

ヨウ化銅へのカルコゲン元素ドーピングの影響

Effect of Chalcogen Doping in Copper Iodide

東工大¹, NIMS², ○(D)小安智士¹, 山口晃¹ 梅澤直人², 宮内雅浩¹

Tokyo Tech.¹, NIMS², ○Satoshi Koyasu¹, Akira Yamaguchi¹, Naoto Umezawa², Masahiro Miyauchi¹

E-mail: koyasu.s.aa@m.titech.ac.jp

【背景】

ヨウ化銅 (γ -CuI) は約 3eV のバンドギャップを持つために可視光の吸収が無く、透明な半導体であることが知られている。ヨウ化銅は p 型半導体であるために固体色素増感太陽電池の正孔輸送層として用いられてきた。近年急速にエネルギー変換効率の向上を達成しているペロブスカイト太陽電池においても正孔輸送層としてヨウ化銅を使用している研究がある。ドーピングによってヨウ化銅の抵抗値を下げる事が出来ればより太陽電池の性能は向上すると考えられる。本研究では密度汎関数法を用いた第一原理計算によってヨウ化銅にカルコゲン元素をドーピングした時のキャリア密度・フェルミ準位の変化を調べた。

【手法】

第一原理計算のソフトとして VASP を使用した。汎関数は PBE 汎関数と PBE0 汎関数の 2 種類で検討した。欠陥モデルとして 64 原子のスーパーセルに 1 つ欠陥を導入したモデルを作製した。今回作製した欠陥モデルは銅空孔 (V_{Cu})、格子間銅 (Cu_i)、ヨウ素空孔 (V_I)、格子間ヨウ素 (i_I)、ヨウ素位置カルコゲン (S_I, Se_I, Te_I) これらの欠陥モデルの全エネルギーを荷電状態毎に求め、完全結晶の全エネルギーおよび単体の銅とヨウ素の全エネルギーとの差から欠陥生成エネルギーを計算した。欠陥生成エネルギーから欠陥濃度のフェルミ準位依存性を求め、電荷中性条件からフェルミ準位を決定した。

【結果】

PBE 汎関数を用いた場合ではバンドギャップが 1.2 eV に過小評価されてしまい、欠陥の生成エネルギーを正しく見積もることが出来なかった。一方で PBE0 汎関数を用いた場合はバンドギャップが実験値と近い値を示すので、欠陥の生成エネルギーをより正確に求めることが出来ると期待される。Fig 1 はヨウ化銅のフェルミ準位のヨウ素の化学ポテンシャル依存性を示したものである。この結果からヨウ素の化学ポテンシャルが小さいとき (Cu rich のとき) ではカルコゲン元素、特に硫黄をドーピングした時にフェルミ準位が下がることが明らかになった。

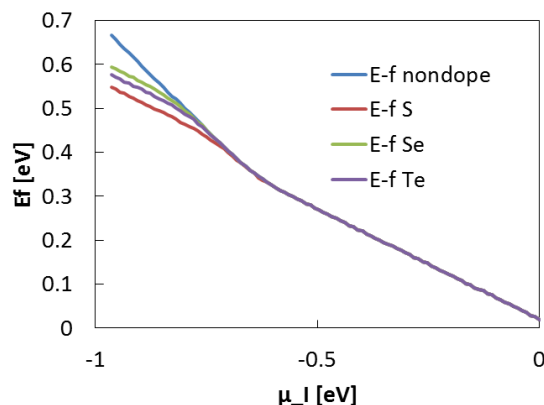


Fig 1. Fermi level dependence of chemical potential of Iodine, μ_I is reference to its elemental phase of I_2 .