

銅ドーピングした臭化鉛メチルアンモニウム結晶構造

Effect of Copper Doping on the Crystal Structure of MAPbBr₃

岡大院自然 ○(M1) 中尾 航大, (D) Amr Elattar, (M2) 三島 颯司, (D) 井上 寛隆,
鈴木 弘朗, 西川 亘, 林 靖彦

Okayama Univ., ° K. Nakao, A. Elattar, R. Mishima, H. Inoue,

H. Suzuki, T. Nishikawa, Y. Hayashi

E-mail: hayashi.yasuhiko@okayama-u.ac.jp

メチルアンモニウム (MAPbBr₃) のような有機無機ハイブリッドペロブスカイトは、熱電変換材料に適した高いゼーベック係数と低い熱伝導率を持つ[1]。しかし、電気伝導率が低いため、熱電発電素子の無次元性能指数 ZT は 1 をはるかに下回る。ビスマス (Bi) をドーピングすることで導電率が劇的に向上することが知られているが、未だに原子置換が結晶構造に及ぼす影響は十分に解明されていない[2]。また、結晶の歪みは電気特性の低下を引き起こす可能性があり[3]、結晶構造変化についての調査は重要である。

本研究では、銅(Cu)を MAPbBr₃ の前駆体溶液に 0%, 10%ずつ加え、溶液温度を変化させ溶解度を下げ続けることで結晶を作製した。得られた結晶を X 線回折 (X-ray diffraction : XRD) 測定を行うことでその構造評価を行った。ドーピングなしの場合と比較し、Cu を 10%ドーピングした結晶は、(001), (002), (003) のピークがそれぞれ高角側に +0.1~0.3 deg. シフトしていることが確認された。(001), (002), (003)の高角側へのピークシフトは、ブ

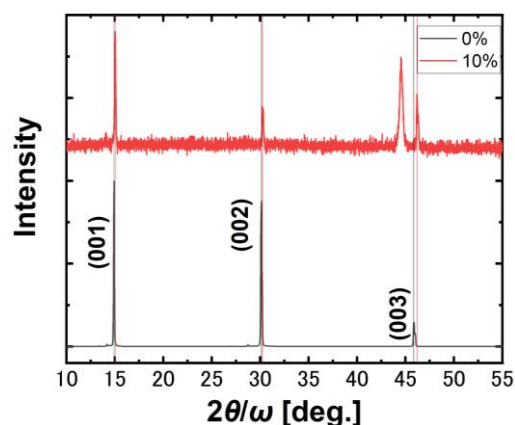


Fig. 1 XRD spectrum of MAPbBr₃ doped with Cu

ラッグの法則から面間隔が小さくなっていることを示している。Cu の原子サイズは 140 pm と、Pb の原子サイズ 202 pm よりも小さいことから、MAPbBr₃ に対し Cu 原子置換が行われていることが確認できた。また、ピークシフトが小さいことから、Cu を用いた B サイトの原子置換によっておこる結晶構造の格子歪み自体は非常に小さなものであると考えられる。44.6 deg.に確認された特異ピークは、CuBr₂ (44.9 deg.)に起因するピークであり、MAPbBr₃ とドーピングしなかった CuBr₂ の一部が独立して結晶成長したと考えられる。発表では、走査型電子顕微鏡による測定やラマン測定による Cu をドーピングした MAPbBr₃ の物性評価結果も含めて議論する。

[1] X. Mettan, *et al.*, *J. Phys. Chem. C* **119**, 11506–11510 (2015)

[2] W. Tang, *et al.*, *J. Mater. Chem. A* **8**, 13594 (2020).

[3] S. Watanabe *et. al.*, *Adv. Sci.* **2020**, 2002065 (2020)