

新しいハイブリッド化合物の探索的研究

材料工学およびその関連分野

研究者所属・職名 :
電子・光機能材料研究センター・主任研究員

ふりがな さいとう のりこ

氏名 : 齋藤 紀子

主な採択課題 :

- [基盤研究\(C\)「結晶構造の対称性に着目した有機-無機ハイブリッドハライド結晶の合成と機能探索」\(2021-2023\)](#)

分野 : 無機材料・物性、応用物性

キーワード : ハライド、分子イオン、結晶構造解析

課題

●なぜこの研究をおこなったのか？(研究の背景・目的)

太陽電池材料として、高い特性を発揮するペロブスカイト型ハライドに注目が集まっている。これまでの一般的な太陽電池材料と異なり、その結晶が、無機イオンと分子イオンとを含む、有機・無機それぞれの構成要素を含むハイブリッド型の結晶構造となる物質である。そうしたハイブリッド化合物では、これまでの無機結晶では実現できなかった新しい物性・特性が発現する可能性がある。そこで、新しい結晶構造、新しい化合物を探索し、新規機能を開拓することを目指した。

●研究するにあたっての苦労や工夫(研究の手法)

ハライドは吸湿性、潮解性などを呈することもあり、また、イオンの価数を制御する必要もあるため、結晶成長中のイオンの価数制御に注意を払った。

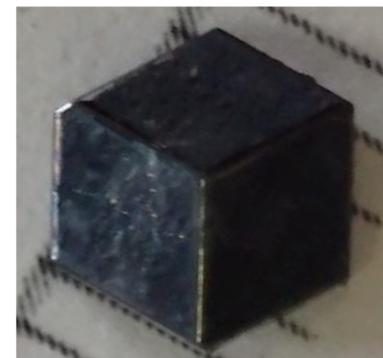


図1 ハイブリッド化合物単結晶の例
DOI:10.1021/acs.jpcclett.9b02750

新しいハイブリッド化合物の探索的研究

材料工学およびその関連分野

研究成果

●どんな成果がでたか？どんな発見があったか？

液相からの結晶成長を行い単結晶を合成し、その結晶構造解析を進めた。そうした研究の過程で、新しい結晶構造、新しい化合物を見出した。

特に、溶液から低温で結晶成長を行うため、溶媒分子が結晶中に取り込まれる現象が起こったことで、新しい結晶構造が見出されるなど、当初の想定にはない、新物質の発見もあった。

実験的検討と併せて実施した第一原理計算による結晶構造やその安定性の検討も進めた。実験的アプローチでは詳細が捉えにくい水素原子の結晶中での配置を第一原理計算の援用によって明らかにするなど、実験と計算の融合によっても、成果が得られた。

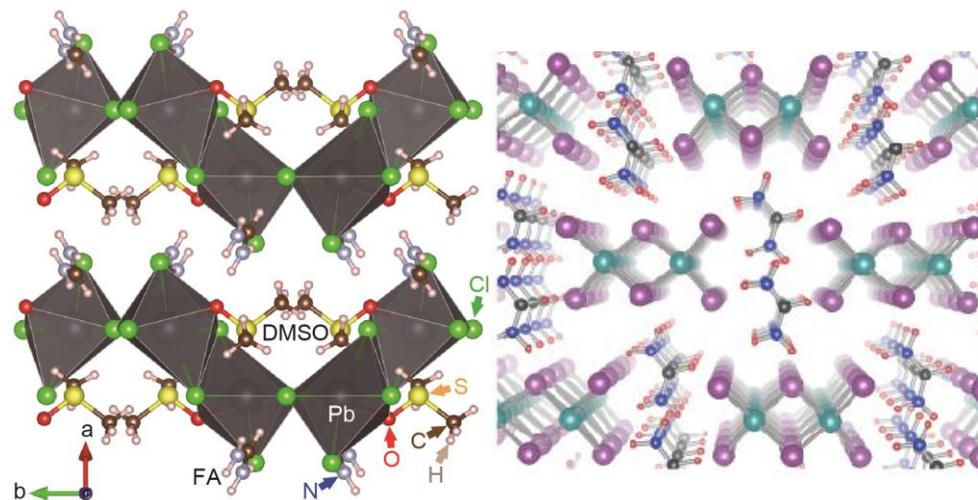


図2 新しく得られたハイブリッド結晶の結晶構造解析結果

参照 : DOI: 10.1016/j.jssc.2021.122778

DOI: 10.1039/d2ce00889k

今後の展望

●今後の展望・期待される効果

これまでの検討で、純然たる無機結晶と、ハイブリッド結晶との結晶化学的な差異などが、見えてきつつある。それらの知見を元に、さらに、結晶構造の対称性制御のための物質設計・材料合成手段を開発・改良することで、無機結晶のみでは実現できない新しい物性を発現する物質が得られることを期待して研究を進めている。