

Pb-free perovskite 化合物の bandgap 予測と合成結果
Prediction and synthesis of Pb-free inorganic perovskite

東工大¹, LGJL² ○(D)酒向 正己^{1,2}, 千葉 真人², 安尾 信明¹, 渡部 一貴², 瀧本 啓人²,
一杉 太郎¹, 関嶋 政和¹

Tokyo Institute of Technology¹, LG Japan Lab²

E-mail: sako.m.ab@m.titech.ac.jp

Perovskite 化合物は、様々な分野において次世代の機能材料（太陽光発電素子や発光素子など）であると注目されている。例えば、太陽電池としてのエネルギー変換効率は25%を達成しており、既に従来の単結晶太陽電池に匹敵する変換効率にまで到達している。そして比較的容易でかつ安価に製造ができるという可能性も秘めている。しかし、これまでの研究では鉛を含んだ perovskite 化合物の報告が多く、有害な鉛を環境に放出してしまうリスクがある。そのため、近年では、鉛を含まない perovskite 化合物の研究が盛んになりつつある。

本研究では、数百種類の無機 perovskite 化合物の構造を計算機上で構築し、電子状態を第一原子計算で計算した。既知の化合物に関しては、結晶構造データベース（Crystallography Open Database(COD)[1]）を使用した。第一原理計算には、密度汎関数法による平面波・擬ポテンシャル基底を用いた第一原理電子状態計算プログラムである VASP[2]を使用した。汎関数にはバンドギャップ実験値に対する再現性が良いと考えられる HSE06 を用いた。実際に、数十種類のバンドギャップ実験値に対して、2種類の汎関数（GGA と HSE06）を比較することで、HSE06 の方が実験値の再現性が高い事を確認している。

数百種類の化合物に対する高精度なバンドギャップ計算結果のデータベースを構築し、機械学習手法を用いて、ここで得られたバンドギャップの計算結果を予測する機械学習モデルを作成した。その中で興味深い化合物に関して合成を行い、計算予測結果との比較を行なった。

本発表では、以上について報告する。

References:

[1] https://www.jaici.or.jp/wcas/wcas_icsd.htm

[2] <https://www.vasp.at/>