

Cs-X-I 三元化合物の探索

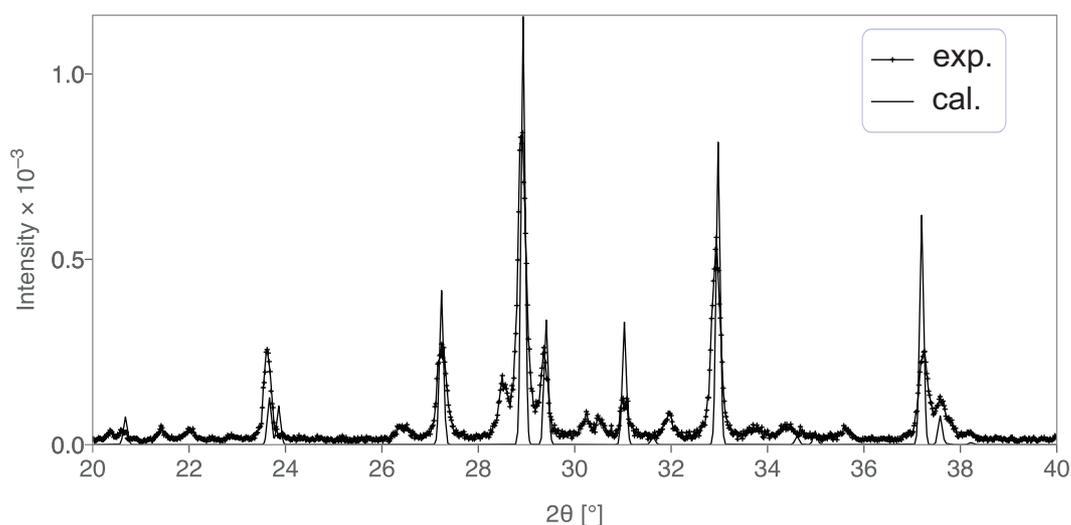
Search for ternary compound in Cs-X-I system

九工大生命体, °飯久保 智、(B)山崎 純、(M2)山本 久美子、尾込 裕平、早瀬 修二

KIT, °Satoshi Iikubo, Jun Yamasaki, Kumiko Yamamoto, Yuhei Ogomi, and Shuzi Hayase

E-mail: iikubo@life.kyutech.ac.jp

有機無機ペロブスカイト化合物を用いた太陽電池は、プリンタブルで製造できる低コストの次世代太陽電池として注目を集めており、本研究グループでは毒性のある Pb の置換と、結晶構造の安定性を向上させることを目的に、計算科学的手法を用いた物質探索を行っている。前回ペロブスカイトを構成する CH_3NH_3 、Pb を Cs と Sn に置き換えた、Cs-Sn-I 三元系をとりあげて物質探索を行った結果を報告した。CsI-SnI₂ 上に 2 つの安定構造が見出され、一つ目の CsSnI₃ はペロブスカイト構造に酷似、もう一つの CsSn₂I₅ は新規相として観測される可能性があることを指摘した。そこで今回、CsSn₂I₅ について計算と合成実験の両面から詳しく調べた。また同様の手法を Cs-X-I (X=Ga, In, Ge, Bi) に拡張して探索範囲を広げた。安定構造の探索には進化的アルゴリズム USPEX¹⁾、生成エネルギーの評価には第一原理計算コード VASP を用いた。原料の CsI、SnI₂ を 1:2 の比で混合し、固相反応法で合成を試みた結果、図に示す XRD パターンを示す化合物が合成された。これは Pearson's Crystal data にある Cs-I、Sn-I、Cs-Sn の二元化合物、さらには Cs-Sn-I の三元化合物のどのパターンとも一致せず、新規相 CsSn₂I₅ のものと一致する結果を得た。講演ではこの系の実験、並びに計算から求められる基礎物性について報告する。

Figure 1. Experimental and calculated XRD pattern of CsSn₂I₅

[1] A.R. Oganov, C.W.Glass. J. Chem. Phys. 124 (2006) 244704.