

Oral presentation | 12 Organic Molecules and Bioelectronics : 12.5 Organic and hybrid solar cells

📅 Sun. Mar 16, 2025 1:00 PM - 5:00 PM JST | Sun. Mar 16, 2025 4:00 AM - 8:00 AM UTC 🏢 K405
(Lecture Hall Bldg.)

[16p-K405-1~14] 12.5 Organic and hybrid solar cells

Toshinori Matsushima(Kyushu Univ.), Hideo Ohkita(Kyoto Univ.), Ryosuke Nishikubo(Osaka Univ.)

1:00 PM - 1:15 PM JST | 4:00 AM - 4:15 AM UTC

[16p-K405-1]

[The 57th Young Scientist Presentation Award Speech] Relationship between Meniscus Shape and Film Quality of Perovskite via Bar-coating Method

○Shogo Miyake¹, Akihiko Fujii², Masanori Ozaki¹ (1.Osaka Univ., 2.OIT)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

1:15 PM - 1:30 PM JST | 4:15 AM - 4:30 AM UTC

[16p-K405-2]

Investigation of the Coating Conditions for Perovskite Layer Patterning Utilizing UV Ozone Treatment-Induced Wettability Changes on Substrate Surface

○Nao Saito¹, Tomoyuki Tobe^{1,3}, Tsutomu Miyasaka², Masashi Ikegami¹ (1.Graduate School of Engineering, Toin Univ., 2.Faculty of Biomedical Engineering, Toin Univ., 3.KISTEC)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

1:30 PM - 1:45 PM JST | 4:30 AM - 4:45 AM UTC

[16p-K405-3]

Rapid Process Exploration of CsPbBr₃ Thin Film by Bayesian Optimization

○(D)Shizuka Suzuki¹, Toshihiro Sato², Hideumi Koinuma³, Ryuzi Katoh¹, Ryota Takahashi¹ (1.NihonUniv., 2.VACUUM PRODUCTS, 3.SCT)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

1:45 PM - 2:00 PM JST | 4:45 AM - 5:00 AM UTC

[16p-K405-4]

Bipyridine-based Cationic Electron-Collecting Monolayers for Perovskite Solar Cells

○Tomoya Nakamura¹, Yuki Miyake¹, Shota Hira¹, Minh Anh Truong¹, Richard Murdey¹, Atsushi Wakamiya¹ (1.Institute for Chemical Research, Kyoto Univ.)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

2:00 PM - 2:15 PM JST | 5:00 AM - 5:15 AM UTC

[16p-K405-5]

Shift current in MBE-grown high-quality CsGeI₃ thin films

○Koma Miki¹, Masao Nakamura^{2,3}, Naoki Ogawa^{2,3}, Yoshinori Tokura^{1,2,3,4}, Masashi Kawasaki^{1,2} (1.Facul. of Eng., Univ. of Tokyo, 2.RIKEN CEMS, 3.RIKEN BZP, 4.Tokyo College, Univ. of Tokyo)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

2:30 PM - 2:45 PM JST | 5:30 AM - 5:45 AM UTC

[16p-K405-6]

Fabrication and Evaluation of Formamidinium-Based Multiporous Layered Electrode Perovskite Solar Cells by Fully Non-Vacuum Process

○(DC)Takaya Shioki¹, Shunsuke Oshita¹, Naonari Izumoto¹, Seigo Ito¹ (1.Univ. of Hyogo)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

2:45 PM - 3:00 PM JST | 5:45 AM - 6:00 AM UTC

[16p-K405-7]

Inverted Structure Perovskite Solar Cells Using Dopamine Hydrochloride Doped FAPbI₃

○Ryosuke Suematsu^{1,2}, Hiroaki Jinno², Daisuke Kobayashi², Kazuyuki Hirose², Naoyuki Shibayama³, Masashi Ikegami³, Tsutomu Miyasaka³, Tomoyuki Yamamoto¹ (1.Waseda Univ., 2.ISAS/JAXA, 3.Toin Univ. of Yokohama)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

3:00 PM - 3:15 PM JST | 6:00 AM - 6:15 AM UTC

[16p-K405-8]

Defect Structures and Electronic Properties in Sn/Ge Double Perovskite Solar Cell Using First-Principles Calculation

○Mai Otake¹, Suzune Omori¹, Masanori Kaneko², Giacomo Giorgi³, Koichi Yamashita², Azusa Muraoka¹ (1.Japan Women's Univ., 2.Yokohama City Univ., 3.Perugia Univ.)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

3:15 PM - 3:30 PM JST | 6:15 AM - 6:30 AM UTC

[16p-K405-9]

Impact of Cooling Rate on Crystallization and Solar Cell Performance of Co-evaporated Perovskite CsPbI₂Br Thin Films

○(D)SHIJUN SHI^{1,2}, Masato Sotome^{1,2}, Kazuteru Nonomura^{2,3}, Hiroshi Segawa^{2,3}, Takashi Kondo^{1,2} (1.Sch. of Eng., U. Tokyo, 2.RCAST, Univ. of Tokyo, 3.School of Arts and Sciences, Univ. of Tokyo)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award ◆ English Presentation

3:30 PM - 3:45 PM JST | 6:30 AM - 6:45 AM UTC

[16p-K405-10]

Self-Assembled Monolayer assisted Energy level alignment of the Ideal Band Gap Tin-Lead perovskite solar cells

○(P)Safalmani Pradhan¹, Gaurav Kapil¹, Ajay Kumar Baranwal¹, Suraya Shaban¹, Qing Shen¹, Shuzi Hayase¹ (1.UEC-Tokyo)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

4:00 PM - 4:15 PM JST | 7:00 AM - 7:15 AM UTC

[16p-K405-11]

Improving the thermal stability of tin perovskite solar cells

○(D)Takeshi Kitamura¹, Hayase Shuzi¹ (1.UEC)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

4:15 PM - 4:30 PM JST | 7:15 AM - 7:30 AM UTC

[16p-K405-12]

Fabrication of CH₃NH₃Pb(Br_xI_{1-x})₃ Thin Films by Multi-source Co-evaporation

○(M2)Junta Nakazato¹, Shijun Shi¹, Zihao Liu¹, Masato Sotome^{1,2}, Takashi Kondo^{1,2} (1.School of Eng., Univ. of Tokyo, 2.RCAST, Univ. of Tokyo)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

4:30 PM - 4:45 PM JST | 7:30 AM - 7:45 AM UTC

[16p-K405-13]

Fabrication of Tin Perovskite Solar Cells with Hydrophobic Hole-transporting Layer by Vacuum Quenching Method

○Fuyuki Harata¹, Tomoya Nakamura¹, Minh-Anh Truong¹, Richard Murdey¹, Atsushi Wakamiya¹ (1.Kyoto Univ.)

◆ English Presentation

4:45 PM - 5:00 PM JST | 7:45 AM - 8:00 AM UTC

[16p-K405-14]

Vacuum-Deposited Metal Halides Interlayers for Tin Halide Perovskite Solar Cells

○ChienYu Chen¹, Fuyuki Harata¹, Richard Murdey¹, Atsushi Wakamiya¹ (1.Kyoto Univ.)

バーコート法によるペロブスカイト薄膜形成とメニスカス形状の関係性

Relationship between Meniscus Shape and Film Quality of Perovskite via Bar-coating Method

阪大院工¹, 大阪工大² °三宅 紹心¹, 藤井 彰彦^{1,2}, 尾崎 雅則¹

Osaka Univ.¹, OIT², °Shogo Miyake¹, Akihiko Fujii^{1,2}, Masanori Ozaki¹

E-mail: smiyake@opal.eei.eng.osaka-u.ac.jp

【緒言】近年、有機無機ハライドペロブスカイトは次世代太陽電池材料として注目を集めている。我々は大面积製膜への展開が可能なバーコート法をペロブスカイトの製膜に採用してきた^[1]。本手法はコーティングバーと基板間に前駆体溶液のメニスカスを形成し(Fig. 1)、一軸掃引動作により製膜する。均一な薄膜の形成にはメニスカス形状およびその端近傍の溶液流動が重要な因子となり、これらは掃引速度 v_{bar} や基板温度 T_{sub} などの製膜条件と密接に関連する。そこで本研究では、 v_{bar} や T_{sub} の変化に伴うメニスカスの形状および溶液流速の変化を解析し、薄膜形成との関係性を検討した。

【実験】Dimethyl sulfoxide を溶媒とし、濃度 1.3 M の $\text{Cs}_{0.05}(\text{MA}_{0.17}\text{FA}_{0.83})_{0.95}\text{Pb}(\text{I}_{0.83}\text{Br}_{0.17})_3$ 前駆体溶液を調製した。バーコート法による製膜では、 v_{bar} を 0.017–50 mm/s, T_{sub} を 100–150°Cに設定した。製膜中のメニスカス形状は、長焦点高性能ズームレンズを備えたシステムを用いて観察した。

【結果と考察】塗布製膜過程におけるメニスカス形状の製膜条件に対する変化を調べた。メニスカス端近傍で結晶核が生成する蒸発領域 (Evaporation regime)^[1]に相当する低速域に着目すると、 T_{sub} の上昇に伴ってメニスカス端における基板との接触角 α が減少し、 v_{bar} の増加に伴って α が増加することが分かった (Fig. 2)。ここで Navier-Stokes 方程式を用いてメニスカス端に向かう流速 v_{sol} を計算した結果^[2]、メニスカス形状の変化に伴って v_{sol} が増加することが示唆された (Fig. 3)。 v_{sol} の増加によりメニスカス端方向へ溶質が供給されて局所的に高濃度化し、結晶成長が促進されることが考えられ、実際に表面形状および膜厚が変化した。詳細な結果は当日発表する。

【謝辞】本研究の一部は科学研究費補助金 (23H01446, 23H02038), 能村膜構造技術振興財団, 八洲環境技術振興財団, 池谷科学技術振興財団の援助の下に行われた。

[1] S. Miyake *et al.*, *Thin Solid Films*, **808**, 140563 (2024). [2] M. He *et al.*, *Nat. Commun.*, **8**, 16045 (2017).

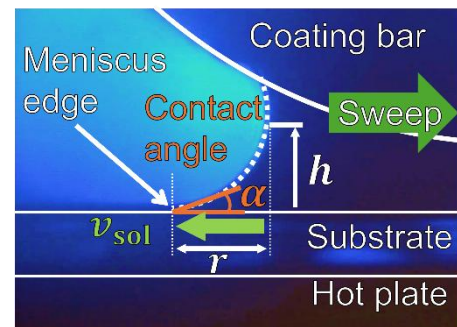


Fig. 1 Meniscus shape observed from the side during the bar-coating process

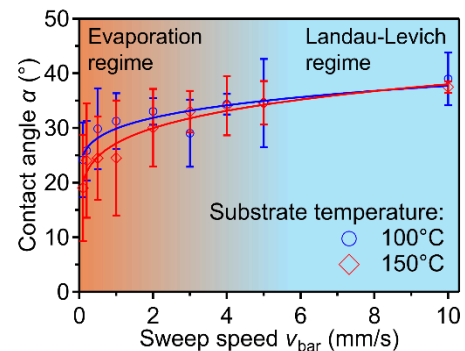


Fig. 2 Dependence of contact angle on sweep speed and substrate temperature

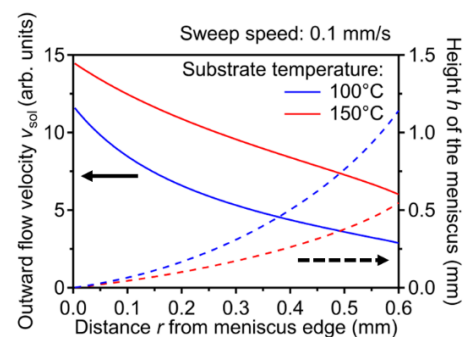


Fig. 3 Dependence of the meniscus shape and outward flow velocity on the substrate temperature

UV オゾン処理による基板表面の塗れ性変化を活用した ペロブスカイト層のパターニング塗布条件の検討

Investigation of the Coating Conditions for Perovskite Layer Patterning Utilizing UV Ozone Treatment-Induced Wettability Changes on Substrate Surface

桐蔭横浜大院工¹ 桐蔭横浜大医用工², 神奈川県産技総研³

○(D) 齋藤 直¹, 戸邊智之^{1,3}, 宮坂 力², 池上和志¹

Graduate School of Engineering, Toin University of Yokohama,¹,

Faculty of Biomedical Engineering, Toin University of Yokohama², KISTEC³

○Naoh Saito¹, Tomoyuki Tobe^{1,3}, Tsutomu Miyasaka², Masashi Ikegami¹

E-mail: ikegami@toin.ac.jp

実用的なペロブスカイト太陽電池のバリアフィルム試験や小型デバイスのデモンストレーションのため、我々の研究室では、インクジェット法ならびにスピコート法により、7cm 角の 6 直列デバイスを中心に作製を進めている。ペロブスカイト太陽電池モジュールでは、発電層となるペロブスカイト層のパターニングが、直列接続のために不可欠である。このパターニングには、基板全面に成膜した後に不要領域を除去する方法と、必要な領域のみに直接成膜を行う方法が検討されている。前者ではレーザーパターニングやメカニカルパターニング（スクライビング）を用いて特定の層を除去する手法が用いられる¹⁾。一方、後者ではインクジェット法や、パターニングされた型を用いて同一形状を転写するインプリント法、あるいはフォトリソグラフィティブロセスを適用する方法が挙げられる²⁾。

UV オゾン処理は、UV 光と活性酸素種の作用により基板表面の有機物が除去され、さらに官能基が生成されることで濡れ性が向上するために一般的に行われている方法である。本検討では、UV オゾン処理時に、基板にマスクを貼り付けることで、塗れ性の違いを生じさせてペロブスカイト層を塗布した。図 1 に、矩形マスクを貼り UV オゾン処理をした基板にペロブスカイト前駆体溶液を滴下した様子を示す。○で示した部分は、マスクを貼り付け活性酸素種の接触を防いだため、塗れ性が低く、前駆体溶液が玉になっている。この基板をスピコート成膜すると、ITO を除去したライン(P1)において、前駆体溶液の広がり方の違いにより膜厚が大きく変化した。この結果は、ペロブスカイト層の成膜前に行った UV オゾン処理が ITO 表面と ITO 除去面に濡れ性の差を生じさせたことに起因していると考えられる。

1) Le, Thanh-Hai, et al. *Advanced Electronic Materials* 9.10 (2023): 2300093.

2) Lee, Jin-Wook, et al. *Nano-Micro Letters* 15.1 (2023): 184.

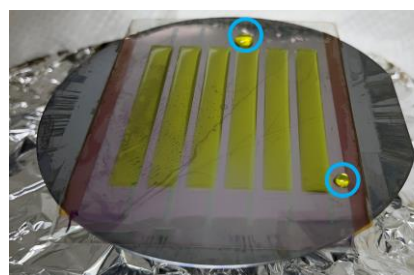
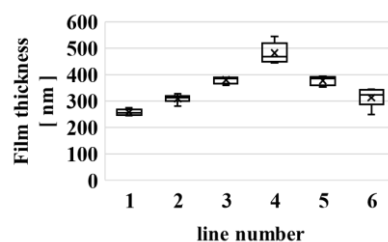


図 1 スピコートで作製したペロブスカイト層のラインごとの膜厚と UV オゾン処理で生じた濡れ性の違い

ベイズ最適化による CsPbBr₃ 薄膜の高速プロセス探索

Rapid Process Exploration of CsPbBr₃ Thin Film by Bayesian Optimization

日大工¹、バキュームプロダクツ²、SCT³

○(DC3) 鈴木静華¹、佐藤利弘²、鯉沼秀臣³、加藤隆二¹、高橋竜太¹

NihonUniv.¹, VACUUM PRODUCTS², SCT³

°S. Suzuki¹, T. Sato², H. Koinuma³, R. Katoh¹, R. Takahashi¹

E-mail: cesi22001@g.nihon-u.ac.jp

1. はじめに

ハライドペロブスカイト材料は、直接遷移半導体であることから高い光の吸収係数を有し、太陽電池やレーザーへの応用が期待されている。本研究ではこの材料群の中でも緑色に強く発光する CsPbBr₃ に着目し、赤外レーザー堆積法¹ というユニークな真空プロセスによって膜質を向上させることを試みた。この薄膜プロセスでは、“基板温度”や“堆積レート”、“圧力”の3つの重要合成パラメーターがあり、本研究では、機械学習の手法であるベイズ最適化を用いることによって、複数の実験パラメータを少ない実験数で最適化することを試みた。その結果、20回の実験で結晶性が高い CsPbBr₃ 薄膜の合成に成功した。

2. 方法

CsPbBr₃ 粉末に 1,060 nm の赤外線レーザーを照射し、材料を蒸発させることにより、SrTiO₃ (001) 基板上に CsPbBr₃ 薄膜を堆積した。ベイズ最適化の手法を用いて、CsPbBr₃ (110) の X 線回折 (XRD) ピーク強度が最大化するように、“基板温度”、“堆積レート”、“窒素圧”の3つの合成パラメーターを自動的に最適化した (図 1)。最適化した CsPbBr₃ 薄膜特性の定量的評価には時間分解マイクロ波分光法 (TRMC) を用いた。

3. 結果

ベイズ最適化による CsPbBr₃ 薄膜の成膜条件の最適化により、Cs/Pb 比が 1 で、結晶性が非常に高い CsPbBr₃ 薄膜の成長に成功した。膜質の向上は薄膜特性の改善に繋がると期待され、TRMC 法によって移動度とフォトキャリアの寿命測定を系統的に行った。最適条件下で合成した薄膜では、移動度が 17 cm²/Vs、フォトキャリアの寿命値が 60 μs と見積もられた。後者の値は CsPbBr₃ 単結晶における報告値² (100 μs) に匹敵する特性であり、赤外レーザー堆積によって作製された薄膜が非常に高い結晶性を有していることが明らかになった。

参考文献

- 1 T. Dazai et al, *ACS Appl. Electron. Mater.* 5, 3965 (2023)
- 2 A. Bojtor et al, *Adv. Energy Sustainability Res.* 2400043 (2024)

[謝辞] 本研究の一部は、科研費(24KJ2036)、日本大学 SDGs 研究プロジェクト(24SDG02)、防衛装備庁が実施する安全保障技術研究推進制度 (JPJ004596)の支援を受けたものである。

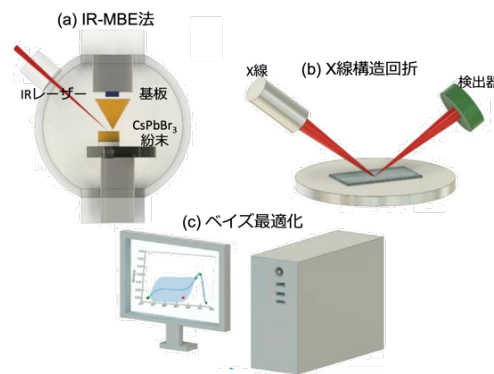


図 1 ベイズ最適化を用いた最適化プロセスの概要

ビピリジン骨格をもつカチオン性単分子電子回収材料の開発

Bipyridine-based Cationic Electron-Collecting Monolayers for Perovskite Solar Cells

京大化研[○]中村 智也, 三宅 悠季, 平 翔太, Minh Anh Truong, Richard Murdey, 若宮 淳志

Institute for Chemical Research, Kyoto Univ.[○]Tomoya Nakamura, Yuki Miyake, Shota Hira,

Minh Anh Truong, Richard Murdey, Atsushi Wakamiya

E-mail: tomoya@scl.kyoto-u.ac.jp

ペロブスカイト太陽電池の高性能化のためには、光吸収によって生成した電荷（正孔と電子）を選択的に取り出す電荷回収材料の開発が重要である。単分子膜で用いる正孔回収材料は数多く報告されているのに対し、電子回収材料の開発は進んでいない。我々は最近、チアゾリジノン骨格をもつ独自の単分子膜材料 **TzDPA** を開発した (Fig. 1a)¹⁾。本材料を用いた太陽電池素子では11%程度の光電変換効率 (PCE) が得られたが、スキャン方向によるヒステリシスが大きく、ペロブスカイト層 / 電子回収層 (ECL) 界面で電子の取り出しが滞っていると考えられた。

本研究では、中性分子の代わりにカチオン性の π 共役分子を用いれば、より効率よく電子を取り出すことができると考えた。ビピリジン骨格の窒素上にアルキルホスホン酸基を1つまたは2つ導入した、**Mono-PA** および **Bis-PA** を設計・合成した (Fig. 1a)。これらの分子をITO基板に吸着させたものを電子回収層として用いて太陽電池素子を作製したところ、従来分子よりもヒステリシスが小さくなり、それぞれ15.2% (**Mono-PA**)、16.3% (**Bis-PA**) の光電変換効率 (forward および reverse scan の平均) が得られた (Fig. 1b)。発表では、これら単分子電子回収材料の電子準位や表面被覆率と太陽電池特性との関係について詳細に議論する。

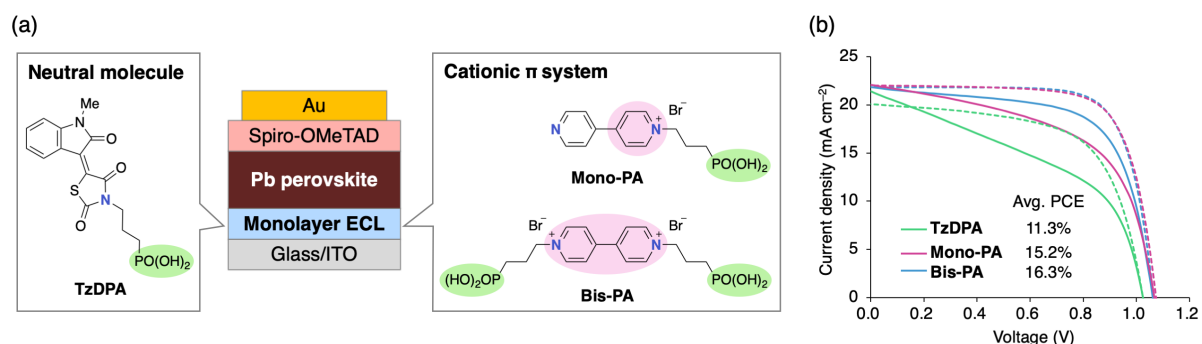


Fig. 1. (a) Chemical structures of electron-collecting monolayers. (b) Current-voltage ($J-V$) curves of perovskite solar cell devices. Solid and dashed lines represent forward and reverse scan curves, respectively.

1) Y. Miyake, T. Nakamura, A. Wakamiya et al., *Chem. Asian. J.* under revision.

分子線エピタキシー法で作製した CsGeI₃ 高品質薄膜のシフト電流Shift current in MBE-grown high-quality CsGeI₃ thin films東大工¹, 理研 CEMS², 理研バトンゾーン³, 東大東京カレッジ⁴○(B)三木 孝馬¹, 中村 優男^{2,3}, 小川 直毅^{2,3}, 十倉 好紀^{1,2,3,4}, 川崎 雅司^{1,2}Facul. of Eng., Univ. of Tokyo¹, RIKEN CEMS², RIKEN BZP³, Tokyo College, Univ. of Tokyo⁴○Koma Miki¹, Masao Nakamura^{2,3}, Naoki Ogawa^{2,3}, Yoshinori Tokura^{1,2,3,4}, Masashi Kawasaki^{1,2}

E-mail: miki-koma784@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

次世代の光エレクトロニクス材料としてペロブスカイト構造を持つハライドが注目されており、特に B サイトに Pb を有する化合物が精力的に研究されている。一方、Pb²⁺をイオン半径の小さな Ge²⁺で置換すると、菱面体晶に格子が歪み、強誘電性が発現することが知られている。その代表例である CsGeI₃(CGI)は、室温で 20 μC/cm² を超える大きな自発分極[1]を示すことに加え、太陽電池に適した 1.6 eV のバンドギャップを持つことから、優れたバルク光起電力特性が期待される。最近の研究から、バルク光起電力効果ではシフト電流と呼ばれる量子幾何学位相に駆動される光電流が重要な役割を果たしており、エネルギー非散逸性や高速応答性など、従来の光起電力効果を凌駕する特性を示すことが明らかになっている。しかし、CGI は湿式法による薄膜作製が困難であるため、薄膜作製や光電特性に関する先行研究はこれまで皆無であった。そこで本研究では、分子線エピタキシー(MBE)法を用いて高品質の CGI 薄膜を作製し、シフト電流を観測することを目的とした。

CGI 薄膜は、CsI と GeI₂ を蒸着源とする MBE 法により BaF₂ 基板(格子不整合 3.6 %)上に作製した。Fig. 1 の X 線回折パターンは、(001)基板上に高品質のエピタキシャル薄膜が形成されていることを示している。同様に、(110)及び(111)基板上にも同配向のエピタキシャル薄膜の作製に成功し、基板面による薄膜の配向制御を実現した。次に薄膜の面内方向における光起電力特性の観測を行った。Fig. 2 は、(001)基板上の薄膜において観測された 20 K におけるゼロバイアス光電流の励起スペクトルである。CGI のバンド端(1.6 eV)付近で急峻に立ち上がり、2.5 eV 付近でピークを持っている。これらの特徴は、第一原理計算で得られた CGI のシフト電流スペクトル[2]と良く一致しており、観測された光電流がシフト電流であることを強く示唆している。講演では、電場による分極制御の試みや、光電流の偏光依存性についても議論する。謝辞: 本研究は JSPS 科研費 22H04958, 24H02234 の助成を受けて行われた。

[1] Y. Zhang *et al.*, *Sci. Adv.* **8**, eabj5881 (2022). [2] N. Cheil *et al.*, *RSC Adv.* **13**, 1955 (2023).

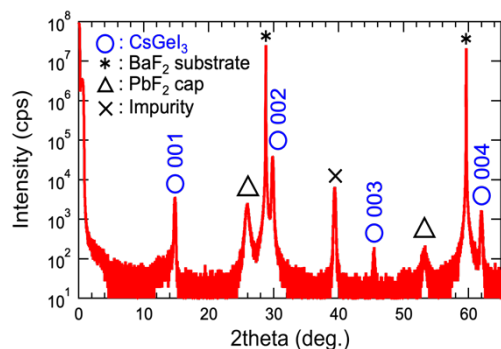


Fig. 1 XRD profile of a CsGeI₃ thin film on a BaF₂(001) substrate.

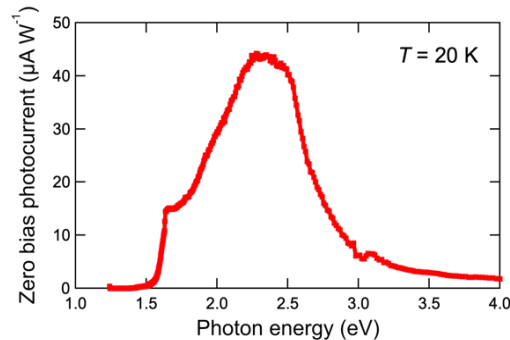


Fig. 2 Excitation spectrum of zero-bias photocurrent at 20 K in a CsGeI₃ thin film on a BaF₂(001) substrate.

完全非真空プロセスによるカーボン系多層多孔質型 FA ベースペロブスカイト太陽電池の作製・評価

Fabrication and Evaluation of Formamidinium-Based Multiporous Layered Electrode Perovskite Solar Cells by Fully Non-Vacuum Process

兵庫県大工¹, ^{○(DC)}塩木 貴也¹, 大下 舜介¹, 泉本 直也¹, 伊藤 省吾¹

Univ. of Hyogo¹, ^{○(DC)}Takaya Shioki¹, Shunsuke Oshita¹, Naonari Izumoto¹, Seigo Ito¹

E-mail: itou@eng.u-hyogo.ac.jp



【背景・目的】カーボン系多層多孔質型ペロブスカイト太陽電池 (MPLE-PSCs) は従来, その光吸収材料として $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ に 5-アミノ吉草酸ヨウ化物 (5-AVAI) を添加した 5-AVA-MAPbI₃ が使用されているが, 最近では更に高品質な光吸収結晶を得るためにホルムアミジニウム (FA⁺) をベースとする材料への置き換えの動きがある¹⁻³. しかしながら FA ベースのペロブスカイト光吸収材料の結晶化には本来厳しい雰囲気制御が必要とされる. 本研究では MPLE-PSCs の実用性を高めるために, 結晶化プロセスの最適化を通じて FA ベースペロブスカイト光吸収材料を用いた MPLE-PSCs の完全非真空プロセスでの作製を試みた.

【作製方法】フッ素ドープ SnO_2 ガラス基板にスプレー熱分解法でホールブロック層として緻密な TiO_2 層を成膜した. その後, 電子輸送層として多孔質 TiO_2 層, 絶縁層として多孔質 ZrO_2 層, ホール輸送層と背面電極として多孔質カーボン層をスクリーン印刷法で順に印刷・焼成することで積層した. その後, RbCsFAPbI_3 ペロブスカイト前駆体溶液を多孔質電極に滴下し, アニールすることで結晶化させた (Fig. 1).

【結果・結論】 RbCsFAPbI_3 を用いた MPLE-PSCs は前駆体溶液の濃度, アニール温

度および溶媒の種類によって結晶化の品質の変化が確認された. それぞれの最適化により, 完全非真空プロセスで受光面積 15.17 cm^2 の RbCsFAPbI_3 を用いた MPLE-PSCs ミニモジュールを作製し, 変換効率 4.5% を得た (Fig. 2).

【謝辞】 本研究は JST SPRING JPMJSP2175 の支援を受けたものである.

1. E. Kobayashi, *et al.*, *Cell Rep. Phys. Sci.* **2021**, *2*, 100648.
2. L. Perrin, T. Shioki, *et al.*, *Solar RRL* **2024**, *8*, 2400393.
3. Q. Wang *et al.*, *Adv. Energy Mater.* **2020**, *10*, 1903092.

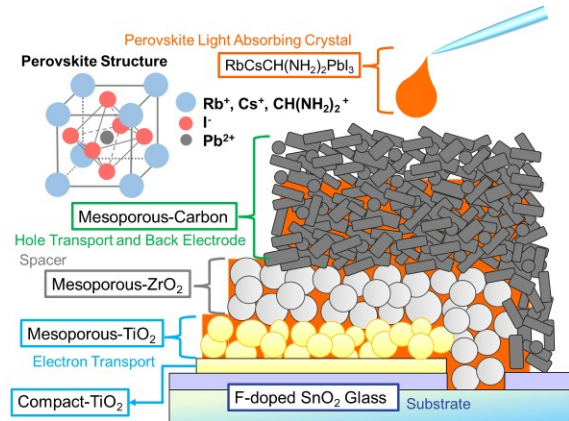


Fig. 1. Image of perovskite structure and MPLE-PSCs.

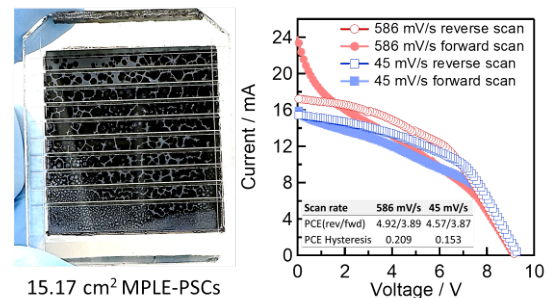


Fig. 2. Photo (left) and I - V curves (right) of MPLE-PSCs mini-module using RbCsFAPbI_3 .

ドーパミン塩酸塩添加 FAPbI₃ を用いた逆型ペロブスカイト太陽電池

Inverted Structure Perovskite Solar Cells Using Dopamine Hydrochloride Doped FAPbI₃

早大理工¹, JAXA 宇宙研², 桐蔭横浜大³ ○末松 亮助^{1,2}, 甚野 裕明², 小林 大輔²,

廣瀬 和之², 柴山 直之³, 池上 和志³, 宮坂 力³, 山本 知之¹

Waseda Univ.¹, ISAS/JAXA², Toin Univ. of Yokohama³ ○Ryosuke Suematsu^{1,2}, Hiroaki Jinno²,

Daisuke Kobayashi², Kazuyuki Hirose², Naoyuki Shibayama³, Masashi Ikegami³,

Tsutomu Miyasaka³, Tomoyuki Yamamoto¹

Email: r552@akane.waseda.jp, tymmt@waseda.jp

[研究概要] ドーパミン塩酸塩 (Dopamine Hydrochloride: DA) の添加により、 α 相 FAPbI₃ ペロブスカイト膜の安定性が向上すること[1]に加えて、DA 添加 FAPbI₃ 膜の軟 X 線耐性について報告した [2]。しかしながら、DA 添加 FAPbI₃ ペロブスカイト太陽電池の変換効率は 1%未満と非常に低く、デバイス応用には適していなかった。そこで本研究では、DA 添加 FAPbI₃ に適したキャリア取り出しの実現を目的に、従来の順型構造(Normal、n-i-p)から逆型構造 (Inverted、p-i-n)を導入し変換効率 3.99%を達成した。

[実験手法] DA 無添加、添加 FAPbI₃ を用いて逆型、順型太陽電池を作製し、その太陽電池特性を比較した。FAPbI₃ に適した逆型構造として ITO/MeO-2PACz/FAPbI₃/PCBM/BCP/Ag、同じく適した順型構造として ITO/SnO₂/FAPbI₃/Spiro-OMeTAD/Au を用いた (図 1a)。

[結果] J-V 特性の測定結果を図 1b、変換効率値を表 1 に示す。順型では、DA を添加することにより変換効率が大幅に減少した。一方逆型では、DA 添加により効率が低下するものの、順型に比べて良好な変換効率を達成した。この結果は、1. 順型におけるバンドオフセットの小さい SnO₂/DA 添加 FAPbI₃ 界面が電子取り出し阻害の要因であること、2. 逆型構造では PCBM が SnO₂ より深い電子非占有準位下端を持つため、PCBM/DA 添加 FAPbI₃ 界面における電子取り出しが改善されることを示唆している。この結果から、DA 添加 FAPbI₃ においても、適切な電子輸送層、構造を用いることで、既存の FAPbI₃ ペロブスカイト太陽電池と遜色ない効率を持ちつつ、高い安定性を持つペロブスカイト太陽電池を実現できることが期待される。

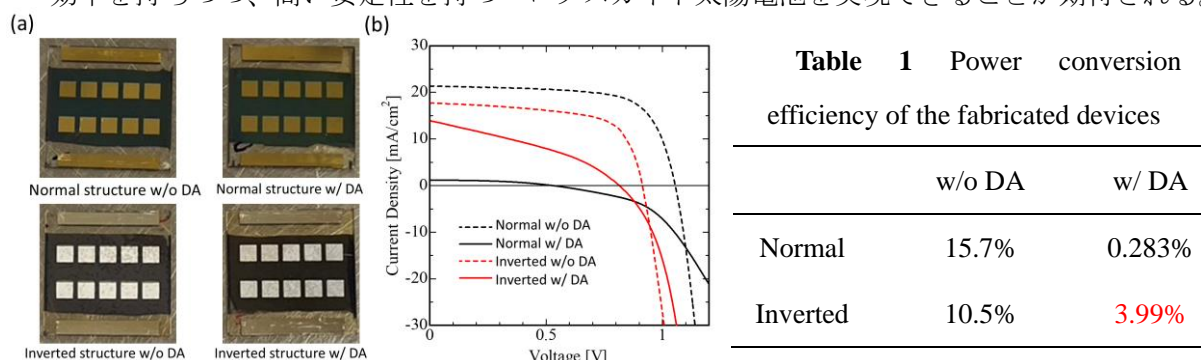


Fig. 1 DA doped FAPbI₃ perovskite solar cells: (a) Device

photographs; (b) J-V curves under simulated sunlight.

[参考文献] [1] R. Oonaga *et al.*, *FMS2022*, MM-P11. [2]末松他, 第 85 回 応物秋, 18p-P09-52.

第一原理計算を用いた Sn/Ge ダブルペロブスカイト型太陽電池材料の欠陥構造と電子特性の理論解析

Defect Structures and Electronic Properties in Sn/Ge Double Perovskite Solar Cell Using First-Principles Calculation

日女大院理¹, 横浜市大院生命ナノ², ペルージャ大³

○(M1)大竹 真愛¹, 大森 鈴音¹, 金子 正徳², Giacomo Giorgi³, 山下 晃一², 村岡 梓¹

Japan Women's Univ.¹, Yokohama City Univ.², Perugia Univ.³ ○Mai Otake¹, Suzune Omori¹, Masanori Kaneko², Giacomo Giorgi³, Koichi Yamashita², Azusa Muraoka¹

E-mail: m2016016om@ug.jwu.ac.jp

【序】 鉛 (Pb) ペロブスカイト型太陽電池は高い光電変換効率を達成しているが、鉛の毒性が実用化における課題となっている。そのため、近年では Pb フリーペロブスカイト材料の開発が求められている。特に、毒性が低くキャリア移動度が高い、スズ (Sn) ペロブスカイトは、Pb フリーペロブスカイトの代替太陽電池として注目されている。しかし変換効率の低さが課題であり、その主な原因の一つとして「欠陥」が挙げられる。これは、結晶内に欠陥が存在すると、バンドギャップ内に欠陥準位が形成され、これが光生成キャリアをトラップし、キャリアの再結合を引き起こすことで効率低下につながる^[1,2]。現在までに我々は、FASnI₃、MASnI₃において、Sn の化学ポテンシャルが大きく、ヨウ素 (I) の化学ポテンシャルが小さい条件“Sn-rich, I-poor 条件”が、欠陥準位生成の制御に有効であると報告した^[3]。本研究では、これら Sn ペロブスカイトに対して、Sn の次に注目される Ge を一部置換した Sn/Ge ダブルペロブスカイト FA₂SnGeI₆、MA₂SnGeI₆を対象に、第一原理計算を用いて、化学ポテンシャルの変化に伴う欠陥準位と欠陥生成エネルギーを評価し、光電変換効率低下につながるバンドギャップ内の欠陥準位について解析した。

【結果・考察】 第一原理計算は、交換相関汎関数 PBE-D3、カットオフエネルギー520 eV の条件で、DFT 計算パッケージ VASP (Vienna ab initio package) を用いて行った。まず、結晶格子中におけるキャリアの移動度を確認するため、有効質量を求めた。この結果、FASnI₃ に比べて FA₂SnGeI₆ が、MASnI₃ に比べて MA₂SnGeI₆ が、正孔と電子の有効質量の最小値の差が小さいことがわかった。電子、正孔の有効質量のバランスがとれないと、軽いキャリアが早く移動して、電荷の蓄積が起こりやすくなり、これが再結合に影響を及ぼす。したがって、Ge を置換することによって、電子と正孔のバランスが取れるようになるため、Sn/Ge ダブルペロブスカイトにはデバイス性能の向上が期待される。

また、光電変換効率低下の原因となるバンドギャップ内の欠陥準位について解析を行った。形成されやすい欠陥準位は、欠陥形成エネルギーが 0 eV 以下で価数に変化する状態を示し、原子空孔 (V_A)、自己格子間原子 (A_i)、アンチサイト欠陥 (A_b) が考えられる。FA₂SnGeI₆ の場合、“Sn-poor, I-rich 条件”ではスズ空孔 V_{Sn}(2-/0)、ゲルマニウム空孔 V_{Ge}(2-/1-)、スズが抜けてヨウ素が入り込んだアンチサイト欠陥 I_{Sn}(1-/0)、I_{Sn}(3-/1-)がバンドギャップ内における形成されやすい欠陥準位 (Fig. 1) であることがわかった。一方、“Sn-rich, I-poor 条件”では欠陥準位は形成されにくいことがわかった。さらに、MA₂SnGeI₆ においても、“Sn-poor, I-rich 条件”では I_{Sn}(2-/1-)が形成されやすいが、“Sn-rich, I-poor 条件”では準位は形成されない。以上より、Sn/Ge ダブルペロブスカイトは、Sn シングルペロブスカイトと同様に、“Sn-rich, I-poor 条件”を選択することで、光電変換効率に影響を与える欠陥準位の生成を効果的に制御できることが示された。

【参考文献】 [1] D. Meggiolaro, et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, 11, 3546 (2020). [2] N. Liu, et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20, 6800 (2018). [3] M. Otake, et al., *J. Comput. Chem. Jpn.*, 23, 40-43 (2024).

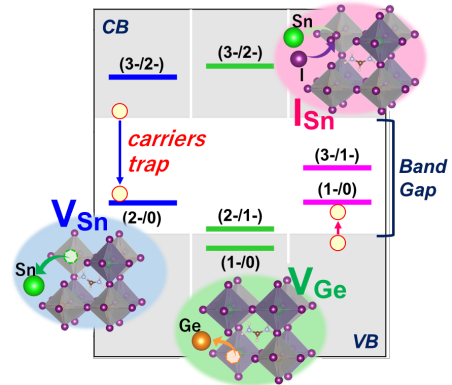


Fig. 1. FA₂SnGeI₆ の欠陥準位図 (V_{Sn}, V_{Ge}, I_{Sn})

CsPbI₂Br ペロブスカイト共蒸着薄膜の結晶化と太陽電池性能に及ぼす冷却速度の影響

Impact of Cooling Rate on Crystallization and Solar Cell Performance of

Co-evaporated Perovskite CsPbI₂Br Thin Films○(D3)石 仕駿^{1,2}, 五月女 真人^{1,2}, 野々村 一輝^{2,3}, 瀬川 浩司^{2,3}, 近藤 高志^{1,2}東大工 (Sch. of Eng., U. Tokyo)¹, 東大先端研 (RCAST, U. Tokyo)²,東大総合文化 (Sch. of Arts and Sci., U. Tokyo)³○Shijun Shi^{1,2}, Masato Sotome^{1,2}, Kazuteru Nonomura^{2,3}, Hiroshi Segawa^{2,3}, Takashi Kondo^{1,2}E-mail: shi@castle.t.u-tokyo.ac.jp

Recently, perovskite solar cells (SCs) using lead halide perovskites of the form APbX₃ (A: monovalent cations, X: Cl, Br, I) as light-absorbing layers have garnered significant research attention. To address challenges associated with moisture, oxygen, heat, and UV light, researchers have explored all-inorganic perovskite semiconductors that incorporate inorganic A-site cations [1]. Among these all-inorganic perovskites, CsPbI₂Br (bandgap 1.9 eV) is well-suited for the perovskite/silicon tandem SCs [2]. We have reported the optimal growth conditions of CsPbI₂Br thin film on physical vapor co-deposition (e.g., supply rate/ratio, substrate temperature T_{sub} , annealing treatment) [3]. The importance of the post-annealing process was clarified by the change of color to a characteristic dark brown color of CsPbI₂Br after post-annealing (300°C). The substrate was rapidly cooled in N₂ gas by removing it from the heater base after post-annealing, but the optimal cooling process had not been clarified.

In this study, CsPbI₂Br thin films were grown on FTO/PTAA (hole transport layer) substrates via co-evaporation of CsBr and PbI₂, with T_{sub} maintained at 100°C. To scrutinize the effect of post-annealing cooling process on the crystallinity of CsPbI₂Br thin film, it was annealed at 300°C for 10s in N₂ atmosphere, followed by either rapid cooling or slow cooling ($\sim 0.051^\circ\text{C}/\text{s}$) to room temperature. Compared to the inverted CsPbI₂Br SC with rapid cooling (Fig. 1a), SCs with slow cooling had uniform morphology and flat interfaces (Fig. 1b). The slowly-cooled perovskite SC showed better power conversion efficiency of 5.82% (Fig. 1c) outperforming the rapid-cooled SC (4.21%). In our presentation, we will discuss the cooling-process dependence of their crystallinities and SC performances with various organic hole transport layers.

[1] J. S. Niezgodna *et al.*, ACS Energy Lett. **2**, 1043 (2017). [2] R. J. Sutton *et al.*, Adv. Energy Mater. **6**, 1502458 (2016). [3] 石仕駿 他, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 19p-C302-7 (2024).

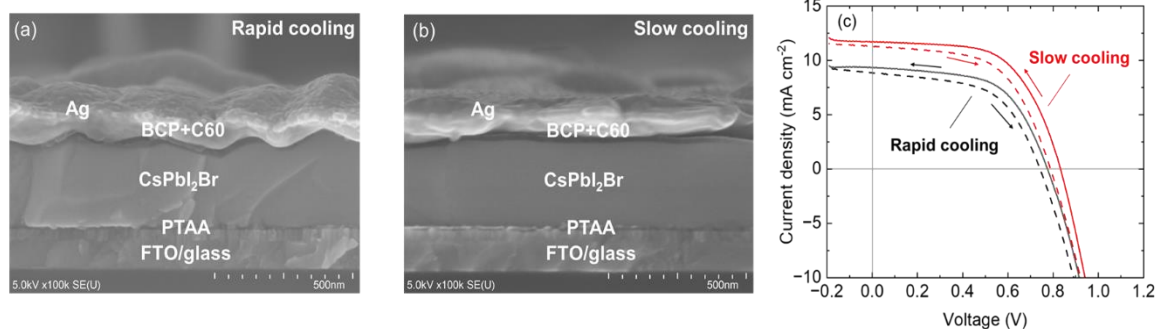


Fig. 1. (a, b) Cross sectional SEM of the CsPbI₂Br with rapid cooling and slow cooling.

(c) Their IV characteristics under AM1.5.

Self-Assembled Monolayer assisted Energy level alignment of the Ideal Band Gap Tin-Lead perovskite solar cells

Safalmani Pradhan, Gaurav Kapil, Ajay Kumar Baranwal, Suraya Shaban, Qing Shen, Shuzi Hayase

The University of Electro-Communications; Email: safalsairam95@gmail.com

Introduction

Within a short time of 15 years, the power conversion efficiency (PCE) of perovskite solar cells (PSCs) have increased from 3.8% to 26.08%, thus approaching the PCE of commercial silicon solar cells¹. However, the most efficient PSCs reported are based on lead (Pb)-based perovskites, which have a bandgap of 1.5–1.7 eV. According to the Shockley–Queisser (SQ) limit, single-junction solar cells with an ideal band gap of 1.4 eV possesses the highest theoretical PCE limit of ~33%. However, PEDOT: PSS, one of the most widely used hole transport material (HTM) suffers from acidic and hygroscopic characteristics that can severely compromise the stability of the devices. Also, the inherent absorption characteristics of PEDOT: PSS limits the solar cell's short-circuit current density (J_{sc}). In this context, self-assembled monolayers (SAMs) of organic molecules have been considered as a valid alternative to conventional HTMs used². SAMs allows the modulation of the work function (WF) of a metal oxide, in order to align it with the energy level of the photo-excited quasi-Fermi levels of the perovskite layer. However, due to energy level mismatch between the widely used SAMs, such as, 2PACz, MeO-2PACz etc, and the ideal band gap Tin-Lead (Sn-Pb) perovskite, the overall PCE in hampered. In this work we have used an organic molecule, i.e., 4-nitrophenyl boronic acid (4-NPBA) capable of forming a hole-selective contact on the metal oxide surface.

Results and Discussion

As evident in **Figure 1**, 4-NPBA-based device with an overall PCE of 18.37% exhibits a better photovoltaic performance than MeO-2PACz based device (10.6%) and a comparable photovoltaic performance to PEDOT-based device (19.01%). In fact, the short-circuit current density (J_{sc}) of 27.89 mA/cm² for 4-NPBA-based device is higher than that of PEDOT-based device (26.81 mA/cm²). It is only due its lower open-circuit voltage (V_{oc}) of 864 mV and Fill Factor (FF) of 0.76 when compared to V_{oc} of 869 mV and FF of 0.82 for PEDOT-based device, it shows a slightly lower PCE. This improved photovoltaic performance has been attributed to the energy level alignment as well as Fermi level modification of the perovskite caused by the use of 4-NPBA as HTM.

Keywords: Perovskite Solar Cells; Tin-Lead Perovskite; Self-Assembled Monolayer

References

- 1 A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai and T. Miyasaka, *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, **131**, 6050–6051.
- 2 G. Kapil, T. Bessho, Y. Sanehira, S. R. Sahamir, M. Chen, A. K. Baranwal, D. Liu, Y. Sono, D. Hirofani, D. Nomura, K. Nishimura, M. A. Kamarudin, Q. Shen, H. Segawa and S. Hayase, *ACS Energy Lett.*, 2022, **7**, 966–974.

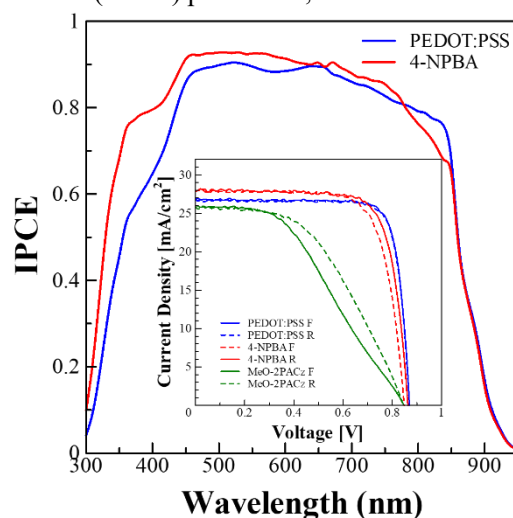


Figure 1: IPCE spectra for PEDOT-based and SAM-based PSC; I-V spectra (inset).

錫ペロブスカイト太陽電池の熱安定性向上

Improving the thermal stability of tin perovskite solar cells

電通大¹, °(D)北村 武史¹, 早瀬 修二¹

UEC¹, °Takeshi Kitamura¹, Shuzi Hayase¹

E-mail: k2243004@gl.cc.uec.ac.jp

錫ペロブスカイト太陽電池は鉛フリーペロブスカイト太陽電池の中で最も高い 15.7%の変換効率が報告されている。^[1]しかしながら、錫ペロブスカイト太陽電池は変換効率や安定性において鉛ペロブスカイト太陽電池と比較すると大幅に劣っており、更なる効率と安定性の向上が求められる。錫ペロブスカイト太陽電池の効率の低さは、錫ペロブスカイトの安定性の低さが原因である。錫ペロブスカイトの Sn^{2+} は Sn^{4+} へ容易に酸化し、これによりペロブスカイトに p 型自己ドーピングが導入されることが知られている。^[2]

錫ペロブスカイト太陽電池の効率と安定性を向上させるために未開拓な要素として、キャリア輸送層とペロブスカイト前駆体溶媒が挙げられる。現在、高効率な錫ペロブスカイト太陽電池はホール輸送層として PEDOT:PSS または NiOx を用いている。^[3]しかしながら、PEDOT:PSS は吸湿性と強酸性の特徴によりペロブスカイト太陽電池を不安定化させることが懸念されている。^[4]また NiOx は錫ペロブスカイトを酸化させることが報告されている。^[5]さらに、錫ペロブスカイトの前駆体溶媒として一般的な DMSO も錫ペロブスカイトを酸化させることが知られている。^[6]さらに、ペロブスカイト層から電子輸送層、Ag 電極へのヨウ素イオンの拡散が、ペロブスカイト太陽電池の安定性を低させることが報告されている。^[7]したがって、錫ペロブスカイト太陽電池の効率と安定性を改善させるためには、安定なキャリア輸送層と前駆体溶媒を開発する必要がある。

本研究では錫ペロブスカイト太陽電池の安定性を向上させるためにイオン拡散防止層、ホール輸送層、前駆体溶媒に焦点を当てて研究を行った。イオン拡散防止層の導入、Water free PEDOT-complex ホール輸送層、DMSO フリーのペロブスカイト前駆体溶液を用いることによって熱安定性が向上した。熱安定性を改善させた錫ペロブスカイト太陽電池は窒素環境下 85°C で 430 時間保管した後も初期効率の 81% を維持した。

参考文献

- [1] Y. Shi et al., *ACS Energy Lett.*, **9**, 1895–1897, 2024.
- [2] D. Ricciarelli, et al., *ACS Energy Lett.*, **5**, 9, 2787–2795, 2020.
- [3] D. Song, et al., *ACS Energy Lett.*, **8**, 10, 4162–4172, 2023.
- [4] J. Cameron et al., *Mater. Horiz.*, **7**, 1759, 2020.
- [5] B. Li et al., *Advanced Materials*, **36**, 17, 2309768, 2024.
- [6] M. I. Saidaminov et al., *ACS Energy Lett.*, **5**, 4, 1153–1155, 2020.
- [7] S. R. Sahamir, *ACS Materials Lett.*, **6**, 4, 1241–1246, 2024.

多元共蒸着法を用いた $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{Br}_x\text{I}_{1-x})_3$ 薄膜の作製

Fabrication of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{Br}_x\text{I}_{1-x})_3$ Thin Films by Multi-source Co-evaporation

○(M2)中里 純大¹, 石 仕駿¹, 劉 子豪¹, 五月女 真人^{1,2}, 近藤 高志^{1,2}

東大工 (School of Eng., Univ. of Tokyo)¹, 東大先端研 (RCAST, Univ. of Tokyo)²

○Junta Nakazato¹, Shijun Shi¹, Zihao Liu¹, Masato Sotome^{1,2}, Takashi Kondo^{1,2}

E-mail: nakazato@castle.t.u-tokyo.ac.jp

鉛ハライドペロブスカイト型半導体(APbX_3)を光吸収層に用いた太陽電池(PSC)は、次世代光電変換デバイスとして注目されている。 APbX_3 はハロゲンX (Cl, Br, I)の混晶比によってバンドギャップ E_g が連続的に制御可能であり、全混晶比 x で混晶化が報告されている $\text{MAPb}(\text{Br}_x\text{I}_{1-x})_3$ 混晶(MA = CH_3NH_3)においては $x = 0$ (MAPbI_3 , $E_g \sim 1.6$ eV)のPSCで高い光電変換効率が報告され[1], $x = 1$ (MAPbBr_3)がシリコンタンデム太陽電池に適した $E_g \sim 2.3$ eVを持つなど広範な応用が期待される。一方で、 $\text{MAPb}(\text{Br}_x\text{I}_{1-x})_3$ 混晶では光照射によってIリッチ/Brリッチなドメインに分離する光誘起相分離とそれに伴うPSCの効率低下が課題となっており、その抑制にハロゲンイオン欠陥密度の低減が重要であると考えられている[2]。これまでに我々は、反応プロセスの欠陥化学計算モデルも考慮し、気体 CH_3NH_2 、気体HI、固体 PbI_2 を蒸着源とした MAPbI_3 の3元共蒸着で、ガス供給比によるハライドイオン欠陥密度の制御[3]や H_2 ガスも加えた格子間 H^+ による電子ドーピング[4]を報告してきた。

本研究では、多元共蒸着による x の制御可能性を明らかにすることを目的として、これまでの3元共蒸着に気体HBrと固体 PbBr_2 を加え(図1a)、ハライド水素ガス(HBr, HI)のBr組成(x_{gas})や固体ソース(PbBr_2 , PbI_2)のBr組成(x_{solid})を制御し、 $\text{MAPb}(\text{Br}_x\text{I}_{1-x})_3$ 薄膜の成長実験を行った (圧力10 mPa、固体ソース供給レート: 0.4 \AA/s 、膜厚: 300 nm、基板温度: 室温、ポストアニーリング: $90^\circ\text{C} \cdot 30$ 秒)。その結果、 $0 \leq x_{\text{gas}}, x_{\text{solid}} \leq 1$ で吸収端の変化が観測された(図1b)。 θ - 2θ XRDピーク位置(図1c)から4つの試料が $\text{MAPb}(\text{Br}_x\text{I}_{1-x})_3$ 薄膜であることが確認され、格子定数のベガード則に基づいてハロゲン組成 x_{XRD} を求めた結果、 $(x_{\text{gas}}, x_{\text{solid}}) = (1, 1), (1, 0), (0, 1), (0, 0)$ の3元共蒸着法では x_{XRD} は化学反応式から予想されるハロゲン比 $x_{\text{expect}} = (x_{\text{gas}} + 2x_{\text{solid}})/3$ より x_{gas} に近い値となり、気相と薄膜との成長後のハロゲン交換が示唆された。発表では、4元共蒸着法($(x_{\text{gas}}, x_{\text{solid}})$ のどちらかが0か1)や5元共蒸着法($0 < x_{\text{gas}}, x_{\text{solid}} < 1$)での結果を含めて、 x_{XRD} やAFM像やバンドギャップの $(x_{\text{gas}}, x_{\text{solid}})$ 依存性などから本成膜法での $\text{MAPb}(\text{Br}_x\text{I}_{1-x})_3$ 薄膜の成長プロセスについて議論する。

[1] Z. Huang *et al.*, *Materials* **11**, 778 (2018). [2] S. J. Yoon *et al.*, *ACS energy Lett.* **2**, 1507 (2017). [3] Y. Nakamura, T. Matsushita and T. Kondo, *JJAP* **60**, 015505 (2021). [4] 中村大介, 劉子豪, 五月女真人, 松下智紀, 近藤高志, 第83回応用物理学会秋季学術講演会, 23a-B103-3 (2022).

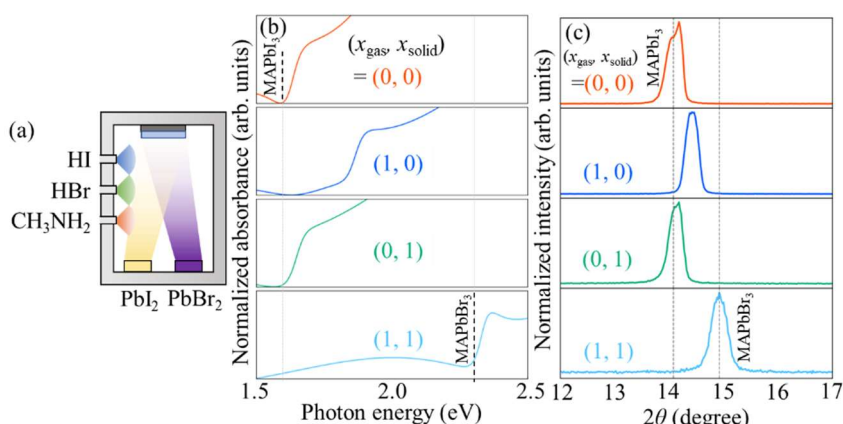


Fig.1. (a) Schematic image of multi-source co-evaporation. (b) Absorbance, (c) (100) XRD pattern of the samples prepared with $(x_{\text{gas}}, x_{\text{solid}}) = (0, 0), (1, 0), (0, 1), (1, 1)$. x_{XRD} for each samples are 0.00, 0.42, 0.05, 1.00.

減圧乾燥法による疎水性の高い正孔回収材料を用いた スズペロブスカイト太陽電池の作製

Fabrication of Tin Perovskite Solar Cells with Hydrophobic Hole-transporting Layer by Vacuum Quenching Method

京大化研 ◯原田 布由樹, 中村 智也, Minh Anh Truong, Richard Murdey, 若宮 淳志

Institute for Chemical Research, Kyoto Univ.

◯Fuyuki Harata, Tomoya Nakamura, Minh Anh Truong, Richard Murdey, Atsushi Wakamiya

E-mail: wakamiya@scl.kyoto-u.ac.jp

スズペロブスカイト太陽電池は環境負荷の小さい塗布型太陽電池として注目を集めている。スズペロブスカイトの成膜手法としては、スピコート時に貧溶媒を滴下する貧溶媒法が一般的である。しかし本手法は、大面積塗工への適用が難しく、また、ペロブスカイト組成や基板の濡れ性の違いに対して、その都度最適化が必要であった。

我々は、大面積塗工にも適用可能かつ汎用性の高い成膜法として、イミダゾール誘導体を添加剤として用いた減圧乾燥法を開発している (図 1a) [1, 2]。本減圧乾燥法を用いることで、基板の種類に影響を受けることなく緻密なスズペロブスカイト薄膜を作製できた。疎水性の高い電荷回収材料である MeO-2PACz 上にスズペロブスカイトを成膜したところ、貧溶媒法を用いた場合には基板の表面被覆率が 50%程度であったのに対して、減圧乾燥法を用いた場合には 100%まで向上した (図 1b)。貧溶媒法ではペロブスカイトが前駆体溶液から直接結晶化するのに対して、減圧乾燥法では非晶質の中間錯体を経由して結晶化することが分かった。これが成膜手法によって表面被覆率が向上した理由である。本手法を用いて太陽電池セルを作製したところ、単分子膜型の正孔回収材料を用いたスズペロブスカイト太陽電池としては最高値となる 11.6%の光電変換効率を得た (デバイス活性面積 0.1 cm^2 , ITO/MeO-2PACz/EDA_{0.01}FA_{0.98}SnI₃/C₆₀/BCP/Ag) (図 1c)。本発表では、減圧乾燥法を用いた場合の、基板の適用可能範囲についても合わせて報告する。

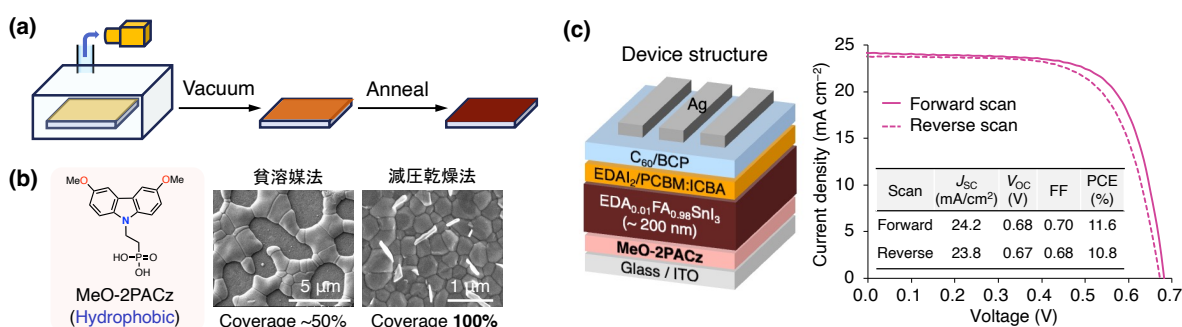


図 1 (a) 減圧乾燥法の模式図, (b) MeO-2PACz 上に作製した薄膜の電子顕微鏡画像 (左) 貧溶媒法 (右) 減圧乾燥法, (c) 太陽電池デバイスの構造と電流-電圧曲線.

[1] 原田布由樹、若宮淳志ら、第 71 回応用物理学会春季学術講演会 (2024) 発表番号 23p-2C-3

[2] F. Harata, T. Nakamura, A. Wakamiya *et al.* Submitted.

Vacuum-Deposited Metal Halide Interlayers for Tin Halide Perovskite Solar Cells
Institute for Chemical Research, Kyoto Univ. °Chien-Yu Chen, Fuyuki Harata, Richard Murdey,
Atsushi Wakamiya
E-mail: cychen@scl.kyoto-u.ac.jp; wakamiya@scl.kyoto-u.ac.jp

Metal halide perovskite solar cells have recently gained widespread attention due to their low-cost fabrication process and skyrocketing power conversion efficiencies (PCEs). It has been found that the interfaces between perovskites and their adjacent carrier transport layers significantly affect the performance of perovskite solar cells. For tin halide perovskite solar cells (SnPSCs), most reported interface engineering methods and interlayers are based on solution-processed organic molecules and halides.^[1, 2] An alternative, yet unexplored, is the use of vacuum-deposited metal halides. Without the use of solvent, vacuum deposition causes minimal damage to the tin halide perovskites, and the available materials are not constrained by solubility limitations.

In this work, several vacuum-deposited metal halides were used as interlayers between SnPSCs and C₆₀ electron transport layers.^[3] The open-circuit voltages and fill factors of FA_{0.75}MA_{0.25}SnI₃ (FA: formamidinium; MA: methylammonium) solar cells were enhanced by the optimized interlayer, resulting in an increase in device PCE from 10.2% to 12.8%. The shelf and operational stability of the devices were also improved. Additionally, the interlayer was found to be effective for FASnI₃ and PEA_{0.15}FA_{0.85}SnI₃ (PEA: phenethylammonium) solar cells. In this presentation, we will discuss the mechanism by which the interlayers improve solar cell performance.

This research is partially supported by JST-Mirai (JPMJMI22E2), NEDO-GI (JPNP21016), NEDO (JPNP20015), and JSPS (24KF0053).

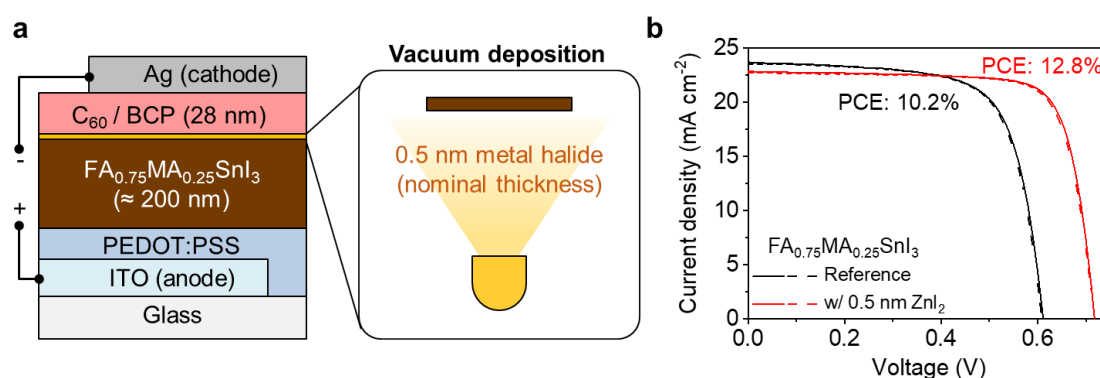


Fig. 1. (a) Device structure and (b) current density-voltage ($J-V$) curves of tin halide perovskite solar cells.

[1] E. W.-G. Diau *et al.*, *Energy Environ. Sci.* **2018**, *11*, 2353.

[2] A. Wakamiya *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2022**, *14*, 56290.

[3] C.-Y. Chen, A. Wakamiya *et al.*, *ACS Energy Lett.* **2024**, *9*, 6039.