

ペロブスカイト/酸化物界面における元素置換効果

Effect of substitution element at the perovskite / oxide interface

九工大生命体 ○(M1)山崎 純, 山本 久美子, 飯久保 智, 田中 一成, 早瀬 修二

Kyushu Inst. Tech. ○J. Yamasaki, K. Yamamoto, S. Iikubo, K. Tanaka, and S. Hayase

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

ペロブスカイト型太陽電池である MAPbI_3 ($\text{MA}=\text{CH}_3\text{NH}_3$) は、高効率・低コスト・プリンタブルの利点から Si 太陽電池に変わるものとして注目を集めている。現在、実用性を考慮し有毒元素の Pb を Sn などに置き換える研究が盛んに進められているが、 MASnI_3 では変換効率が低いと報告されている。この原因としては、ペロブスカイト/ TiO_2 界面で形成される電荷再結合トラップの存在が実験的に示唆されている。また無機ペロブスカイト CsSnI_3 も光吸収係数が高く、太陽電池としての利用が検討されている^[2]。これらのペロブスカイトを光吸収層に使用した場合には、酸化物(TiO_2 , Al_2O_3 , Y_2O_3 など)層との界面において予想される格子欠陥の理解が、光電変換効率の向上のために重要となる。そこで本研究では、酸化物に含まれる複数の元素をペロブスカイトに置換させた構造モデルについて、第一原理計算による電子状態の解明を試みた。

計算にはペロブスカイト構造 ABX_3 の $2 \times 2 \times 2$ の supercell を用いた。このうち A-site、または B-site の原子を Ti、Al、Y に、X-site の I 原子を O に置き換えた。Fig.1 には例として A-site の Cs を Y に置換した構造モデルを示す。これらの構造について、第一原理計算コード VASP を用いて生成エネルギーを求め、構造の安定性を評価した。算出された各構造の生成エネルギーを Fig.2 に示す。 CsSnI_3 の生成エネルギーを基準に比較すると、B-site に Y を置換した構造の生成エネルギーは 0.055 eV 低く、また X-site に O を置換した構造は 0.007 eV 低いことがわかった。その他の構造は、 CsSnI_3 よりも高い生成エネルギーを示した。この結果から Y_2O_3 を酸化物層に使用した場合、 CsSnI_3 に Y_2O_3 が Y^{3+} や O^{2-} として混入する可能性が考えられる。実際に CsSnI_3 と複数の酸化物 (TiO_2 , Al_2O_3 , Y_2O_3) との混合物において物性変化が実験的に観測されていることから、それとの詳細な比較を行う。

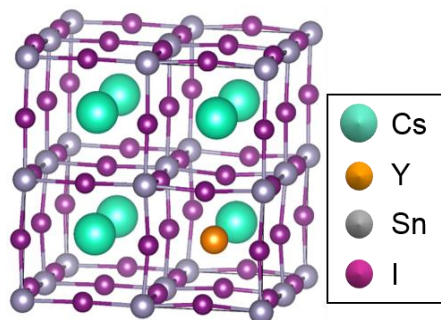


Fig1. Structure model of $\text{Cs}_7\text{YSn}_8\text{I}_{24}$ after structural relaxation

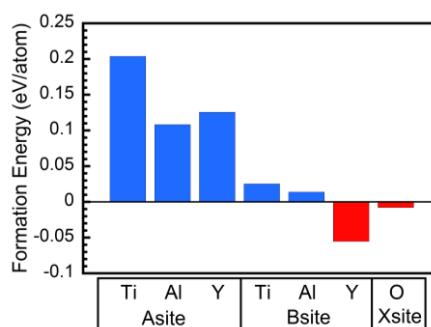


Fig2. Formation energy of CsSnI_3 with several impurities.

【参考文献】

- [1] K.Shum et al. Appl. Phys. Lett 2010, 96, 221903
- [2] M.H.Kumar et al. Adv. Mater. 2014, 26, 7122-7127