

ペロブスカイト配位子で不動態化された PbS 量子ドットの電子的および光学的特性と移動度シミュレーションの分析

Analysis of electronic and optical properties and mobility simulation of Perovskite ligand passivated PbS quantum dot

電通大 i-PERC&基盤理工¹, (株)グリッド², 東大先端研³

○(M2) 熊倉健太¹, 坂本 克好¹, 曾我部 東馬^{1,2,3}

¹Univ. of Electro-Comm., ²Grid inc., ³The Univ. of Tokyo.

E-mail : sogabe@uec.ac.jp

はじめに 量子ドットの表面のパッシベーションは電子特性や光学特性に対して、大きな影響を与えられることが知られている。しかし、リガンド付き量子ドットの構造、理論的な物性、光学特性について、ほとんど解析が行われていない。また、量子ドットの詳細な電子移動機構が確立されておらず、量子ドットの移動度を理論計算から求められていない[1]。本研究では、近年、高い移動度を持つことからリガンドとして注目を集めているペロブスカイトの FA ($\text{CH}(\text{NH}_2)_2$) と 2 種類のハロゲンの Cl, I の計 3 種類のリガンド付き量子ドットの電子物性と光学特性の解析し、比較を行う。また、MD-laundrer 法を用いた手法と MD と KMC を組み合わせた 2 つの手法について検討を行い、量子ドットの移動度の導出を目指す。

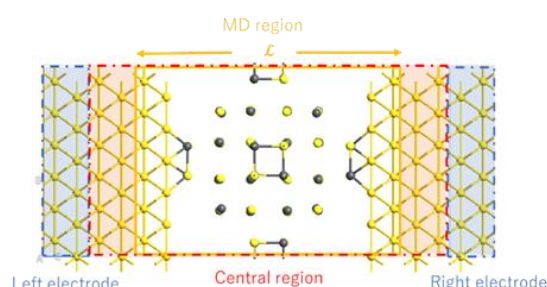


図1 MD-Landauer method 法で用いるデバイス

実験結果 本研究では、直径 1.6nm の PbS 量子ドットを用いて、3 種類のリガンド (FA, Cl, I) 付き PbS 量子ドットを作製した。図 2 に、Quantum ATK[®] で計算した各リガンド付き量子ドットの状態密度と光吸収係数を示す。図 2 の光吸収係数のグラフを比較すると、FA リガンド付き量子ドット (a) の光吸収係数のみグラフに不連続なピークがないことが分かる。これは、FA リガンドが量子ドットの閉じ込め効果を弱め、電子の

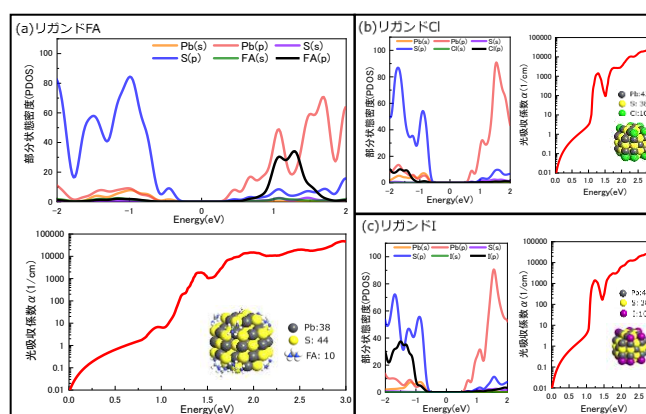


図2 (a)-(c) 各リガンド (FA, Cl, I) 付き量子ドットのカップリングがある場合の部分状態密度 (PDOS) と光吸収係数 α を表した図

移動を容易にしていることを示唆している。この結果は、ペロブスカイトをリガンドとして用いた場合にキャリア移動度が速くなることを示す実験結果と一致する。図 2(a) の部分状態密度のグラフから、この現象は黒線に FA の p 軌道が関与しているためと考えられる。今後、理論計算から量子ドットの移動度を求める手法を確立し、会議の際にその結果について報告する。

[1] Nuri Yazdani et al., Nature Communications 11, (2020)