

■事業の目的・目標

量産可能な作製手法で20%以上の初期効率を達成し、耐熱・耐湿試験および耐光試験において初期効率の90%以上を維持した状態で1500時間以上の耐久性が得られる技術を開発することを目的として、太陽電池作製条件の最適化を図るためのマテリアルズインフォマティクス（MI）、プロセスインフォマティクス（PI）技術を確立し、計算科学手法により最適材料の候補と材料開発指針を示す。

■2024年の主な成果

自動成膜装置と機械学習を活用したペロブスカイト太陽電池の変換効率最適化
化学者が最適化した太陽電池より高い変換効率を達成

The diagram illustrates an automated device for perovskite solar cell fabrication, featuring an Automated antisolvent drop system, Robot arm, Spin coater, Substrate storage area, and Hot plate. The bar chart displays the Power Conversion Efficiency (PCE) in percentage for various conditions, with a maximum value of 21.4% achieved at condition 51. The chart compares the initial state with cycles #1 through #9, showing a significant improvement in efficiency over time.

Conditions	PCE (%)
1	1.5
6	2.5
11	6.5
16	2.0
21	12.5
26	14.5
31	14.5
36	19.0
41	19.0
46	20.0
51	21.4
56	20.5
61	20.5

- 性能と相関性がある4種類のパラメータを用いて様々な条件で作製した太陽電池のデータセットを元に実験条件の最適化を実行
- ベイズ最適化により、化学者が事前に最適化した条件よりも高い変換効率を示す実験条件を提案することに成功
- MI・PI技術がペロブスカイト太陽電池のセル作製プロセスの最適化に活用可能であることを実証

N. Eguchi*, T. Fukazawa*, H. Kanda, K. Yamamoto, T. Miyake, and T. N. Murakami*, EES Sol., 2025, Advance Article

2次元結晶によるペロブスカイト太陽電池の光耐久性向上

The diagram shows the structure of a 2D perovskite solar cell, including the Back electrode, Hole transport layer (p-type semiconductor), 2D perovskite crystal, Perovskite layer (PVK), n-type semiconductor porous layer, n-type semiconductor dense layer, and Transparent conductive material. The plot shows the Energy (eV) versus Reaction coordinate, illustrating the stability of the 2D perovskite structure under light irradiation.

- 計算科学を活用することで、2次元結晶を構成するパッシベーション材料が、ペロブスカイト結晶中に拡散することが判明
- 拡散しにくいパッシベーション材料の指針が得られた
- 2次元ペロブスカイトによって光照射下におけるδ-phaseのペロブスカイトの形成を抑制できることを見出した

S. Mondal, N. Eguchi, N. Nishimura, Y. Hinuma, K. Yamamoto, A. Kogo, T. N. Murakami*, and H. Kanda*, Sustainable Energy Fuels, 2025,9, 247-255

■課題と今後の取組

- 耐久性向上に向けたペロブスカイト太陽電池の最適化
MI・PI技術および自動セル作製装置を活用することで、ペロブスカイト太陽電池の最適な組成・プロセスを最適化し、光照射下および高温下における耐久性を向上させる
- 計算科学を用いた新規候補材料提案
計算科学では各層のバルクと界面・粒界などの効果を判定・新規候補材料提案し、基盤技術グループが評価し、その結果を計算科学にフィードバックさせる

■実用化・事業化の見通し

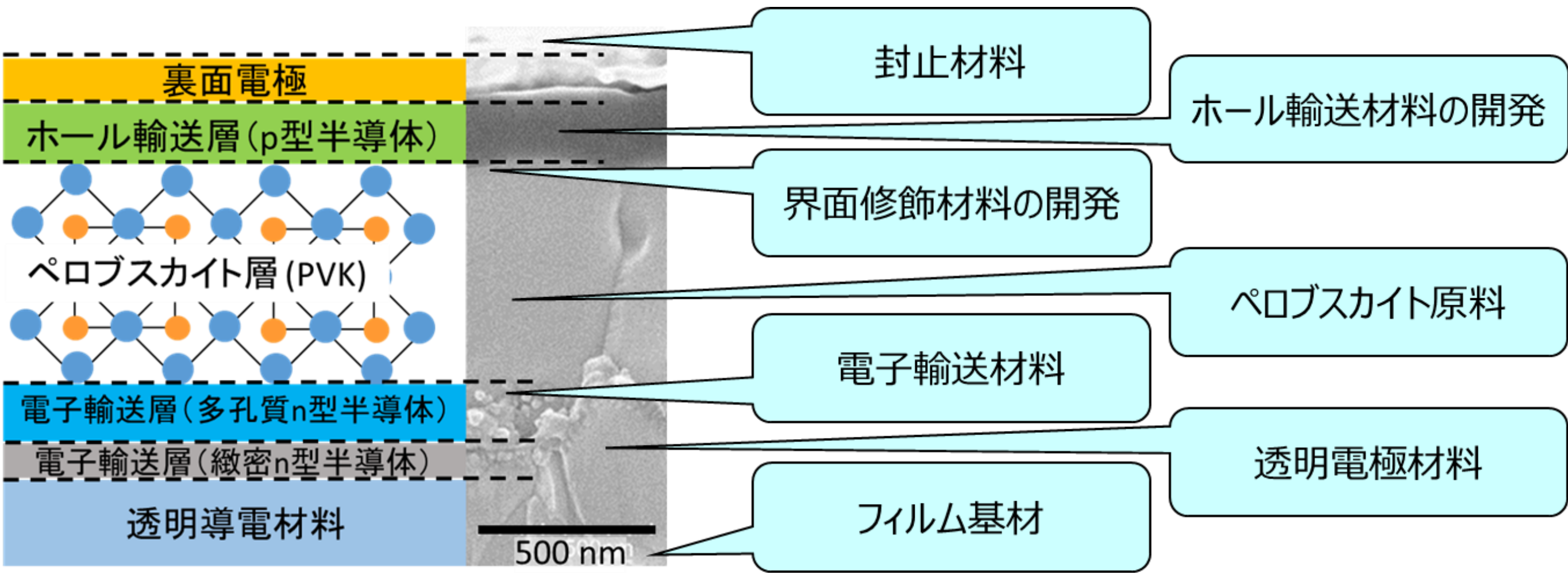
- 機械学習を活用したペロブスカイト太陽電池の変換効率最適化の手法は、産総研のデータプラットフォーム等を通じて企業に展開することを検討しており、各企業の材料・プロセスの最適化の加速が期待される
- 計算科学を通じて新規材料の開発および知財化を促進し、基盤技術が必要な企業にフィードバックすることを検討

事業の目的・目標

屋外耐久性20年相当に対応する耐久性を目的とした高効率・高耐久化技術開発として、初期変換効率20%以上の小面積セルで温度85℃・湿度85%の耐熱・耐湿試験、および 1 sunの耐光試験で1500時間後の初期性能維持率90%以上を目標とする。また量産化技術を目的とした連続成膜技術開発として、連続生産可能な成膜プロセスを用い作製した小面積セルで変換効率20%以上の達成を目標とする。

2024年の主な成果

ペロブスカイト太陽電池の耐久性向上に向けた材料開発・探索



- ペロブスカイトは水分に弱く、有機ホール輸送材のドーパントは熱劣化の原因
- 耐久性向上には各種部材の開発が必要

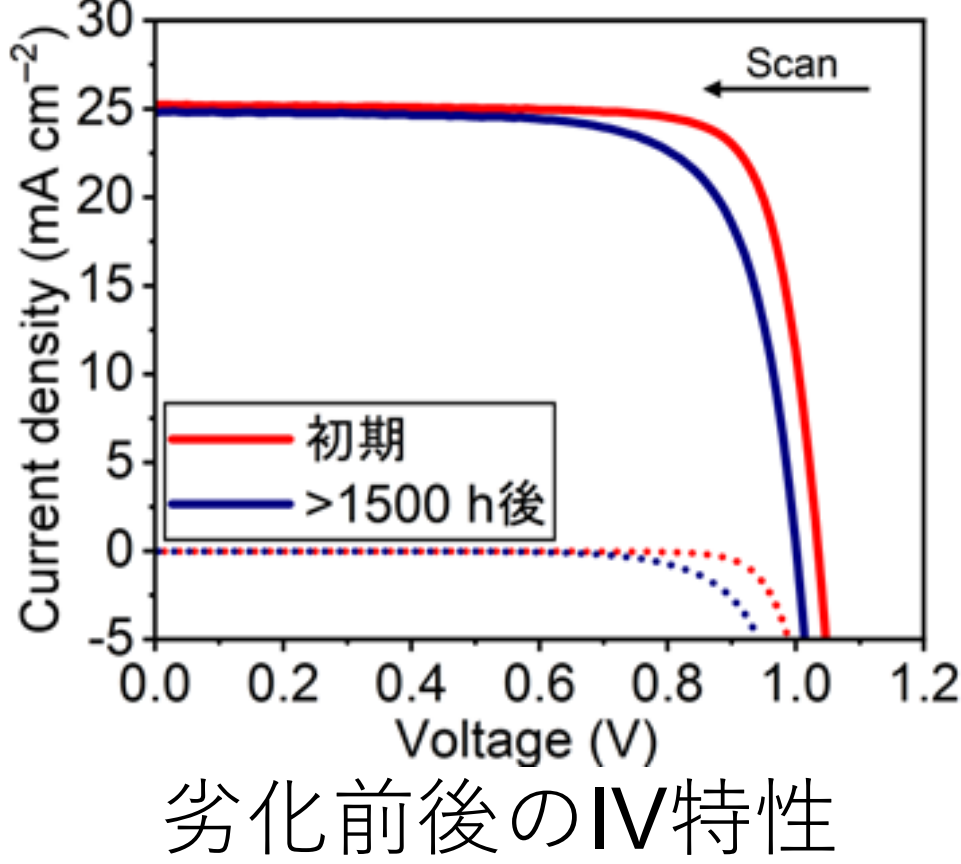
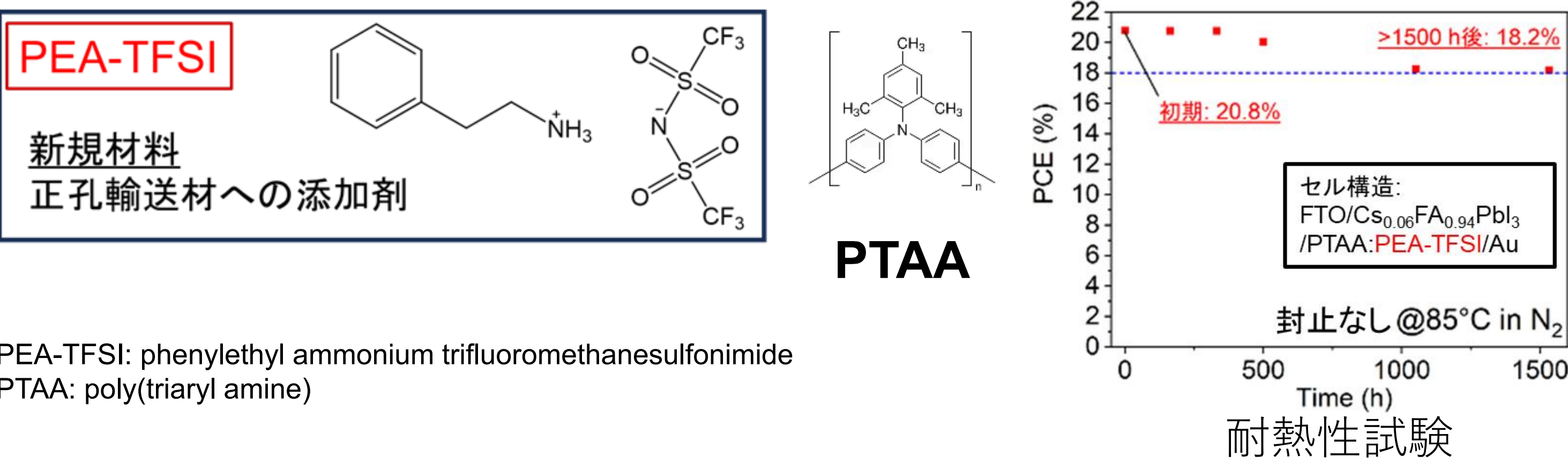
世界初となるペロブスカイト太陽電池自動作製システムを開発



- ペロブスカイト太陽電池はセル性能の**再現性が得られにくい**課題がある
- 基板洗浄、スクライブ、各種材料積層、裏面蒸着までの**セル作製**をすべて自動化
- 材料開発**期間の短縮、**セル構成の最適化**に要する期間を短縮することができる

2024年10月2日 産総研プレスリリース
山本晃平・江口直人・村上拓郎 クリーンエネルギー 2025年5月号 48-55

耐久性向上に向けたホール輸送材ドーパントの開発

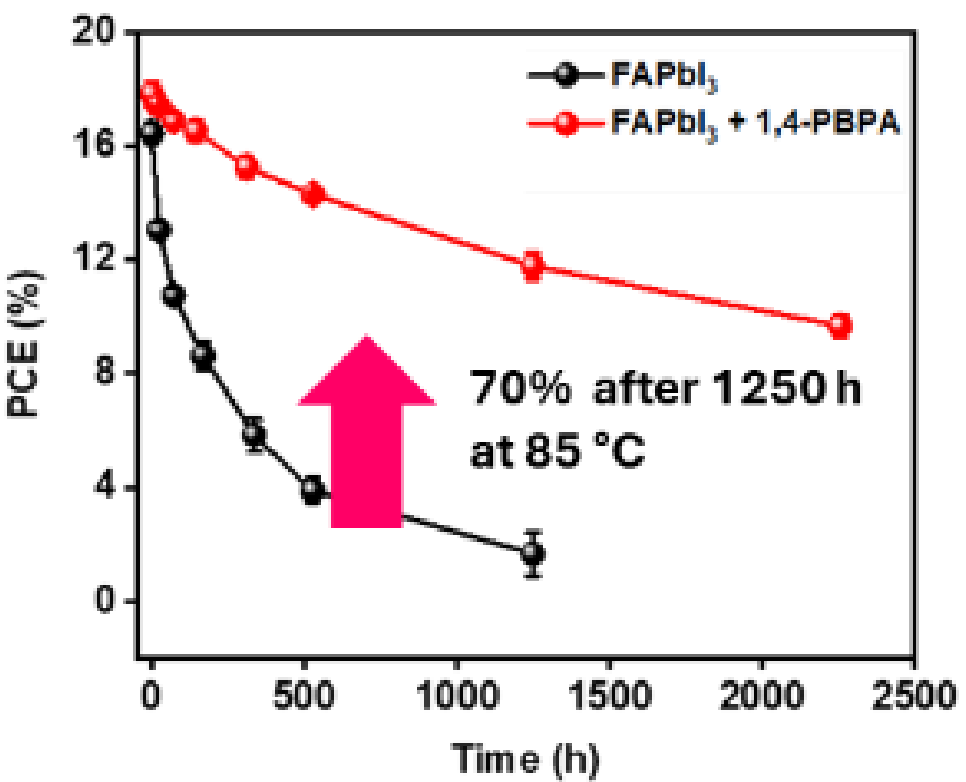
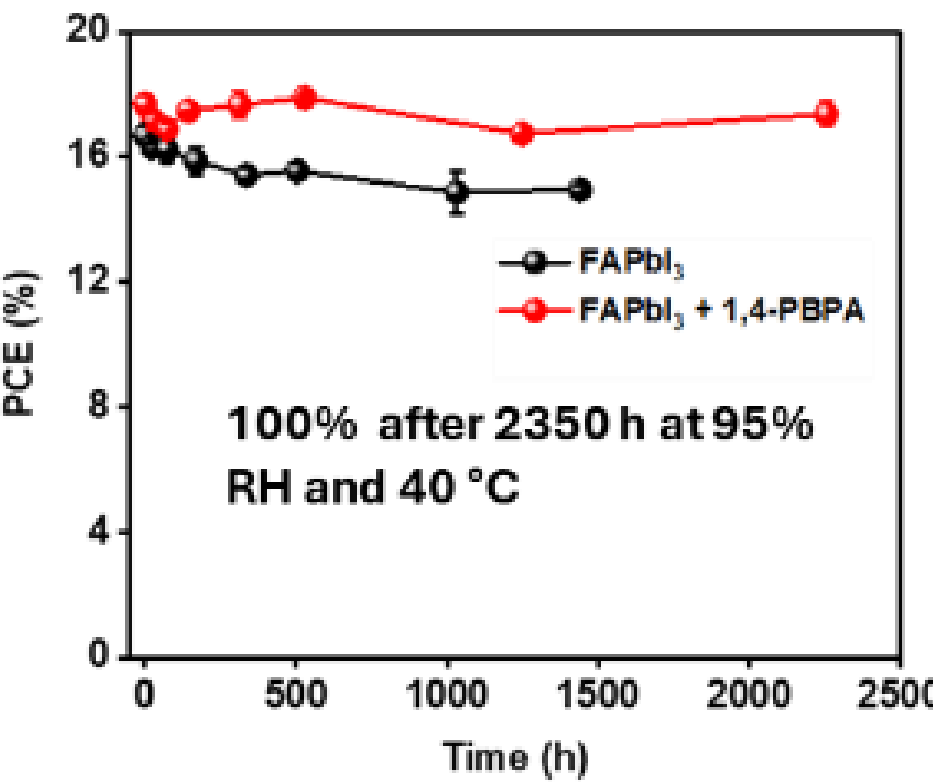
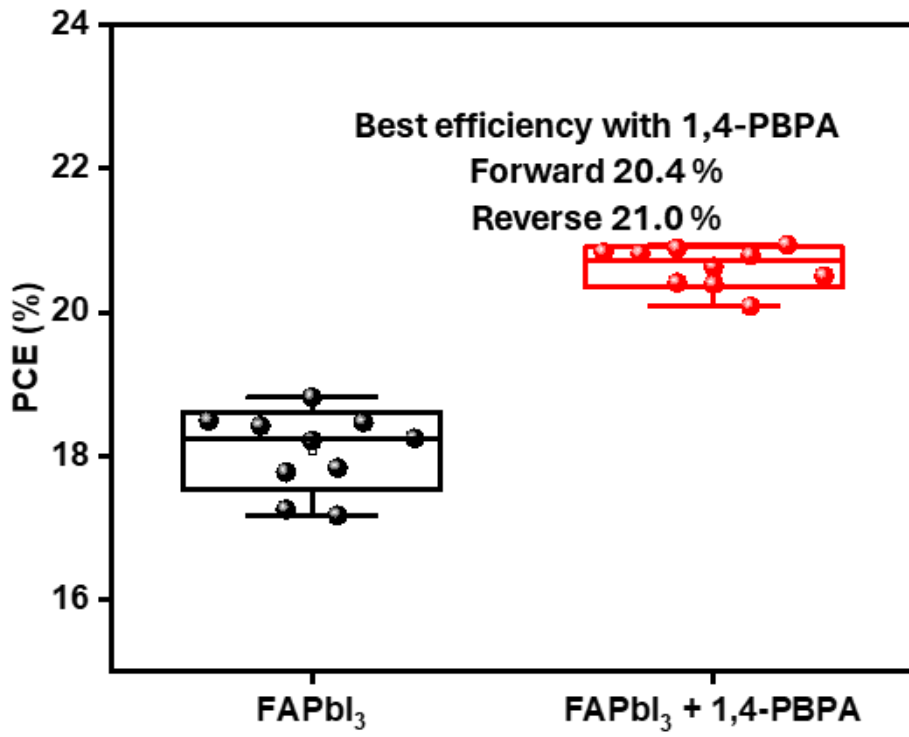
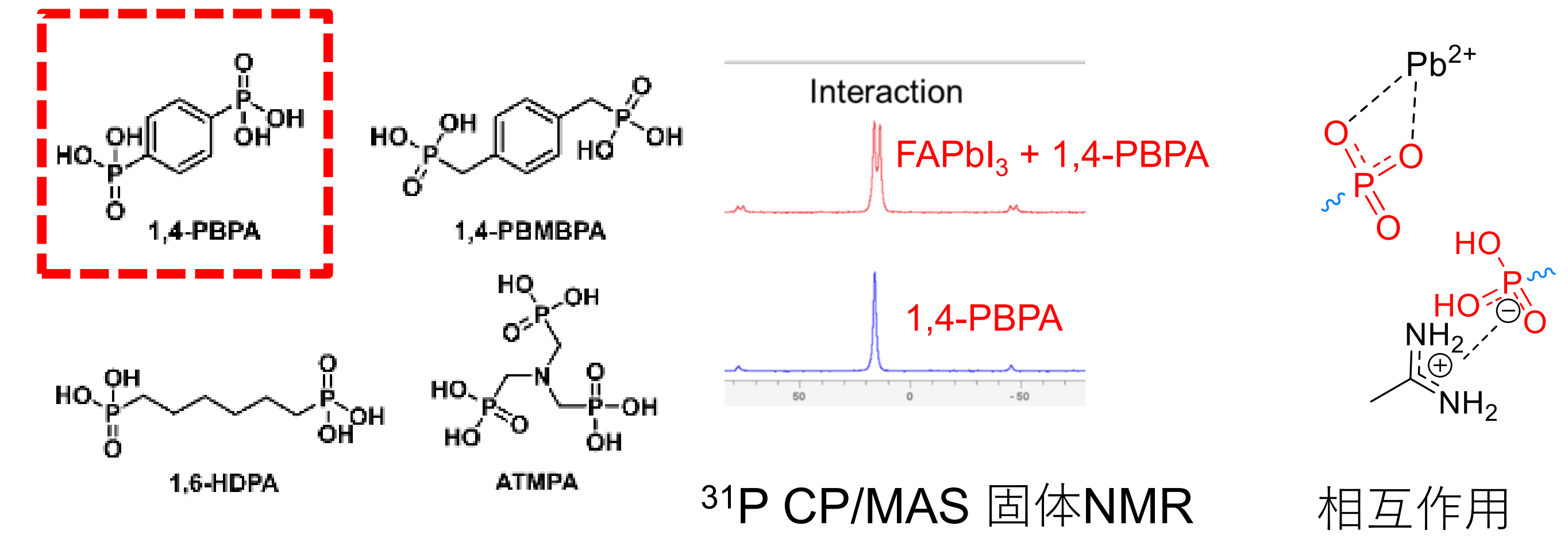


耐熱@85℃	Jsc (mA/cm ²)	Voc (V)	FF	PCE (%)
初期	25.2	1.03	0.80	20.8
>1500 h	24.8	1.00	0.73	18.2

- ホール輸送材の機能発現に必要なドーパントが耐久性低下の原因となるため高耐久化に向けて劣化要因にならないドーパントの開発を進めている
- ポリマー型ホール輸送材PTAAと新規ドーパントPEA-TFSIを組合せて耐熱性を向上
- 85℃**の耐熱性試験において**1500時間後に効率18%以上**（維持率88%）を達成した（封止なし、N₂、セル面積0.12cm²）

N. Nishimura, H. Kanda, R. Katoh, A. Kogo, T. N. Murakami, *J. Mater. Chem. A*, 2024, 12, 15631-15640

ペロブスカイト層の耐久性向上に向けた添加剤の探索



1,4-PBPA: 1,4-phenylenebis(phosphonic acid)
1,4-PBMBPA: (1,4-phenylenebis(methylene))bis(phosphonic acid)
1,6-HDPA: 1,6-hexanediphosphonic acid
ATMPA: aminotris(methylenephosphonic acid)

- ホスホン酸が鉛と強く相互作用する点に着目し効果的な分子構造を特定
- 初期変換効率、**耐湿、耐熱性を向上**（湿度95%、40℃で2300h効率低下なし、85℃で1250h後維持率70%）

S. Mathew, N. Nishimura, A. Kogo, T. Itoh, K. Yamamoto, Y. Hinuma, T. N. Murakami, *ACS Appl. Energy Mater.* 2025, 8, 8, 4962–4972

課題と今後の取組

- 耐久性の向上
 - ペロブスカイト太陽電池に対して加熱環境下での光照射における劣化が課題、各種材料がどのような条件でどのように劣化するのか、劣化メカニズムを追求する必要がある
 - 屋外環境における劣化を再現できる加速劣化試験方法の検討を進め、引き続き耐久性向上に向けた各種部材の開発を進め、耐熱、耐湿、耐光、加速劣化試験をクリアする
- 連続成膜技術開発
 - 量産可能な成膜技術により目標である小面積セル（>1cm²）で変換効率20%以上を達成する

実用化・事業化の見通し

- 自動セル作製システムは連携企業の開発に活用中
- 新規開発、探索した材料は連携企業においても検討を進めている
- 連続成膜技術に関する企業連携も進めている

連絡先：産業技術総合研究所、再生可能エネルギー研究センター、
ペロブスカイト太陽電池研究チーム 村上拓郎
MAIL：takurou-murakami@aist.go.jp

■事業の目的・目標

ペロブスカイト太陽電池は、遅い光電気応答やIV特性にヒステリシスを示すなど特異な特性を有している。その特性に応じた性能評価技術を開発し、企業等の開発品の第三者測定に供するとともに、実用サイズとなる1.2 m角以上の大面積ペロブスカイト太陽電池モジュールを高精度に性能評価する計測システムを構築する。さらにペロブスカイト太陽電池の劣化要因の特定を可能とする評価手法・試験プロトコルを開発する。開発した性能評価技術は国際整合性を検証するとともに、標準化へ向けた技術的貢献を行う。

■2024年の主な成果

ペロブスカイト太陽電池の高精度性能評価測定：

■ 太陽電池変換効率の高精度評価技術

最大電力点追従法(MPPT)による性能評価測定

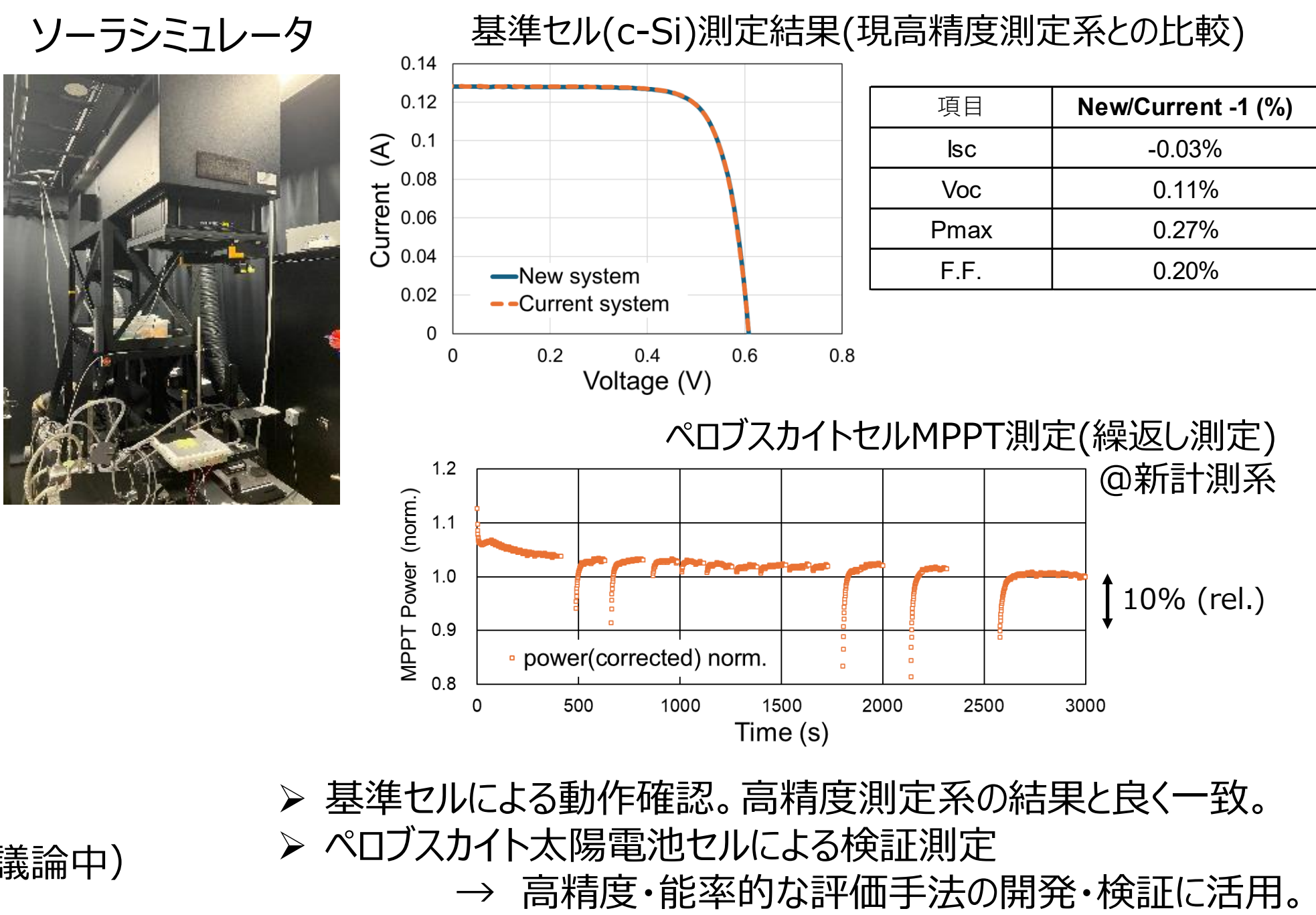
- MPPT測定系：
 - 定常光ソーラシミュレータ(AM1.5G)
 - 計測エレトロニクス：SMU（汎用品）
 - MPPT制御：Hill-Climbing法（計測プログラムは自社開発）
- STC測定(標準試験条件)
 - 照度：1 kW/m²
 - 分光放射スペクトル：AM1.5G
 - セル温度：25℃
 - ※ IEC 60904 series

ペロブスカイト太陽電池のSTC測定手順

- Step 0: 事前測定 (V_{mp} , I_{mp} 概算値の算出)
Step 1: 光照射 & MPPT制御開始（同時に温度制御）→STC条件の確認
Step 2: 出力(P_{max})、 V_{mp} , I_{mp} をモニター
出力安定性の確認（現状目安として 5 分間）
→ 安定性確認後、 P_{max} 測定
Step 3: I - V 測定(順方向、逆方向)

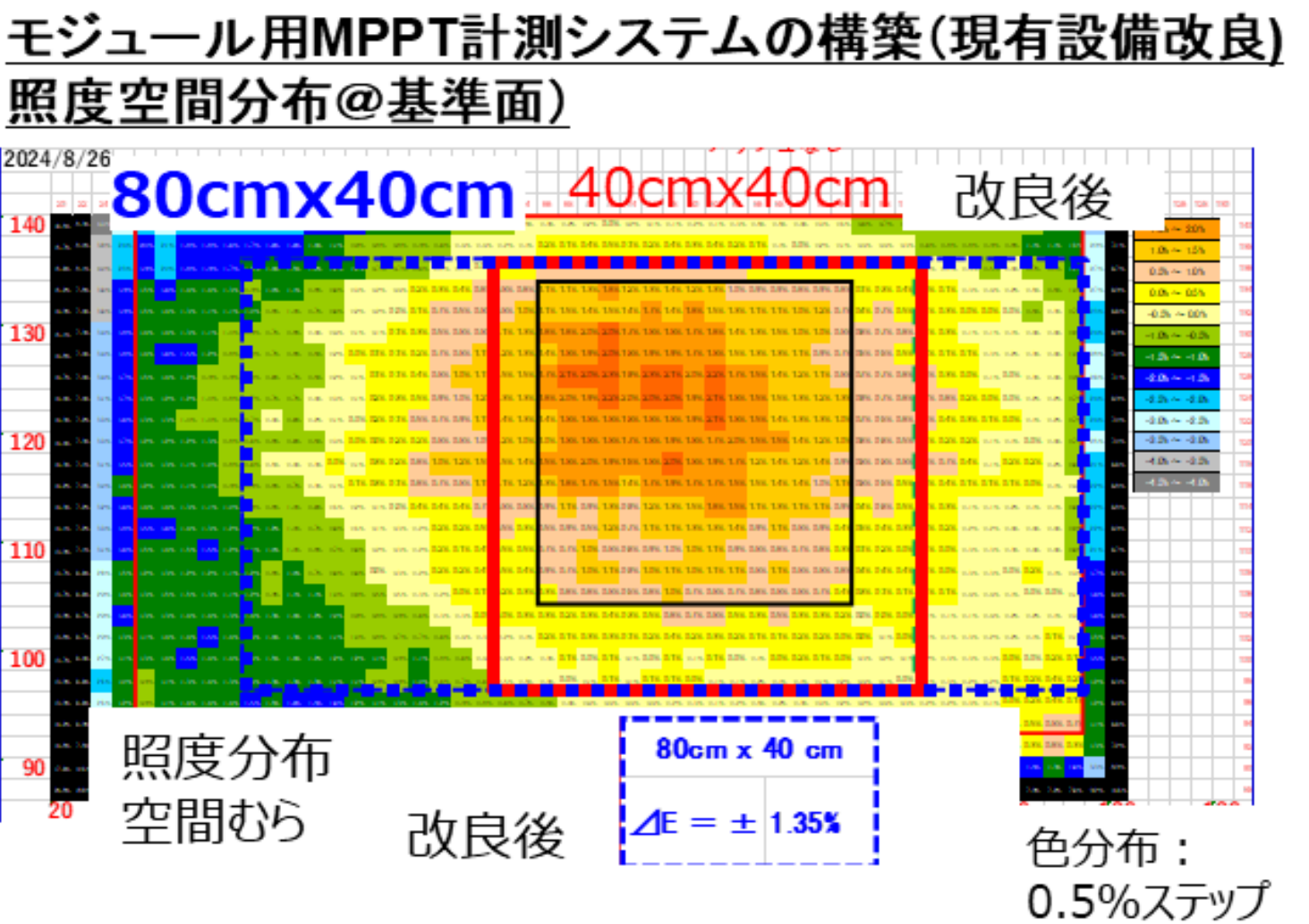
- 電流応答特性に応じた、適切なMPPTパラメータ設定が必要
- MPPT出力安定性の確認 → 単位時間における出力変化率等（数値基準は議論中）

■ 性能評価計測系(GI事業専用)を構築・動作検証



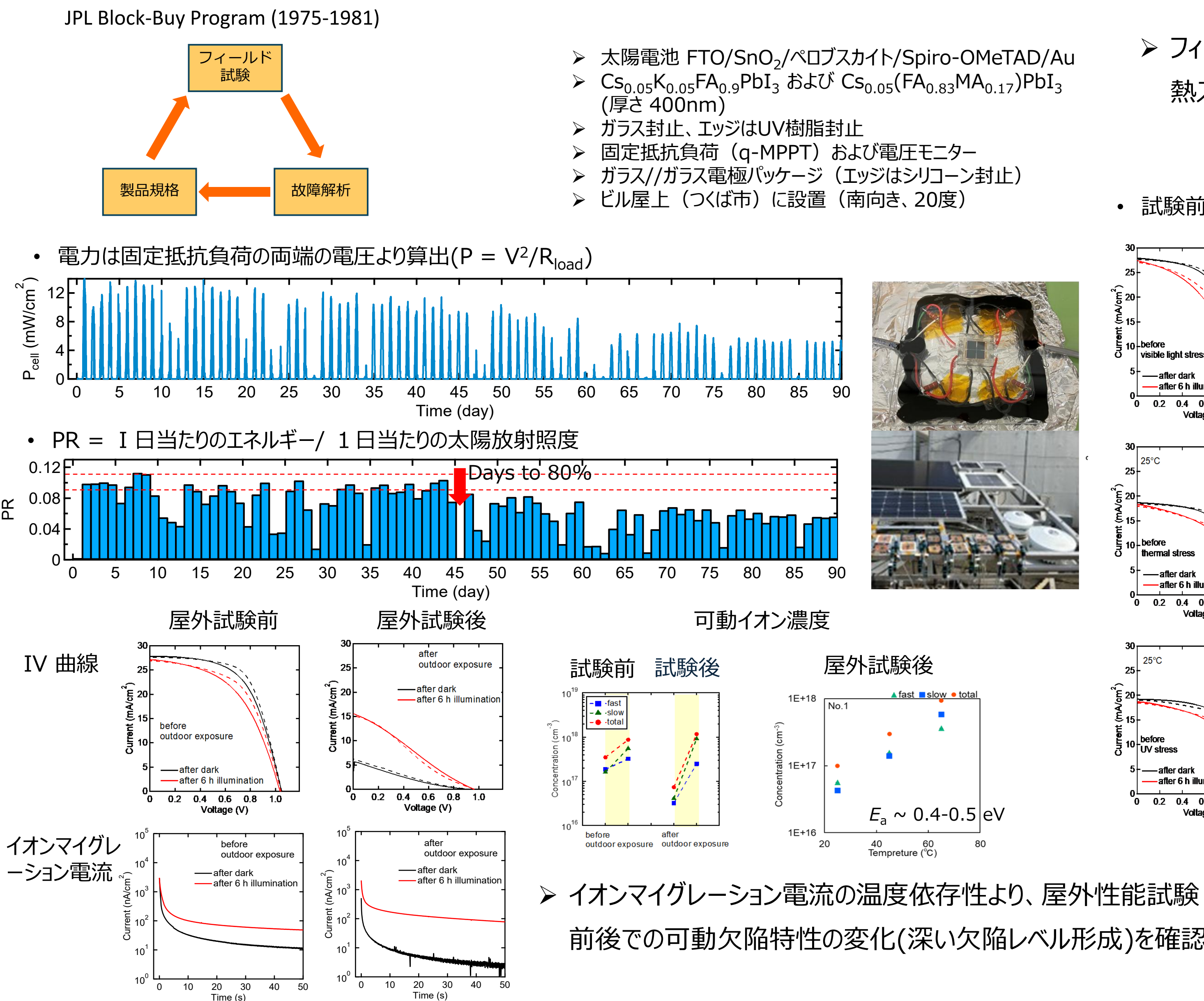
■ 大面積モジュールの性能評価技術開発

- 大面積(メートルサイズ)モジュール性能評価系の構築(構築中)
- モジュール性能評価系（現有設備）の改良
 - 有効照射エリア拡張：80cm×40cmで空間均一性クラスA
→ 高精度性能評価測定に使用

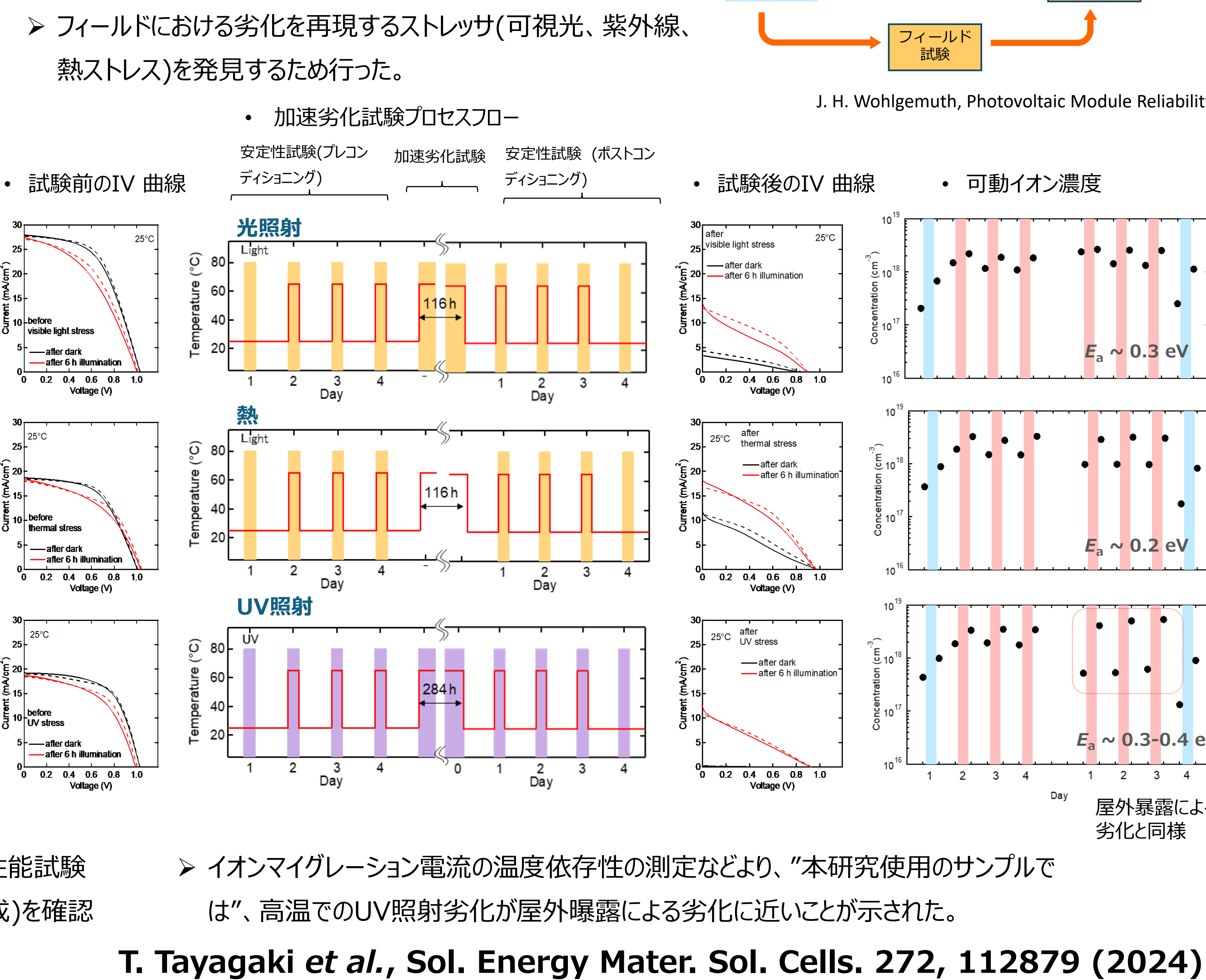


信頼性評価：屋外暴露試験・屋内加速ストレス試験

■ 屋外曝露試験

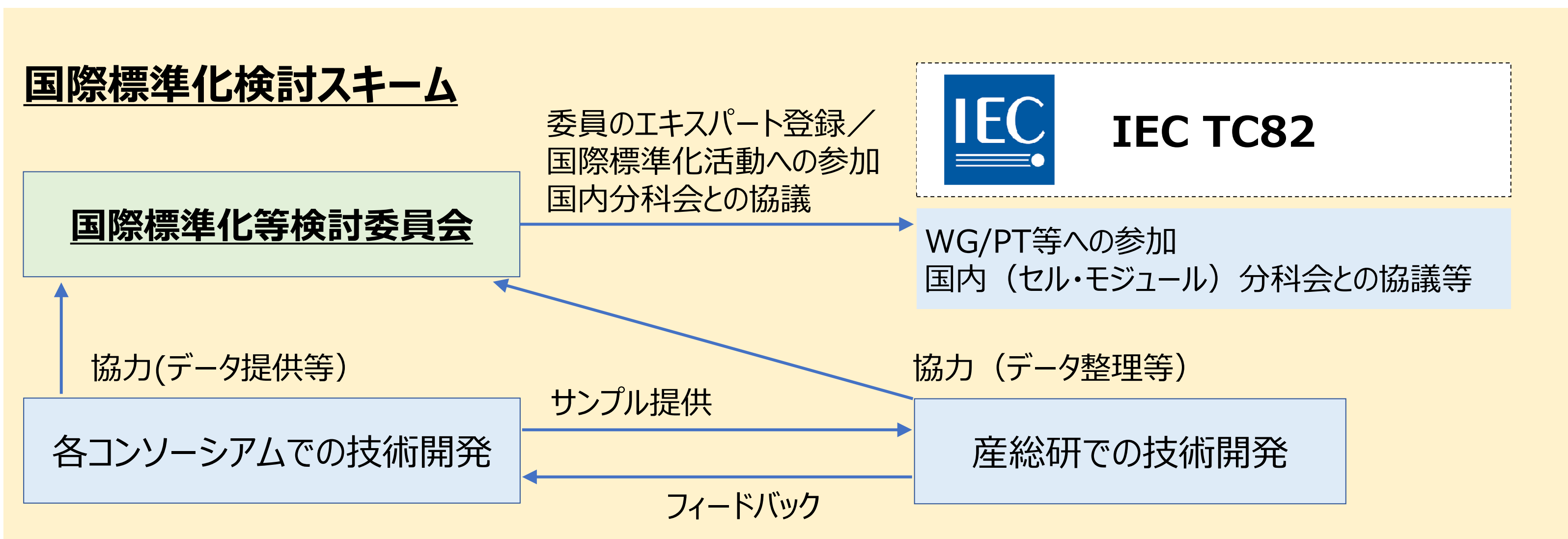


■ 屋内加速ストレス試験



国際標準化：

- ペロブスカイト太陽電池の標準化に関する検討を目的とした国際標準化等検討委員会を開催（産総研が事務局）。
- 国際標準化の動向、企業ニーズ等の調査結果を参考に意見集約し、標準化等の検討事項を整理。
- ペロブスカイト太陽電池の性能測定法(IEC TS 60904-1-4)において規格策定活動を中心に推進。



■課題と今後の取組／■実用化・事業化の見通し

- 課題と今後の取組：ペロブスカイト特有の可動イオンはペロブスカイト太陽電池の特性劣化および準安定性に影響を与えるため、それらを考慮した性能評価・信頼性評価の技術開発を行う。
- 実用化・事業化の見通し：国際標準化等検討委員会を通じて、実用化を見据えた技術開発を行う。

連絡先：産業技術総合研究所 再生可能エネルギー研究センター
太陽光評価・標準研究チーム 吉田正裕、太野垣健
MAIL：m-yoshita@aist.go.jp、_tayagaki-t@aist.go.jp