

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 1 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15H03764

研究課題名(和文) ナノ界面におけるキャリア輸送と光エネルギー変換

研究課題名(英文) Carrier transport and Photoenergy conversion at nano-interfaces

研究代表者

山下 晃一 (Yamashita, Koichi)

東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授

研究者番号：40175659

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,700,000円

研究成果の概要(和文)：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“ナノ界面におけるキャリア輸送”の観点からとらえ、具体的に、光エネルギー変換技術として、電気を直接取り出す有機薄膜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水分解光触媒を取り上げ、それぞれの技術で求められているナノ界面キャリア輸送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った。有機薄膜太陽電池におけるキャリア再結合速度、水分解光触媒のキャリア緩和とキャリア拡散に関する電子論的要因を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：In order to make effective use of solar energy, the key technology of solar energy conversion is studied theoretically from the viewpoint of "carrier transport at the nano-interface". Specifically, organic thin film solar cells and water splitting photocatalysts are taken up as solar energy conversion technologies, and the control and optimization of nano-interface carrier transport required for each technology are studied based on theoretical and computational chemistry approach. The electronic factors on carrier recombination rates in organic thin film solar cells, carrier relaxation and carrier diffusion of water splitting photocatalysts are clarified.

研究分野：理論化学

キーワード：光エネルギー変換 有機薄膜太陽電池 水分解光触媒 ナノ界面キャリア輸送

## 1. 研究開始当初の背景

分子が吸着した固体表面に光を照射すると、固体中の電子-正孔励起がおり、固体から吸着分子への電子移動や、電子あるいは正孔による非熱的な化学反応が引き起こされる現象はよく知られている。これらの非断熱的過程は、表面化学反応一般、あるいは光触媒・光電気分解・光電子移動(太陽電池)などの中心的課題であり、定量的な理論計算の必要性はエネルギー問題の見地からも強く求められている。同様に界面におけるキャリア輸送は、電極分子電極ナノ接合における電子トンネル、有機発光デバイスにおける電荷注入と輸送、表面における酸化還元反応と電気化学、熱電子励起による表面光化学、有機系太陽電池、における重要な素過程であり、これらの基礎的研究は新規材料の設計とも関連して、材料工学、触媒工学、半導体工学、電子工学など先端技術の根幹をなす。しかし、従来の量子化学の手法では、これらの現象に対し定量的計算はもちろん、定性的な理解でさえも、十分に与えることはできない。

## 2. 研究の目的

本研究では「ナノ界面におけるキャリア輸送と光エネルギー変換」と題して、ナノ界面で光誘起による電子移動・キャリア(電子、正孔)輸送の定量的理論計算を目指す。計算手法として、密度汎関数多体摂動論による電子間相互作用あるいは電子-フォノン相互作用による緩和を含むキャリア動力学を考え、第一原理計算に基づく「光誘起されたナノ界面キャリア輸送の量子ダイナミクス」の手法開発を最終目的とする。

特に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「ナノ界面におけるキャリア輸送」の観点からとらえ、具体的に、光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、それぞれの技術で求められているナノ界面キャリア輸送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。

以上の研究計画が成功すれば、単なる実験結果の追認ではない予測する理論研究、特に太陽光エネルギーの化学エネルギーあるいは電気エネルギーへの変換に関する「光エネルギー変換」という最重要分野における新規材料開発、新規デバイス設計、光触媒反応制御や機能性光触媒設計への道を拓くことができる。

## 3. 研究の方法

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、エキシトン(クーロン相互作用した電子-正孔対)の生成、ナノ界面へのエキシトンの拡散、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、生成したキャリアの緩和、あるいはキャリアの電

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な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。

## 4. 研究成果

### <有機薄膜太陽電池：キャリア再結合>

有機薄膜太陽電池効率を左右する分子パラメータとその制御による高効率化について研究を進めた。まず電子ドナーであるP3ATの側鎖長と側鎖形状(Regioregularity)が効率に与える影響を解析した。P3ATの側鎖長および側鎖形状の変化が薄膜中のP3ATの主鎖構造や、P3ATと電子アクセプター(PCBM)間距離、P3ATマトリックス中のPCBMの凝集度を変化させ、その結果、電荷移動状態のエネルギーおよびキャリア再結合の反応速度定数が変化することを通して光電変換効率に変化することを見出した。対応する実験研究ではP3ATの側鎖長や側鎖の形状によりヘテロ界面における分子形状や分子集合体のモルフロジーが変化するため、キャリア再結合速度が変化することが実証されており、キャリア再結合速度の電子論的要因に注目し、ドナー分子とアクセプター分子の分子軌道の広がりによる再結合速度の定量づけを検討した。また低分子DPP誘導体ドナーの理論的解析を行い、光電変換効率の高い誘導体では光吸収と同時に電荷分離が起きる界面電荷移動型光遷移が顕著に現れていることを明らかにした。さらにDPP誘導体の種類を増やし高分子系にも応用し、界面電荷移動型光遷移が効率に与える影響の普遍性と重要性を検証した。

### <水分解光触媒：キャリア緩和>

ペロブスカイト型酸窒化物BaTaO<sub>2</sub>Nのキャ

リア拡散の改善に向け、バンド内熱緩和に注目した BaTaO<sub>2</sub>N のキャリア緩和時間計算を行った。水分解光触媒反応による水素生成のため、可視光応答性を持つ材料の実用化が求められており、BaTaO<sub>2</sub>N は価電子帯上端・伝導体下端が水の酸化還元電位を挟みながら可視光応答に適したバンドギャップを持つため注目されている。これまでの実験で犠牲試薬下での水素生成および酸素生成反応が確認されており、水全分解反応の達成には主にキャリア拡散に関する物性の改善が必要であると考えられる。そこで、ペロブスカイト型酸窒化物のアニオン原子の配列に注目し、第一原理計算に基づくキャリア緩和時間の計算によって、BaTaO<sub>2</sub>N の構造とキャリア拡散特性の関係を考察した。ペロブスカイト型酸窒化物はアニオン原子の配列によって電子状態が変化することが報告されているため、trans 型と cis 型でキャリアの緩和時間を計算し、比較検討を行った。BaTaO<sub>2</sub>N のキャリア緩和はおよそ 10~100 fs 程度のスケールで起こること、また trans 型と cis 型の結果を比較すると、特に価電子帯上端近傍でキャリアの緩和時間が大きく異なることが明らかとなった。BaTaO<sub>2</sub>N の伝導帯下端、価電子帯上端を構成する軌道はそれぞれ Ta の 5d 軌道、O および N の 2p 軌道であることから、アニオンの原子配列がキャリア拡散に影響を与えることが明らかになった。

#### <水分解光触媒：キャリア拡散>

可視光応答型の水分解光触媒として期待されている LaMg<sub>x</sub>Ta<sub>1-x</sub>O<sub>3</sub>N<sub>2-3x</sub> について、第一原理計算を用いてバンド構造の組成依存性を調べ、バンド端位置やキャリア拡散の観点から、組成と活性の相関を明らかにした。LaMg<sub>2/3</sub>Ta<sub>1/3</sub>O<sub>3</sub> と LaTaO<sub>2</sub>N の固溶体である LaMg<sub>x</sub>Ta<sub>1-x</sub>O<sub>3</sub>N<sub>2-3x</sub> は、可視光照射下での水の完全分解が報告された光触媒材料である。その活性は  $x = 1/3$  で最大となることから、組成  $x$  の増加によるポジティブな要因とネガティブな要因とのトレードオフがあることが示唆された。そこで、これらの要因を明らかにすることを目的に、第一原理計算を用いて各組成におけるバンドギャップ・キャリア有効質量・バンド端位置などの物理量を求め、それらと組成  $x$  との相関を調べた。組成  $x$  の増加にともなってバンドギャップは拡大し、 $x = 0 \sim 1/2$  (酸窒化物) と  $x = 2/3$  (酸化物) のあいだで特に大きく変化した。いずれの組成  $x$  において伝導帯は Ta の 5d 軌道、価電子帯はアニオンの 2p 軌道で構成されており、伝導帯下端位置がほぼ一定であるのに対し、価電子帯上端位置は組成  $x$  の増加 (= N の含有率の減少) にともなって低下した。また、電子のキャリア有効質量は組成  $x$  とともに単調に増加しており、正孔の有効質量も  $x > 1/6$  で単調に増加した。キャリア有効質量はバンド分散の程度を示すものであり、伝導帯においては Ta 5d 間の軌道の重なり減少、価電子帯においては O 2p と N 2p

との混成の減少がバンド分散の減少を引き起こしていると考えられる。バンド端位置の観点からは、組成  $x$  の増加が酸素生成活性の向上に寄与することが予想されるが、キャリア有効質量の観点からは、組成  $x$  の増加は不利なものであることから、中間的な組成での活性が高くなると結論した

#### 5. 主な発表論文等

##### 【雑誌論文】(計 49 件)「全て査読有り」

- [1] “The origin of slow hot-hole cooling in lead-iodide perovskite: First-principle calculations on electron-phonon carrier lifetimes”, H. Kawai, G. Giorgi, A. Marini, K. Yamashita, Nano Lett., **15**, 3103-3108 (2015)
- [2] “Theoretical Study of Surface Complexes Between TiO<sub>2</sub> and Hetero TCNQs Showing Interfacial Charge-Transfer Transitions Designed by Redox Potential”, Yuhei Shimoda, Ryota Jono, Hiroshi Segawa, Koichi Yamashita, Bull. Chem. Soc. Japan, **88**, 1410-1416 (2015)
- [3] “Correlating electronic structure and chemical durability of sulfonated poly(arylene ether sulfone)s”, Jimmy Lawrence, Koichi Yamashita, Takeo Yamaguchi, J. Powers Sources, **279**, 48-54 (2015)
- [4] “Organic-inorganic halide perovskites: an ambipolar class of materials with enhanced photovoltaic performances”, G. Giorgi, K. Yamashita, J. Mater. Chem. A, **3**, 8981-8991 (2015)
- [5] “Ab Initio Study of Internal Conversion through S1/S2 and S2/S3 Conical Intersections of 6-Acetyl-2-(N,N-dimethylamino)naphthalene”, Tomotaka Kunisada, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita, Chem. Lett., **44**, 1753-1755 (2015)
- [6] “Zero-dipole molecular organic cations in mixed organic-inorganic halide perovskites: possible chemical solution for the reported anomalous hysteresis in the current-voltage curve measurements”, G. Giorgi, K. Yamashita, Nanotechnology, **26**, 442001 (16 pages) (2015)
- [7] “Energy Alignment of Frontier Orbitals and Suppression of Charge Recombinations in P3HT/SWNT”, Katsuhiko Nishimura, Mikiya Fujii, Ryota Jono, Koichi Yamashita, J. Phys. Chem. C, **119**, 26258-26265 (2015)
- [8] “Study on the Phenomenon Reported ‘Neutron Generation at Room Temperature in a Cylinder Packed with Titanium Shavings and Pressurized Deuterium Gas (3)’”, T.

- Asami, G. Giorgi, K. Yamashita, P. Belanzoni, J. Condensed Matter Nucl. Sci. **18**, 1-12 (2015)
- [9] "Remarkable Dependence of the Final Charge Separation Efficiency on the Donor–Acceptor Interaction in Photoinduced Electron Transfer", Tomohiro Higashino, Tomoki Yamada, Masanori Yamamoto, Akihiro Furube, Nikolai V. Tkachenko, Taku Miura, Yasuhiro Kobori, Ryota Jono, Koichi Yamashita, Hiroshi Imahori, Angewandte Chemie, **55**, 629-633 (2016)
- [10] "Black phosphorus as a high-capacity and high-capability negative electrode for sodium-ion batteries: Investigation of the Electrode/Electrolyte Interface", M. Dahbi, N. Yabuuchi, M. Fukunishi, K. Kubota, K. Chihara, K. Tokiwa, X-f. Yu, H. Ushiyama, K. Yamashita, J-y. Son, Y-t. Cui, H. Oji, S. Komaba, Chem. Mater., **28**, 1625-1635 (2016)
- [11] "Zero-Dimensional Hybrid Organic–Inorganic Halide Perovskite Modeling: Insights from First Principles", Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita, J. Phys. Chem. Lett., **7**, 888-899 (2016)
- [12] "Atomic-scale analysis of the RuO<sub>2</sub>/water interface under electrochemical conditions", E. Watanabe, J. Rossmeisl, M. Bjorketun, H. Ushiyama, K. Yamashita, J. Phys. Chem. C, **120**, 8096-8103 (2016)
- [13] "Photon-absorbing charge-bridging states in organic bulk heterojunctions consisting of diketopyrrolopyrrole derivatives and PCBM", Mikiya Fujii, Woong Shin, Takuma Yasuda, Koichi Yamashita, Phys. Chem. Chem. Phys., **18**, 9514-9523 (2016)
- [14] "Dipole Analyses for Short-Circuit Current in Organic Photovoltaic Devices of Diketopyrrolopyrrole-Based Donor and PCBM", Shohei Koda, Mikiya Fujii, Shintaro Hatamiya, Koichi Yamashita, Theoret. Chem. Acc., 135, 115 (10 pages) (2016)
- [15] "The Effects of the Organic–Inorganic Interactions on the Thermal Transport Properties of CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>", Tomoyuki Hata, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita, Nano Lett., **16**, 2749-2753 (2016)
- [16] "Proton Transfer Dynamics in Protonated Benzene", Ayaka Kuroki, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita, Bull. Chem. Soc. Japan, **89**, 804-809 (2016)
- [17] "A new implementation of *ab initio* Ehrenfest dynamics using electronic configuration basis – exact formulation with molecular orbital connection and effective propagation scheme with locally quasi-diabatic representation–", Tomotaka Kunisada, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita, Int. J. Quant. Chem., **116**, 1205-1213 (2016)
- [18] "Theoretical studies on ammonia borane dehydrogenation catalyzed by iron pincer complexes", Ayaka Kuroki, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita, Computational and Theoretical Chemistry, **1090**, 214-217 (2016)
- [19] "Does Organic/Organic Interface Mimic Band Bending by Deforming Structure?", Ryota Jono, Eriko Watanabe, Mikiya Fujii, Koichi Yamashita, J. of Photochem. Photobio. A: Chemistry, **330**, 181-185 (2016)
- [20] "Structural and electronic features of small hybrid organic–inorganic halide perovskite clusters: a theoretical analysis", Giacomo Giorgi, Tomohiro Yoshihara, Koichi Yamashita, Phys. Chem. Chem. Phys., **18**, 21092 (2016)
- [21] "Thermal Effect on Morphology and Performance of Organic Photovoltaics", E. Kawashima, M. Fujii, K. Yamashita, Phys. Chem. Chem. Phys., **18**, 26456 – 26465 (2016)
- [22] "Anion Ordering in CaTaO<sub>2</sub>N: Structural Impact on the Photocatalytic Activity. Insights from First-Principles", Ayako Kubo, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita, Chem. Mater., **29**, 539-545 (2017).
- [23] "Charge Carrier Trapping at Surface Defects of Perovskite Solar Cell Absorbers: A First-Principles Study", Hiroki Uratani, Koichi Yamashita, J. Phys. Chem. Lett., **8**, 742-746 (2017)
- [24] "On the development of a classical interatomic potential for MAPbBr<sub>3</sub>", Tomoyuki Hata, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita, Claudia Caddeo, Alessandro Mattoni, J. Phys. Chem. C, **121**, 3724-3733(2017)
- [25] "Defects in crystalline PVDF: a Density Functional Theory – Density Functional Tight Binding study", Saeid Arabnejad, Koichi Yamashita, Sergei Manzhos, Phys. Chem. Chem. Phys., **19**, 7560-7567(2017)
- [26] "First-principles study of the band diagrams and Schottky-type barrier heights of aqueous Ta<sub>3</sub>N<sub>5</sub> interfaces", Eriko Watanabe, Hiroshi Ushiyama,

- Koichi Yamashita, ACS Appl. Mater. Interfaces, **9**, 9559-9566 (2017)
- [27] "Role of Quantum-Confinement in Anatase Nanosheets", Daniele Varsano, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita, Maurizia Palummo, J. Phys. Chem. Lett., **8**, 3867-3873 (2017)
- [28] "Synthesis of Quinoidal Fused Oligosiloles by Rhodium-Catalyzed Stitching Reaction and Theoretical Investigation of Their Properties", Ryo Shintani, Nana Misawa, Tomohiro Tsuda, Ryo Iino, Mikiya Fujii, Koichi Yamashita, Kyoko Nozaki, J. Am. Chem. Soc., **139**, 3861-3867 (2017)
- [29] "Charge Storage Mechanism of RuO<sub>2</sub>/Water Interfaces", Eriko Watanabe, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita, Yusuke Morikawa, Daisuke Asakura, Masashi Okubo, Atsuo Yamada, J. Phys. Chem. C, **121**, 18975-18981 (2017)
- [30] "Multiscale Simulations for Lithium-Ion Batteries: SEI Film Growth and Capacity Fading", Chikashi Shinagawa, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita, J. Electrochem. Soc., **164**, A3018-A3024 (2017)
- [31] "MgTaO<sub>2</sub>N Photocatalysts: Perovskite vs. Ilmenite Structure. A Theoretical Investigation", A. Kubo, G. Giorgi, K. Yamashita, J. Phys. Chem. C, **121** (50), 27813-27821 (2017)
- [32] "Inorganic Lattice Fluctuation Induces Charge Separation in Lead Iodide Perovskites: Theoretical Insights", Hiroki Uratani, K. Yamashita, J. Phys. Chem. C, **121**, 26648-26654 (2017)
- [33] "Hybrid Organic-Inorganic CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> Perovskite Building Blocks: Revealing Ultra-Strong Hydrogen Bonding and Mulliken Inner Complexes and Their Implication in Materials Design", A. Varadwaj, P. R. Varadwaj, K. Yamashita, J. Comp. Chem., **38**, 2802-2818 (2017)
- [34] "Do surfaces of positive electrostatic potential on different halogen derivatives in molecules attract?", A. Varadwaj, P. R. Varadwaj, K. Yamashita, J. Comp. Chem., **39**, 343-350 (2018)
- [35] "First-principles investigation of the Lewis acid-base adduct formation at the methylammonium lead iodide surface", Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita, Hiroshi Segawa, Phys. Chem. Chem. Phys., **20**, 11183 (2018)
- [36] "Revealing Factors Influencing the Fluorine-Centered Non-Covalent Interactions in Some Fluorine-substituted Molecular Complexes: Insights from First-Principles Studies", P. R. Varadwaj, A. Varadwaj, K. Yamashita, ChemPhysChem, 10.1002/cphc.201800023 (2018)
- [37] "Revealing the Chemistry between Bandgap and Binding Energy for Pb/Sn-based Trihalide Perovskite Solar Cell Semiconductors", A. Varadwaj, P. R. Varadwaj, K. Yamashita, ChemSusChem, **11**, 449-463 (2018)
- [38] "Investigations on the charge transfer mechanism at donor/acceptor interfaces in the quest for descriptors of organic solar cell performance", Azusa Muraoka, Mikiya Fujii, Kenji Mishima, Hiroki Matsunaga, Hiroaki Bente, Hideo Ohkita, Shinzaburo Ito, Koichi Yamashita, Phys. Chem. Chem. Phys., **20**, 12193 (2018)
- [39] "Influence of the aggregate state on band structure and optical properties of C<sub>60</sub> computed with different methods", Amrita Pal, Saeid Arabnejad, Koichi Yamashita, and Sergei Manzhos, J. Chem. Phys., in press (2018)
- [40] "Halogen in Materials Design: Chloroammonium Lead Triiodide Perovskite (ClNH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>) a Dynamical Bandgap Semiconductor in 3D for Photovoltaics", A. Varadwaj, P. R. Varadwaj, K. Yamashita, J. Comp. Chem., in press (2018)
- [41] "Revealing the Cooperative Chemistry of the Organic Cation in Methylammonium Lead Triiodide Perovskite Solar Cell Semiconductor System", A. Varadwaj, P. R. Varadwaj, K. Yamashita, ChemistrySelect, in press (2018)
- [42] "cis-1 Isomers of tethered bismethano [70]fullerene as electron acceptors in organic photovoltaics", Tomokazu Umeyama, Shogo Takahara, Sho Shibata, Kensho Igarashi, Tomohiro Higashino, Kenji Mishima, Koichi Yamashita, Hiroshi Imahori, RSC Advances, in press (2018)
- 他 7 報
- 【学会発表(国際会議招待講演)】(計 17 件)**
1. "Structural and Electronic Features of Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskite Clusters and Surfaces: Insights from First

- Principles”, K. Yamashita, ICCMSE (Thessaloniki, Greece, April 21-25, 2017)
2. “Theoretical study on charge carrier trapping at surface defects of perovskite solar cell absorbers”, H. Uratani and K. Yamashita, EMN 2D Materials (Lyon, France, August 8-12, 2017)
  3. “Theoretical Study on Energy Conversion Processes of Perovskite Solar Cells”, K. Yamashita, Nano and Giga Challenges in Electronics, Photonics and Renewable Energy (Tomsk State University, Russia, September 8-22, 2017)
  4. “Thermal Effect on the Morphology and Performance of Organic Photovoltaics”, E. Kawashima, M. Fujii, and K. Yamashita, EMN Summit (Chengdu, China, October 12-16, 2017)
  5. “Thermal Effect on the Morphology and Performance of Organic Photovoltaics”, E. Kawashima, M. Fujii, and K. Yamashita, IUPC International Conference on Novel Materials and Their Synthesis (NMS-XIII) (Nanjing, China, October 15-19, 2017)
  6. “Atomistic Modeling and NMR Characterization of the Sodium Diffusion in Black Phosphorus Anodes”, Saeid ARABNEJAD and Koichi Yamashita, EMN Meeting on Computation and Theory (Dubai, United Arab Emirates, November 6-10, 2017)
  7. “Charge Separation and Charge Carrier Trapping of Lead Iodide Perovskites”, K. Yamashita, Psi-k workshop (Rome, Italy, December 18-19, 2017)
  8. “Charge Separation and Charge Carrier Trapping of Lead Iodide Perovskites”, K. Yamashita, ICCMSE (Thessaloniki, Greece, March 14-18, 2018)
  9. “Structural and Electronic Features of Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskite Clusters: Insights from First Principles”, K. Yamashita, AP-HOPV17, (Yokohama, Japan, February 3-4, 2017)
  10. “Theoretical Study on Energy Conversion Processes of Perovskite Solar Cells”, K. Yamashita, IUPAC 12th International Conference on Novel Materials and their Synthesis (NMS-XII), (Changsha, China, 14-19

October, 2016)

他 7 件

**【図書】(計 5 件)**

1. 「巻頭言 数理化雑感」山下晃一、JCCJ、14(2)、A11 (2015)
2. “Physical Model for Interfacial Carrier Dynamics”, M. Fujii, R. Jono, K. Yamashita, in Solar to Chemical Energy Conversion; Theory and Application, eds. M. Sugiyama, K. Fujii, S. Nakamura, Springer, Lecture Notes in Energy 32, 67-91 (2016)
3. “Organic-Inorganic Halide Perovskite Quasi-Particle Nature Analysis via the Interplay among Classic Solid-State Concepts, Density Functional, and Many-Body Perturbation Theory”, Jacky Even, Giacomo Giorgi, Claudine Katan, Hiroki Kawai, Koichi Yamashita, Chapter 7, 221-223, in Theoretical Modeling of Organohalide Perovskites for Photovoltaic Applications (eds. G. Giorgi, K. Yamashita, , CRC Press, 2017)
4. “Theoretical Modeling of Organohalide Perovskites for Photovoltaic Applications”, ed. G. Giorgi, K. Yamashita, CRC Press (2017)
5. 「次世代の太陽電池・太陽光発電 その発電効率向上、用途と市場の可能性」(分担執筆) 川嶋英佑、幸田奨平、藤井幹也、山下晃一、(株)技術情報協会 (2018)

**【産業財産権】**

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

**【その他】**

<http://www.tcl.t.u-tokyo.ac.jp/>

**6 . 研究組織**

**(1) 研究代表者**

山下 晃一(YAMASHITA KOICHI)

東京大学・大学院工学系研究科・教授

研究者番号 : 40175659