級の小面積セルで変換効率20%以上の実現を目指す。

II. 研究成果の概要

本プログラムの助成を受けたことによる研究成果について、概要を記入してください。

ペロブスカイト太陽電池の高効率化や構成材料の適切な選択には、動作メカニズムの理解が重要である。 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ は誘電率が大きいことから励起子が Wannier 型であり、光生成されたキャリアは化合物薄膜太陽電池と同様に扱う事ができる。本研究では、実験に先立って、 $\text{Cu}(\text{In},\text{Ga})\text{Se}_2$ 太陽電池の解析に用いられているデバイスシミュレータである SCAPS を用いて、ペロブスカイト太陽電池の高効率設計をまず行った。その結果、光吸収層に必要とされる拡散長の大きさ及び膜厚、またブロッキング層/ペロブスカイト、ペロブスカイト/ホール輸送層 (HTM) 間のバンドオフセットが性能に与える影響、およびその最適範囲について明らかにした。実験としては、まずはペロブスカイト薄膜の基本的な成長条件について検討を行った。その後、任意にバンドオフセットを制御できる ZnO 系薄膜（特に ZnMgO ）を用いてペロブスカイト太陽電池を作製した。その結果、変換効率10%を超えるようなデバイスの作製には至らなかったが、バンドオフセットを制御することによって開放電圧の向上を確認することができ、デバイスシミュレーションから予測される結果と同様な傾向を得ることができた。今後は、ペロブスカイト層の高品質化、界面の高品質化が可能となれば、バンドオフセットを整合させた高効率ペロブスカイト太陽電池を実現可能と考えられる。