

マテリアルズインフォマティクスに基づく ペロブスカイト太陽電池材料の大規模探索

Materials Informatics Study on Great Scale Novel Material Search for
Perovskite Solar Cells



首都大院理工 ^{○(DC)}菅野 翔平, 今村 穰, 波田 雅彦

Tokyo Metropolitan Univ., ^{○(DC)}Shohei Kanno, Yutaka Imamura, Masahiko Hada

E-mail: kanno-shouhei[at]ed.tmu.ac.jp ‘at’ = @

1. はじめに

$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ を用いたペロブスカイト太陽電池の光電変換効率は、20%以上に急上昇している。¹更に近年では、鉛含有ペロブスカイトの毒性の改善を目指し、 $\text{AA}'\text{BB}'\text{X}_3\text{X}'_3$ 型の組成をもつダブルペロブスカイトが実験により検討されている。²この新規ダブルペロブスカイトの探索を加速するために、計算化学による材料スクリーニングも行われている。³しかし、ダブルペロブスカイトの組成は多岐にわたるため、考えられるすべての組成を第一原理計算で検討することは計算コスト的に不可能である。本研究では、マテリアルズインフォマティクスに基づく大規模・高効率な材料探索スキームを開発・実行し、2800万種類以上の $\text{AA}'\text{BB}'\text{X}_3\text{X}'_3$ 型の組成から太陽電池材料として有望なダブルペロブスカイトを発見した。

2. 方法

本研究で用いた材料探索スキームを図1に示す。 $\text{AA}'\text{BB}'\text{X}_3\text{X}'_3$ ダブルペロブスカイトの材料イオンとして、A, A'カチオンには18種の1~3族の金属イオンや有機カチオンを、B, B'カチオンには85種の遷移金属イオンなどを、X, X'アニオンには9種のカルコゲンやハロゲンを用いて28,125,225通りの組成を生成した。材料探索の第一段階では、構成イオンのイオン半径や価電子数などの普遍的な情報から材料の形成可能性を考慮した。第二段階では、機械学習によってバンドギャップを予測し、太陽電池に適した1.4 eV程度のバンドギャップをもつと予想される化合物を選別した。機械学習モデルにはサポートベクトルマシンを採用した。第三段階では毒性と価格を考慮した。毒性の評価にはQ3Dガイドラインを、価格の予想にはChemicoolデータベースを用いた。^{4,5}ここまでの選別で得られた化合物について第一原理計算によって高精度に検討し、太陽電池材料として優れたものを有望なペロブスカイトとして選出する。

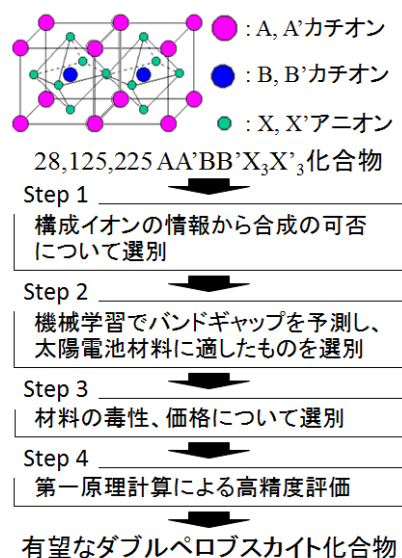


図1 ダブルペロブスカイト化合物の材料探索スキーム

3. 結果

本材料探索スキームによって得られたダブルペロブスカイトは、A, A'カチオンに1, 2族金属イオンや有機カチオンを、B, B'カチオンにはSnやCuを、X, X'アニオンにはハロゲンを用いたものが主だった。これらのペロブスカイトは低毒性・安価な上、その多くは本研究によって発見された新規材料である。一方、得られたペロブスカイトには $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ などのすでにペロブスカイト太陽電池で使用されている代替材料も含まれており、本材料探索スキームが有効であることを示唆している。

本材料探索スキームは数千万から数億の材料探索を高効率に実行でき、太陽電池材料のみならずワイドギャップ半導体などの新規材料探索にも簡便に適用可能である。本研究は、計算化学による過去最大規模の新規材料探索のモデルケースとなる。

[1] <https://www.nrel.gov/pv/assets/images/efficiency-chart.png>. [2] A. H. Slavney *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, 138, 2138. [3] T. Nakajima and K. Sawada, *J. Phys. Chem. Lett.*, **2017**, 8, 4826. [4] 独立行政法人医薬品医療機器総合機構 [5] <https://www.chemicool.com/>