

PbS 量子ドットにおける第一原理非平衡グリーン関数解析および リガンド効果

First principle non-equilibrium transportation analysis on PbS quantum dot with different ligands

電通大 i-PERC&基盤理工¹

°(B4) 福田 渉¹, 坂本 克好¹, 山口 浩一¹, 曾我部 東馬¹

¹Univ. of Electro-Comm.

E-mail : sogabe@uec.ac.jp

はじめに コロイド量子ドットは、独自に調整可能な幅広い電子特性を備えており、溶液処理された太陽電池としての使用に大きな関心を寄せている。[1]現在、量子封じ込めの加減により、量子ドットのバンドギャップを調節することが可能となっていることが広く知られているが、量子ドットの表面のリガンドを調節することにより更なる効果が期待される。リガンドを変えることにより、量子ドット間での誘電状態の変化及びトンネル効果距離の変化により電荷輸送に大きな影響を及ぼすことがわかっており、PbS 量子ドットのリガンドを、複数種類の硫化物を付け替えた場合、紫外光電子分光法を用いて最大で 0.9eV のエネルギー差が生じている。[2] このようにデバイスにリガンド付き量子ドットを応用する際には、量子ドットの電荷輸送の状態が重要になってくる。ここで、第一原理計算と非平行グリーン関数法を用いて、リガンド付き量子ドットの作成及び電荷輸送の解析を目指す。

実験結果 図 1 (a),(b) は リガンド付き PbS 量子ドットおよびそのバンド構造である。リガンドは thiol と Cl を用いており、Gaussian16 により第一原理計算を用いて構造最適化を行った後のものである。図 1(c),(d) はリガンドを減らした PbS 量子ドット及びそのバンド構造であり、リガンドは thiol と Cl を用いた。最後に、作成したこの量子ドットを用いて非平衡グリーン関数法を用いて電荷輸送の解析を行う。

今後、様々な種類のリガンドを用いて構造最適化及び電荷輸送解析を行い、会議の際にその結果について報告する。

[1] Hong, Yang, et al. *Israel Journal of Chemistry* 59.8 (2019): 661-672.

[2] Brown, Patrick R., et al. *ACS nano* 8.6 (2014): 5863-5872.

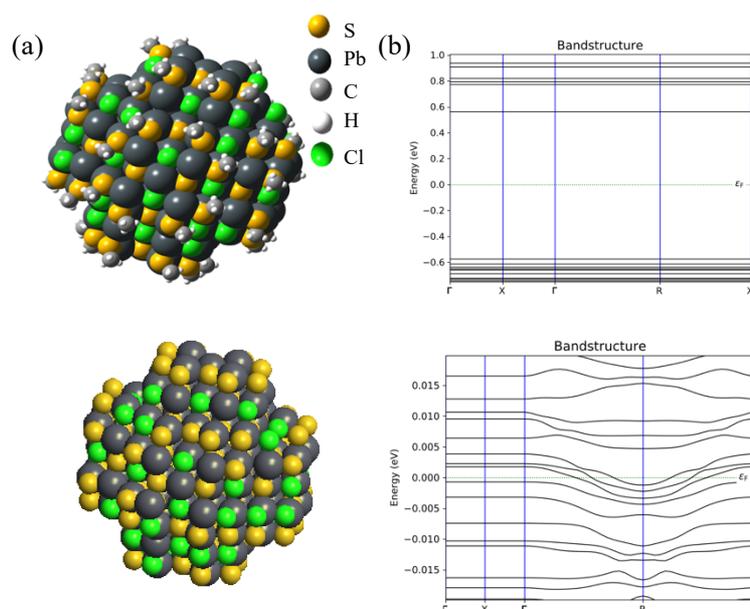


図 1 (a) PbS 量子ドット(ligand : thiol, Cl)、(b) (a)の量子ドットのバンド図(ligand : thiol, Cl)、(c) (a)リガンドを減らした量子ドットのバンド図、(d) (c)の量子ドットのバンド図