

## 研究紹介

### 「研究テーマ」

ナノ界面におけるキャリアダイナミクスと光エネルギー変換の分子論

### 「目的」

太陽光エネルギーの有効利用を目指し、そのカギを握る技術を“ナノ界面での光誘起素過程”の観点からとらえ、それぞれの技術で求められているナノ界面光誘起素過程の制御と最適化について理論化学・計算化学的アプローチに基づいて研究を行うことを目的とする。具体的には、エネルギー変換技術として、電気を直接取り出す太陽電池と水を光分解することで水素を化学エネルギーとして取り出すことができる光触媒を取り上げる。

### 「方法」

太陽電池、光触媒材料におけるナノ界面光誘起素過程として、太陽光による、①エキシトン（クーロン相互作用した電子-正孔対）の生成、②ナノ界面へのエキシトンの拡散、③ナノ界面あるいは欠陥での電荷分離によるキャリア（電子と正孔）の生成、④生成したキャリアの緩和、あるいは⑤キャリアの電極（太陽電池）、活性サイト（光触媒）への移動、さらに光触媒では⑥活性サイトでの酸化還元反応があげられる。これら太陽光によって生成したエキシトンの拡散速度、寿命、電荷分離確率といったエキシトン・ダイナミクス、さらには解離生成したキャリアのダイナミクスが太陽電池の光エネルギー変換効率や光触媒活性を律する重要な要因である。特に電荷分離後のキャリア再結合が変換効率を減少させる主要な原因であると考えられる。またナノ界面のバンドギャップ・エンジニアリングにより太陽光の利用可能波長、水素、酸素の酸化還元準位との相対レベル、材料の透明性、導電性等を制御できる。

本研究計画ではナノ界面における上述の光誘起素過程のうち、エキシトンの解離により生成したキャリアのダイナミクス、特に緩和過程に注目し、電子構造論・反応論に基づいた分子論的アプローチにより、光エネルギー変換の分子論を構築し、高効率光エネルギー変換に向けた新規太陽電池・光触媒材料探索の理論的指針の提案を目的とする。

太陽電池、光触媒材料に用いられる無機あるいは有機無機ハイブリッド半導体化合物に関してのキャリア緩和過程の学理的理解は非常に限られているが、分子論的観点からは（１）光生成したエキシトンあるいはキャリアの電子特性、（２）エキシトンあるいはキャリアとフォノンとの相互作用、（３）光誘起に伴う材料の構造変化、（４）欠陥の電子状態、などが課題としてあげられる。そこで初年度は化合物固有のキャリア-フォノン相互作用についての研究を実施し、順次他の課題へ展開する計画である。

### 「期待される成果」

分子系や化学反応系は、加えた熱や光を、化学エネルギー、電気エネルギー、熱に変換し得るといった特質を有し、それらエネルギー変換過程の本質的理解と設計はクリーンエネルギー創生の鍵となる。太陽光利用・光エネルギー変換過程のメカニズムを分子論的に明らかにすることにより、より高効率な分子デバイス、材料創製、新規材料探索に向けた設計指針の提案が可能となる。