

エネルギー散逸が光から電流への変換を助ける - 太陽光発電の効率を上げる新しい指導原理の確立 -

1. 発表者：

山田 康博（東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻 特任研究員
（研究当時）、現：大阪大学大学院理学研究科 物理学専攻 特任研究員）
山地 洋平（東京大学大学院工学系研究科附属
量子相エレクトロニクス研究センター 特任講師）
今田 正俊（東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻 教授）

2. 発表のポイント：

- ◆環境へのエネルギー散逸が太陽光発電に有効的に働くという一見逆説的な原理を、理論計算により確立しました。
- ◆本研究により確立した新しい原理は、より高効率な太陽電池を実現するための物質探索の指針として貢献することが期待されます。

3. 発表概要：

環境問題や逼迫する電力需給を踏まえ、高効率の太陽電池の開発が求められています。常識を超える性能を追求するためには、太陽光をより効率良く電流に変換する新たな指導原理が必要です。現在の主な指導原理は Shockley と Queisser が 1961 年に出した理論に基づいており、環境へのエネルギー散逸を極力減らすことが高効率変換に不可欠であると考えられてきました。

東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻の山田 康博特任研究員、同附属量子相エレクトロニクス研究センターの山地 洋平特任講師、並びに同物理工学専攻の今田 正俊教授は、この常識とは逆に、太陽光から電流への変換の際の量子力学的な光や電子の長時間の動きを理論的に解析することで、ある種のエネルギー散逸が効率改善のために役立つという直感に反する新たな原理を確立しました。

太陽光から電流への変換の基本法則は量子力学に従い、光の量子である光子によって励起された太陽電池内の高エネルギー電子を電極に取り出すことで、起電力が生じ電流が流れます。従って、高効率変換の実現のためには、光子による高エネルギー電子の励

起(光吸収)が高い確率で行われる必要があります。一方で、良く光を吸収するとその逆過程(発光)も同じ確率で生じてしまうため、励起された電子の寿命が短くなり、電極に取り出す前に発光で消えてしまいます。この励起確率と寿命の二律背反関係は、可逆的な量子力学では原理的制約です。吸収と発光が連動するため、従来「よく光る物質」の方が良い太陽電池候補と考えられてきました。山田特任研究者らの研究グループは、植物の光合成からヒントを得て、太陽光から受け取ったエネルギーに比べると少量のエネルギーを環境へ散逸させることにより、電子を「光らない暗状態」(注1)へ不可逆的に遷移させ、量子力学の制約を一時的に外すことで二律背反を避ける原理を示しました。いわば「皮を切らせて骨を断つ」手法とも言えます。この時、エネルギー散逸は電子の量子的な動きを「古典化」させるように働き、“時間の矢”を生みだします(図1)。その結果、高確率で励起された電子の長寿命化が実現されます。従来の常識に反して、実は「光らない物質」の中にこそ未来の高効率太陽電池の候補が潜んでいるのです。

本研究グループは、次世代の太陽電池セルの候補物質の一つである単層カーボンナノチューブ(注2)を例にとり、7桁以上に渡る時間スケールの変化をシミュレーション解析してこの原理を実証しました。この一見逆説的な原理の実証は、従来見過ごされていた物質群から高効率な太陽電池の候補を探索する新たな指針となると期待できます。本研究成果は、米国物理学会の速報誌「Physical Review Letters」のオンライン版(11月6日付け)に掲載されます。

4. 発表内容：

① 研究の背景

地上に遍く降り注ぐ太陽光エネルギーの有効活用は、持続可能な社会を実現する最も有望な道の一つであり、最近の環境問題や電力需給問題を受けて重要性がさらに増えています。太陽電池は太陽光エネルギーを人間が使いやすい電気エネルギーに変換する装置であり、現在主流のシリコン型太陽電池では、約25%の変換効率を実現しています。しかしながら、火力発電など既存の発電手段を置き換えるには十分とは言えず、社会で広く使われるためにはより効率的な太陽電池の開発が不可欠です。現在の太陽電池の設計指針の背景には、1961年に提出されたマクロな現象論に基づくShockley-Queisser理論があります。この理論に基づく指導原理では、環境へのエネルギー散逸は太陽光から受け取ったエネルギーを環境へ捨ててしまうことになるため、高効率のエネルギー変換を阻害する要因だと単純に考えられてきました。

一方、ミクロな動力学から太陽光発電を考察すると次の三つの素過程からなることがわかります。すなわち、(1)光の量子である光子が太陽電池内の電子を励起する光電

効果、(2) 励起された高エネルギー電子が電極方向へ移動する電荷移動、(3) 励起電子が太陽電池から電極へ取り出され電流が流れる電荷分離、の三つの過程です。従って、太陽光エネルギーから電気エネルギーへの高効率変換を達成するためには、特に(1、2)の光電効果や電荷移動の過程において、光子が太陽電池内の電子を高確率で励起し、かつ、生じた励起電子が長寿命を持つ必要があります。しかしながら、光電効果は量子力学的な効果であるので、高確率で光子が励起電子を生成する場合は、その逆過程(励起電子から光子へのエネルギー変換)も同じ確率で生じてしまいます。これを量子力学の時間反転対称性と呼びます。その結果、高エネルギー電子を高確率で励起できることと励起された電子を長寿命に保つことは両立できない二律背反関係として現れます。仮に環境への散逸がない場合でも、電荷分離に要する時間の中に、この二律背反のために励起された電子が失われる効果などで、エネルギー変換効率はある上限以下になるというのが Shockley-Queisser 理論の示す指導原理でした。

② 成果の内容

本研究グループは、Shockley-Queisser 理論においては単なる阻害要因であったエネルギー散逸が、この二律背反関係を解消し高効率の太陽電池作成のためにむしろ有用になるという逆説的な原理を、ミクロな量子力学的運動方程式に基づき理論的に示しました。事実、植物の光合成は太陽光発電と同様に上記三つの素過程、すなわち光電効果、電荷移動、電荷分離を含みますが、エネルギー散逸を有効的に活用し逆過程が生じないように調整しているという報告があります。

この原理の理論的検証には、時間スケールの大きく異なる複数の量子現象を同時にシミュレートする手法が必要になります。本研究グループは、ミクロな量子力学的運動方程式を7桁以上の時間スケールに渡って解く手法を新たに開発し、励起電子の寿命解析に用いました。この手法を次世代の太陽電池の候補物質である単層カーボンナノチューブ(注2)に適用した結果、エネルギー散逸が電子の動きを量子的なものから古典的なものへと質的に変化させる働きにより、“時間の矢”を生みだして長寿命化を達成していることを定量的な評価も含めて実証しました(図1)。より具体的には、電子がエネルギー散逸を伴い不可逆的に暗状態に遷移することで、時間反転対称性を破り、高確率励起された電子の桁違いの長寿命化を達成しています(図2)。

③ 今後の展望

単層カーボンナノチューブにおいて時間分解光ルミネッセンス実験(注3)を行うと、光ルミネッセンスが急速に減少し量子収率(注4)も低いため、従来の原理からは、太陽電池に適さない物質と考えられていました。しかし、一見して見込みのないこれらの特徴は、まさに今回の主題であるエネルギー散逸によって励起電子が長寿命化したとき

に生じる現象です。理論的なシミュレーション結果は実験結果を矛盾なく理解することを可能にただけでなく、不利と考えられてきた性質がむしろ高効率の鍵になることを示しました。また、エネルギー散逸による電子の長寿命化の原理は、カーボンナノチューブだけでなく、より一般的な物質に対しても適用できます。従って、この一見常識に反する原理の確立は、従来見過ごされていた物質群に光をあて、より高効率な太陽電池を作成するための新たな指針となると期待できます。

本研究は、文部科学省の科研費補助金 (No. 22104010, No. 22340090)、新学術領域「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」、HPCI システム利用研究課題 (課題番号： hp130007, hp140215) および 計算物質科学イニシアティブ (CMSI) の助成を受け行われました。

5. 発表雑誌：

雑誌名：「Physical Review Letters」

URL：<http://journals.aps.org/prl/>

(オンライン版：11月6日(金))

論文タイトル：Exciton Lifetime Paradoxically Enhanced by Dissipation and Decoherence: Toward Efficient Energy Conversion of a Solar Cell

著者：Yasuhiro Yamada*, Youhei Yamaji*, and Masatoshi Imada*

6. 問い合わせ先：

大阪大学大学院 理学研究科 物理学専攻

特任研究員 山田 康博 (やまだ やすひろ)：

東京大学大学院 工学系研究科附属 量子相エレクトロニクス研究センター

特任講師 山地 洋平 (やまじ ようへい)：

東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻

教授 今田 正俊 (いまだ まさとし)

<報道担当>

東京大学 大学院工学系研究科 広報室

〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1

7. 用語解説：

(注1) **暗状態**：光と直接反応しない電子の状態。太陽光から電流への変換では、通常、光と直接反応する電子の状態（明状態）のみが注目される。本研究では、光とは直接は反応しない状態もエネルギー散逸が生じる変換を考える際には重要な役割を果たすことを数値的に明瞭に示した。

(注2) **単層カーボンナノチューブ**：炭素一層でできたグラフェンを円筒状に丸めた物質。丸め方により性質が変わる。従来は複数の種類のカーボンナノチューブの混合物しか大量生成できなかったが、近年単離生成が可能になり、太陽電池を含め様々な応用が検討されている。

(注3) **時間分解光ルミネッセンス実験**：物質に光をあて電子を励起した後、その励起電子が逆過程で基底状態に戻るときに放出する光子を光検出器で時々刻々と観測する実験手法。物質内部の明状態の電子（注1を参照）の時間変化の情報が得られる。

(注4) **量子収率**：光ルミネッセンス実験において、1個の光子により励起された電子が、逆過程で放出する光子数。通常1以下である。

8. 添付資料：



図 1：太陽光で励起されたカーボンナノチューブ上の電子の寿命がエネルギー散逸により伸びる原理の模式図

光を発して消滅しやすい明状態から、光を発せずに長寿命でいられる暗状態への不可逆な遷移が少量のエネルギー散逸という犠牲で実現できるようになります。

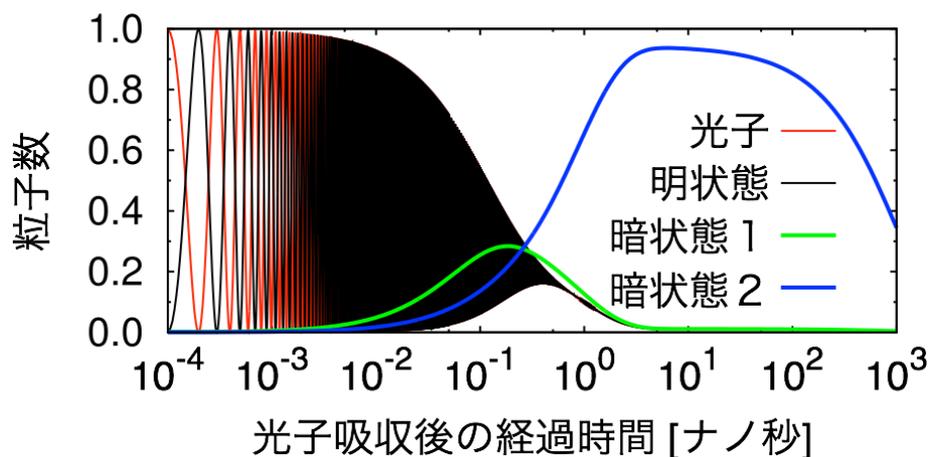


図 2：単層カーボンナノチューブにおける粒子数変化

単層カーボンナノチューブ内に光子が吸収された後の 1 ピコ秒以下の比較的短い間に、光子数と明状態（注 1 文中）の電子数が時間的に逆位相で激しく振動し、0 と 1 の間を行き来しています。これは、本文中で述べた時間反転対象な量子力学に典型的な運動であり、光子が明状態の電子を励起した後、その逆過程が生じて明状態の電子から光子が放出される現象を示しています。1 ピコ秒を過ぎると、徐々に暗状態の電子の数が増えてきます。このとき、環境へのエネルギー散逸が同時に生じているため時間の矢が生まれ、全系の電子の動きは古典化し、初期に見られていた量子力学特有の振動は徐々に消えていきます。今の場合、二つの異なる暗状態が存在しますが、暗状態 2 の方がよりエネルギー的に安定のため、約 250 ピコ秒を境にしてこの状態に遷移していきます。古典化に伴い、暗状態 2 の電子は 1 マイクロ秒程度の長い寿命を獲得します。