

若宮淳志 氏 京都大学教授(化学研究所) 博士(工学)



分子設計と高純度に精製された前駆体材料に基づくハロゲン化金属ペロブスカイト太陽電池に関する研究

Study of Metal Halide Perovskite Solar Cells Based on Molecular Design and Highly Purified Precursor Materials

ハロゲン化金属ペロブスカイト半導体の光吸収特性を利用して発電材料に用いた「ペロブスカイト太陽電池」が次世代型太陽電池として注目を集めている。本太陽電池は材料の溶液の塗布などの簡便なプロセスで作製可能で、フィルムを基板として用いることにより、薄型・軽量のフレキシブル太陽電池を作製できる。また、屋外だけでなく、室内光などの低照度下でも高い発電効率を示し、「どこでも電源」として様々な場所に導入可能な再生可能エネルギー源として実用化が期待されている。

若宮淳志氏は、高純度に精製された前駆体材料の開発や独自の分子設計に基づいた有機半導体材料の開発を基軸とした材料化学のアプローチにより、本太陽電池の高性能化研究に取り組んできた。高純度に精製された独自のペロブスカイト半導体前駆体材料を開発し、これを用いることで再現性良く高性能な太陽電池特性を示す半導体薄膜が作製可能になることを実証した。また、レーザー分光法を用いてペロブスカイト半導体がもつ特異な光物性と発電メカニズムを世界に先駆けて解明した。さらに、独自の分子設計指針により一連の電荷回収層材料を開発するとともに、ペロブスカイト半導体の塗布成膜過程における中間体の構造・物性解明に基づいて独自の塗布法を開発し、本太陽電池の高性能化を実現した。以下、同氏の主な研究業績を紹介する。

1. 高純度に精製した前駆体材料の開発とペロブスカイト半導体の特異な光物性の解明

本太陽電池の開発研究が始まった当初は、報告された手法と同様に塗布作製しても良好な光電変換特性を与える高品質なペロブスカイト半導体が作製できず、その再現性の悪さが世界中の研究者を悩ませていた。若宮氏は、用いる材料や溶媒の純度を徹底的に検証し、99.999% (trace metal basis) の高純度として市販されている PbI_2 でも 2000 ppm もの水が混在していることを見いだした。この結果に基づいて高純度に精製した PbI_2 を開発し、これを前駆体材料に用いることで再現性良く高性能のペロブスカイト太陽電池が作製できることを実証した。本材料は、国内試薬メーカーから市販化され、本太陽電池分野における必須の標準材料として国内外で広く利用されている。また、レーザー分光測定を用いて、これらのペロブスカイト半導体もつ特異な光物性を世界に先駆けて明らかにした。本半導体材料が、直接遷移型の光吸収特性をもち、小さな励起子束縛エネルギーに基づいて、室温では即座に電子と正孔に分かれたフリーキャリアを生成することや、高品質な結晶性のペロブスカイト半導体内では、励起状態の高い安定性に起因して、光の放出と再吸収を繰り返す現象（フォトンリサイクリング）を示すことを初めて見いだした。これらの特異な物性に基づく発電原理を明らかにした。

2. 独自の分子設計に基づく電荷回収層材料の開発

解明した発電原理に基づく、本太陽電池の高性能化には、ペロブスカイト半導体内に生じたそれぞれのフリーキャリアを選択的かつ効率的に各電極に取り出すための電荷回収層材料の開発が必要となる。若宮氏は、ペロブスカイト半導体との界面での電子構造制御の観点から、電荷回収層材料に求められる分子設計指針を提唱し、これに基づいた一連の有機半導体材料の開発によりその有用性を実証した。準平面型構造に固定化した酸素架橋トリアリールアミン骨格をアズレンに導入した p 型有機半導体材料を開発し、これを本太陽電池の電荷回収層材料に用いることで、従来材料よりも高い光電変換効率を得られることを示した。また、置換基効果と構造・物性相関についても詳細に検討し、用いる骨格の立体効果により高いアモルファス安定性を発現させることで、太陽電池の熱安定性も向上できることを示した。同氏の提唱したこれらの分子設計指針に基づいて、様々な優れた電荷回収層材料の開発研究が国内外で活発化している。

3. 中間体の構造・物性解明に基づいた塗布成膜技術の開発

本太陽電池は各材料の積層構造で構成され、その高性能化には、緻密で平坦性の高い高品質なペロブスカイト半導体薄膜の作製が重要となる。若宮氏は、ペロブスカイト半導体の前駆体溶液の塗布過程で生成する中間体の構造・物性解明に基づく独自の塗布成膜方法を開発し、緻密で平坦性の高い膜を実現し、これにより 20% を超える光電変換効率を国内において、さきがけて達成した。新たな前駆体材料として開発した $\text{MAPbI}_3 \cdot \text{DMF}$ がもつ錯体としての特長を活かして独自の大面積塗布技術を開発し、太陽電池モジュールの作製にも成功した。さらに、環境負荷の少ない太陽電池への展開を目指して、鉛フリー型の Sn ペロブスカイト太陽電池の開発研究にも精力的に取り組み、結晶核の生成と結晶成長を制御する塗布法（HAT&SVA 法）やジヒドロピラジン誘導体を還元剤に用いた Sn^{4+} 種不純物を捕捉するスカベンジャー法など、独自の成膜法の開発によりその高性能化にも成功している。

以上のように、若宮氏は、合成化学、材料化学の視点から高純度に精製された前駆体材料の開発と独自の分子設計を切り口に、再生可能エネルギー源としての新産業の開拓と創出につながる学術研究を先導してきた。本研究成果は、資源・エネルギーに関する新たな複合分野において、「材料化学」の重要性と有用性を実証した点でも大きな意義をもつものである。若宮氏の研究は国際的にも高く評価されている。よって、同氏の研究業績は日本化学会学術賞に値するものと認められた。