

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： エネルギー変換計算科学による相界面光誘起素過程の設計

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）：

研究代表者

山下 晃一（東京大学大学院工学系研究科 教授）

主たる共同研究者

久保 貴哉（東京大学先端技術研究所 特任教授）

大北 英生（京都大学大学院工学研究科 教授）

廣瀬 靖（東京大学大学院理学系研究科 准教授）

村岡 梓（日本女子大学理学部数物科学科 講師）

辨天 宏明（奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科 准教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A 優れている

○総合評価コメント：

本課題は、太陽光エネルギーの利用拡大に向け、相界面において生ずる光誘起によるエキシトンの生成と解離、および生成したキャリアの緩和過程を、理論化学ならびに計算科学の両面から明らかにするとともに、その過程の制御と最適化を行うことにより、高機能相界面を探索かつ創出することを目標として実施された。

その中で、計算科学の主導の下に、有機薄膜太陽電池の電荷分離過程においてホットプロセスがキャリア輸送の主要経路であることを指摘し、それに基づいたアクセプターのエネルギー準位の検討から、非フラレン系の利用が可能となることを提言するといった、太陽電池の設計指針につながる新たな知見を示したことを高く評価する。また、ペロブスカイト太陽電池において、格子ゆらぎによって電子と正孔が局在化しているという動作機構の解明につながる重要な知見を計算科学の視点から指摘していることや、分子合成による理論計算結果の実証、さらにペロブスカイト太陽電池においてPbから周期表の両隣に位置する原子iへの置換などの取り組みを評価する。

今後は、さらに理論計算と実験的実証を併せて進め、計算科学による新材料の創出、高性能太陽電池の設計指針等、基礎科学および科学技術イノベーションに貢献することを期待する。