การเพิ่มประสิทธิภาพการแปลงพลังงานแสงอาทิตย์และเสถียรภาพเชิงโครงสร้างของสารกึ่งตัวนำ $CH_3NH_3Pb_{1-x}Sn_x(I_{1-y}(Br,Cl)_y)_3$ ในเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดเพอรอฟสไกต์ โดยใช้ทฤษฎีเชิงฟังก์ชันของความหนาแน่นและแบบจำลองการเคลื่อนที่ของพาหะอิสระ

หัวหน้าโครงการวิจัย: ผศ.ดร.อัจฉรา ปัญญา เจริญจิตติชัย นักวิจัยร่วมโครงการวิจัย: รศ.ดร.ยงยุทธ เหล่าศิริถาวร

นักวิจัยหลังปริญญาเอก: นาย สิทธิเชนทร์ พราหมณ์ชู นักศึกษาปริญญาเอก: นาย ชุมพล ศุภทัตกุล

ภาควิชาฟิสิกส์และวัสดุศาสตร์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่

เป้าหมายของโครงการ

สร้างองค์ความรู้เกี่ยวกับการปรับปรุงเสถียรภาพเชิงโครงสร้างของสารเพอรอฟสไกต์ $CH_3NH_3Pb_{1-x}Sn_x(I_{1-y}(Br,Cl)_y)_3$ และ $CsPb_{1-x}Sn_xI_3$ และค้นหาวิธีการเพิ่มคุณภาพรอยต่อระหว่างสารเพอรอฟสไกต์กับสารชั้นนำพาหะอิสระเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการแปลงพลังงานของเซลล์แสงอาทิตย์ชนิดเพอรอฟสไกต์

ความสอดคล้อง

การหาวิธีป้องกันการเปลี่ยนเฟสและรักษาเสถียรภาพของโครงสร้าง perovskite เป็นประเด็นที่น่าสนใจซึ่งยังคงมีการศึกษาพัฒนาต่อยอดต่อไปได้อนาคต

งบประมาณที่ใช้ทั้งหมด

779,600 บาท

ระยะเวลาโครงการ

3 ปี (ปีงบประมาณ พ.ศ. 2560 – 2563)

ประสิทธิผล

องค์ความรู้: ทำการศึกษาการเจือผิวหน้าของสารเพอรอฟสไกต์ด้วยทฤษฎีเชิงฟังก์ชันของความหนาแน่นซึ่งเป็นทฤษฎีทางควอนตัม พบว่าการเจือสารคลอรีนและโบรมีน ลงในสาร $CH_3NH_3PbI_3$ ช่วยเพิ่มเสถียรภาพทางโครงสร้าง

ผลผลิต: นักศึกษาปริญญาเอก 1 คน (สำเร็จการศึกษาแล้ว)

นักวิจัยหลังปริญญาเอก 1 คน

บทความตีพิมพ์ในวารสารจำนวน 4 บทความ [1-4]

ผลกระทบ

การเจือสาร Cl และ Br ช่วยเพิ่มพลังงานยึดเหนี่ยวระหว่างอะตอมในโครงสร้างสาร $CH_3NH_3PbI_3$ และทำให้โครงสร้างเสถียรขึ้น ในอีกแง่มุมหนึ่งคาดว่าการเจือสาร Cl และ Br อาจไปยับยั้งการหมุนของโมเลกุล CH_3NH_3 ซึ่งหากการหมุนของโมเลกุลออร์แกนิคนี้เป็นที่มาของความไม่เสถียรเชิงโครงสร้าง การแทนที่ CH_3NH_3 ด้วย Cs หรือสารอนินทรีย์อื่นๆ ก็อาจจะสามารถป้องกันการสลายตัวของสารเพอรอฟสไกต์ได้

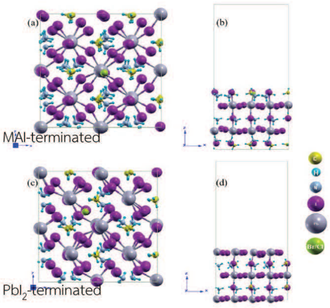
ความยั่งยืน

เพื่อให้เซลล์แสงอาทิตย์ชนิดเพอรอฟสไกต์เป็นหนึ่งในตัวเลือกของพลังงานสะอาดที่ให้ประสิทธิภาพสูงคุ้มค่ากับราคาต้นทุน

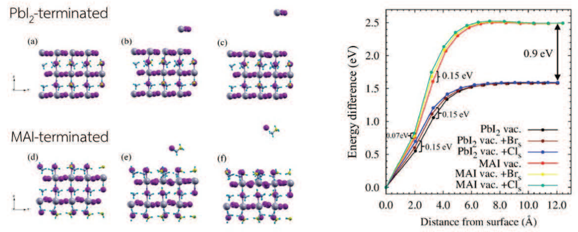
ผลการดำเนินการ

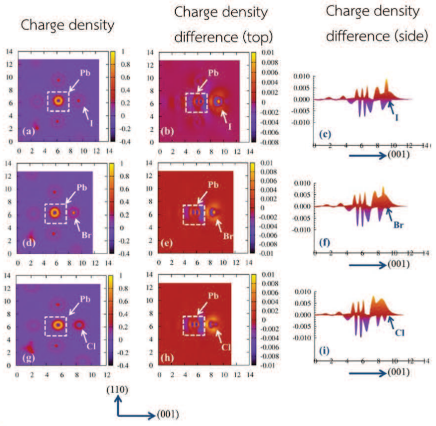
การเจือสาร Cl และ Br เพื่อเพิ่มเสถียรภาพเชิงโครงสร้างและการรักษาความราบเรียบของผิวหน้า (surface) ของสาร $CH_3NH_3PbI_3$ เพื่อป้องกันการหลุดออกของอะตอมบริเวณผิวหน้าซึ่งอาจนำไปสู่การเสื่อมประสิทธิภาพของเซลล์แสงอาทิตย์

แบบจำลองโครงสร้างผิวหน้าของสาร $CH_3NH_3PbI_3$ เพื่อใช้ในการศึกษาการหลุดของอะตอมจากผิวหน้าด้วยทฤษฎีเชิงฟังก์ชันของความหนาแน่น โดยมีลักษณะผิวหน้า 2 รูปแบบ คือ MAI-terminated และ PbI_2-terminated



ผลจำลองการหลุดออกของ PbI_2 และ CH_3NH_3I จากผิวหน้าของสาร $CH_3NH_3PbI_3$ พบว่าการเจือ Cl และ Br ส่งผลให้การหลุดออกของ PbI_2 และ CH_3NH_3I ที่ความสูงต่างๆ จากผิวหน้าจะใช้พลังงานก่อกัมมันต์ (activation energy) มากขึ้น จึงแสดงว่าการหลุดออกของ PbI_2 และ CH_3NH_3I เกิดได้ยากขึ้น

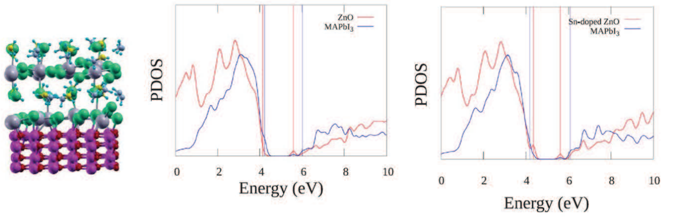




จากการคำนวณความหนาแน่นของอิเล็กตรอน ผลการคำนวณพบว่า พันธะระหว่างสารเจือ (Cl และ Br) กับอะตอม Pb มีความเป็นไอออนิคสูงกว่าพันธะระหว่าง I กับ Pb ซึ่งกราฟ Charge density difference แสดงให้เห็นถึงความหนาแน่นอิเล็กตรอนระหว่างอะตอม Pb กับสารเจือที่มีค่าสูงกว่า Pb กับ I

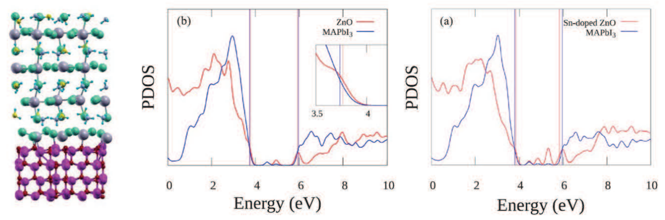
ผลกระทบต่อการเปลี่ยนแปลงของ band alignment จากการเจือ Sn ที่รอยต่อระหว่าง $CH_3NH_3PbI_3$/ZnO-nanorod

โมเดลรอยต่อ ZnO(1010)/$MAPbI_3$ ที่มีการเจืออะตอม Sn โดยแทนที่ Zn ที่บริเวณรอยต่อ



การวิเคราะห์ PDOS ของ รอยต่อ ZnO(1010)/$MAPbI_3$ แสดงให้เห็นถึงการเปลี่ยนแปลง band alignment จาก type-II เป็น type-I เมื่อทำการเจือด้วยอะตอม Sn

โมเดลรอยต่อ ZnO(0001)/$MAPbI_3$ ที่มีการเจืออะตอม Sn โดยแทนที่ Zn ที่บริเวณรอยต่อ

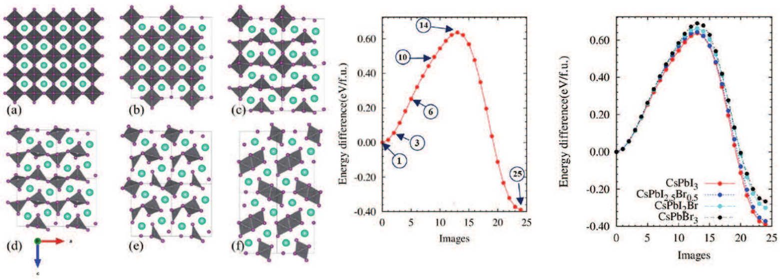


การวิเคราะห์ PDOS ของ รอยต่อ ZnO(0001)/$MAPbI_3$ แสดงให้เห็นว่าการเจือ Sn ไปยังบริเวณรอยต่อ ไม่ส่งผลต่อการเปลี่ยนแปลง band alignment ในโครงสร้างนี้

นอกจากนี้โมเดลรอยต่อ ZnO(0001)/$MAPbI_3$ ที่มีการเจืออะตอม Sn ก่อให้เกิดกับดักพลังงานมากขึ้นในบริเวณ band gap

การศึกษาการปรับปรุงเสถียรภาพเชิงโครงสร้างของสาร $CH_3NH_3PbI_3$ โดยการแทนที่ CH_3NH_3 ด้วย Cs และการเจือ Br แทนที่ I ใน $CsPbI_3$

สำหรับ $CsPbI_3$ การเปลี่ยนเฟสจากโครงสร้าง cubic perovskite ไปสู่โครงสร้าง non-perovskite จำเป็นที่ต้องการพลังงานค่าหนึ่งเพื่อเอาชนะ energy barrier ซึ่งจากการศึกษาพบว่าการเจือ Br สามารถเพิ่มค่า energy barrier นี้ให้สูงขึ้น ทำให้การเปลี่ยนเฟสไปสู่โครงสร้าง non-perovskite ทำได้ยากมากขึ้น



เอกสารอ้างอิง

[1] S. Pramchu, A. P. Jaroenjittichai, Y. Laosiritaworn (2019) "Effects of Bromine Substitution for Iodine on Structural Stability and Phase Transition of $CsPbI_3$", Applied Surface Science, 496, 143593

[2] S. Pramchu, T. Cheiwchanchamnangij Y. Laosiritaworn, A. P. Jaroenjittichai (2019) "Enhancing surface stabilization of $CH_3NH_3PbI_3$ perovskite by Cl and Br doping: First-principles study", Journal of Applied Physics, 125, 115302

[3] S. Pramchu, A. P. Jaroenjittichai, Y. Laosiritaworn (2018) "First-principles investigations of structural stability and electronic band structure of $CH_3NH_3BiI_3$ for lead-free perovskite solar cell application", Journal of Physics Conference Series, 1144, 012019

[4] C. Supatutkul, S. Pramchu, A. P. Jaroenjittichai, Y. Laosiritaworn (2018) "Influence of interfacial Sn-doping on band alignment of ZnO-nanorods/$MAPbI_3$ interface: The density functional calculation", Ceramics International, 44 , S177-S180

โปสเตอร์สรุปโครงการวิจัย 2560

การประชุมศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ ประจำปี 2563

ณ โรงแรม เดอะ สุโกศล กรุงเทพมหานคร วันที่ 28 สิงหาคม พ.ศ. 2563

ThEP

http://thep-center.org/