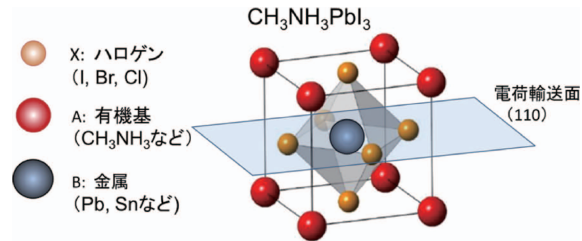




## 日本発の有機無機ペロブスカイト太陽電池

化学合成で材料を作る有機系の太陽電池として、色素増感型と有機薄膜型は太陽光エネルギー変換効率が10~12%まで向上してきた。その一方で、同じく有機合成で作る無機ハイブリッド構造のペロブスカイト結晶を光吸収に用いる太陽電池のエネルギー変換効率が急速に向上し、シリコン太陽電池に迫る16%を超える効率に届いている。CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbX<sub>3</sub> (X=ハロゲン)の組成からなるペロブスカイトは、溶液塗布と乾燥によって容易に薄膜が形成される。1990年代にわが国でCREST研究チームがそのユニークな物性と発光特性を研究した背景があり、2009年には宮坂らのグループがこれを光電変換材料として太陽電池に使った最初の研究を報告した (JACS, 131, 6050)。当時は色素増感太陽電池の増感剤に用いて酸化還元電解液を組み合わせた系であったが、2012年にはOxford大学のHenry Snaithらと共同で、有機の正孔輸送材料と組み合わせた全固体の素子として10%を



超える効率を報告した。その後、層構成に改良が加えられて高効率化の成果が続々と Nature, Science 誌に発表され、2013年には Nature と Science 誌がいずれもトピックスとして取り上げ、注目するブレイクスルー技術の1つに選んでいる。効率はこの1年半の間に7割も増加し、研究参画者も急速に増えて競争が始まっている。高効率を支える特長は強い光吸収 (集光) 能力と、1V を超える高い出力電圧である。とくに後者は注目すべきで、このハイブリッド結晶が光電子と正孔の両方を再結合なく長距離に移動できる物性をもつ特徴が可能にしており、DFT 計算によっても再結合の抑制される構造が検証されている。厚さ300nmのCH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>は800nm (1.55eV) までの可視光を全吸収しほぼ量子効率1で電子に変換する。1.55eV から1V以上の開回路電圧 (V<sub>oc</sub>) を取り出せる素子構成

は、標準の有機正孔輸送材 SpiroMeOTAD に替えてさまざまな有機と無機の材料 (ポリチオフェン、フラレーン、CuSCN 等) を電荷輸送に使う応用も可能にしている。素子作りは溶液塗布法を全層に使えるために高速で低コストの製造にもつながる。低温製膜でプラスチック基板上に作ったフレキシブル太陽電池も効率10%を超えており、ペロブスカイト結晶が単品で光吸収と電荷輸送を兼ね、高光起電力を実現する能力が、周辺素材を変えた多様な高効率セルを可能にしていると考えてよいだろう。  
(桐蔭横浜大学 教授 宮坂 力 〒225-8503 横浜市青葉区鉄町1614, E-mail: miyasaka@toin.ac.jp)  
URL: <http://www.cc.toin.ac.jp/sc/miyasaka/index.html>

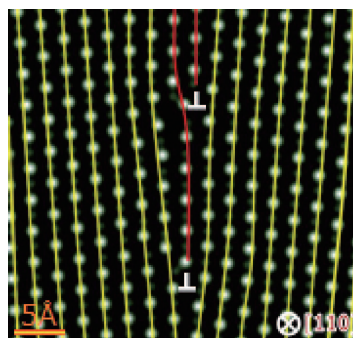
[2014年4月13日]

## セラミックス中の転位芯の原子構造設計と制御に成功

東北大学原子分子材料科学高等研究機構の幾原雄一教授 (東京大学教授, JFCC 主管研究員, 京都大学拠点教授) と王中長准教授らは、英ヨーク大学と共同で、セラミックスの結晶内部に存在する欠陥構造をあらかじめスーパーコンピューターで予測し、それと同じ原子構造を結晶界面に忠実に集積させ、これまで存在していなかったような原子レベルの超構造を創出する実験に世界に先駆けて成功した。

まず、スーパーコンピューターによる大規模な原子構造計算 (第一原理計算) によって、酸化マグネシウム中の小角粒界に形成される転位の原子安定構造や電子状態を、界面元素の組み合わせ、結晶の面方位、粒界の角度、終端原子面の極性、結晶並進対称性など、さまざまなパラメーターを変えてシミュレーションを行い、3種類の安定な転位構造を導いた。次に、最先

端の収差補正装置を搭載した超高分解能走査透過型電子顕微鏡で界面に形成される転位芯の構造を観察した。その結果、高角環状暗視野 (HAADF-STEM) 像からは、理論計算による予測と完全に一致した転位芯構造が全て観察され、設計通りの転位芯構造を人工的に合成することができたことが示された (図はその一例)。また、それぞれの転位の周りでバルクにはない



特徴的な電子状態が確認され、特異な伝導性が付与できることもわかった。

近年の超高分解能走査透過型電子顕微鏡とスーパーコンピューターの技術革新との相乗効果により、転位制御によるセラミックス材料の高性能化に関する研究の進展が期待できる。本研究は文部科学省の構造材料元素戦略拠点の支援を受けて行われた。本成果は、2014年1月30日付で英科学誌ネイチャー・コミュニケーションズ (Nature Communications) オンライン版に公開された。

Nature Communications, 5, 3239 (2014).  
(東北大学原子分子材料科学高等研究機構 准教授 王中長 連絡先: 〒980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1 E-mail: zcwang@wpi-aimr.tohoku.ac.jp)  
URL: <http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/~xikuhara/index.html>

[2014年4月17日]