

マテリアルズインフォマティクスに基づく材料探索スキームの提案： 鉛フリーペロブスカイト太陽電池材料の探索に向けて

Materials Search Scheme based on Materials Informatics:

Application to Lead-free Perovskite Solar Cell Materials

首都大院理工, °(D)菅野 翔平, 今村 穰, 波田 雅彦

Tokyo Metropolitan Univ., °Shohei Kanno, Yutaka Imamura, Masahiko Hada

E-mail: kanno-shouhei@ed.tmu.ac.jp

1. はじめに

ハロゲン化鉛ペロブスカイトを用いたペロブスカイト太陽電池は、高い光電変換効率を示すため、次世代太陽電池として期待されている。¹近年では、鉛含有ペロブスカイトの毒性を改善するために、 $AA'BB'X_3X'_3$ 組成をもつ鉛フリーペロブスカイトが検討されている。²しかし、 $AA'BB'X_3X'_3$ 型の組成は多岐にわたるため、考え得るすべての組成を検討することは困難である。

本研究では、鉛フリーペロブスカイト開発の加速に向けて、第一原理計算や機械学習、種々のデータベースを組み合わせた材料探索スキームを提案した。この材料探索スキームを実行することで、2800 万種類の $AA'BB'X_3X'_3$ 組成を高速に選別し、太陽電池材料として有望な 19 種類の新規鉛フリーペロブスカイトの発見に成功した。

2. 方法

本研究で提案した材料探索スキームを Fig. 1 に示す。 $AA'BB'X_3X'_3$ 組成の材料イオンとして、A と A'には 18 種の金属イオンや有機カチオンを、B と B'には 85 種の遷移金属イオンなどを、X と X'には 9 種のカルコゲンやハロゲンを用いて 28,125,225 種類の組成を生成した。選別の第一段階では、イオン半径や価電子数など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、太陽電池に適した組成を選出した。第三段階では、種々のデータベースから毒性与価格を評価した。最後に、第一原理計算によって熱化学的安定性やキャリア物性、吸光度などを検討し、有望な 24 種類の化合物を得た。

3. 結果

得られた 24 種類の化合物の内 5 種類は、ペロブスカイト太陽電池の代替材料としてすでに実験で検討されていた。この既知の材料の再発見は、本方法の有効性を示唆する。一方、19 種類は本研究で新発見された化合物である。19 種類の内 17 種類は、既知のハロゲン化スズペロブスカイトと類似の組成をもつ。他方の 2 種類はこれまで論文などで提案されてない無機材料の硫化物ペロブスカイトとハロゲン化銅ペロブスカイトであり、新たな材料開発の方向性を提案できた。

[1] <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>. [2] A. H. Slavney et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, 138, 2138.

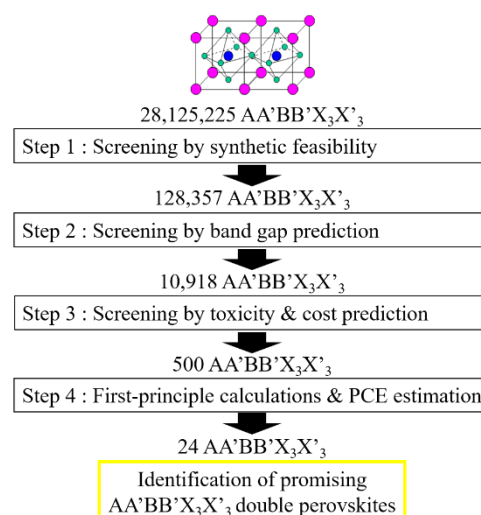


Fig 1. Diagram of novel $AA'BB'X_3X'_3$ perovskite search scheme.