(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2022-0101557
(43) 공개일자 2022년07월19일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C01G 19/00 (2006.01) *C01G 17/00* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) *C09K 11/66* (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) *H01L 51/42* (2006.01)
B82Y 20/00 (2017.01) *B82Y 40/00* (2017.01)
(52) CPC특허분류
C01G 19/00 (2013.01)
C01G 17/00 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2021-0146991
(22) 출원일자 2021년10월29일
심사청구일자 없음
(30) 우선권주장
1020210003521 2021년01월11일 대한민국(KR)

(71) 출원인
세종대학교산학협력단
서울특별시 광진구 능동로 209 (군자동, 세종대학교)
순천대학교 산학협력단
전라남도 순천시 중앙로 255(매곡동)
(72) 발명자
손기선
서울특별시 강남구 언주로146길 18, 4동 302호
이병도
서울특별시 강동구 진황도로61길 25-31 3층
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인아이엠

전체 청구항 수 : 총 5 항

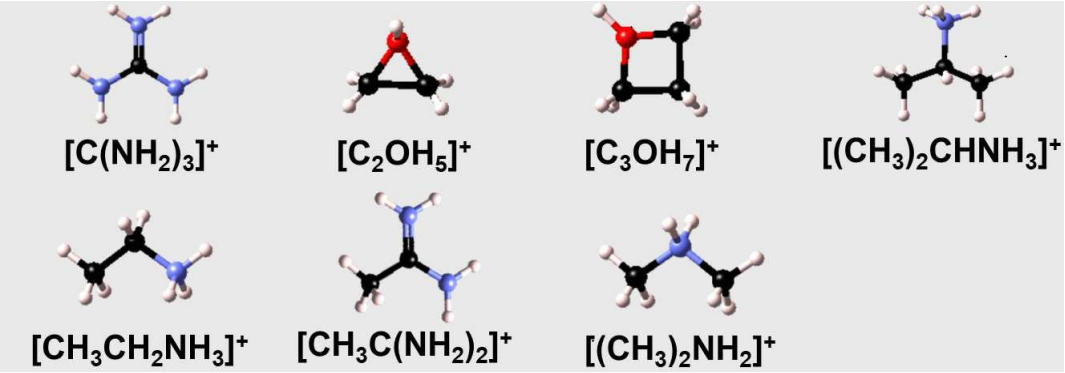
(54) 발명의 명칭 **하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물**

(57) 요 약

본 발명은 종래 알려져 있지 않은 신규한 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물에 관한 것이다.

본 발명에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 이 화합물이 가지는 형성 에너지, 밴드 갭 및 유효 질량을 고려할 때, 광전지 및 발광 소자와 같은 전기 광학 분야에 적합하게 사용될 수 있다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2022.01)
C09K 11/664 (2021.01)
H01L 51/0077 (2013.01)
H01L 51/4213 (2013.01)
B82Y 20/00 (2013.01)
B82Y 40/00 (2013.01)
C01P 2002/34 (2013.01)

(72) 발명자
이진웅
부산광역시 해운대구 운봉길 77-7 2층
김민석
세종특별자치시 해밀3로 90 211동 404호
표명호
전라남도 순천시 삼산로 135-5 삼성아파트 9동 1302호
박운배
전라남도 순천시 삼산초등길 19

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1711126578
과제번호	2015M3D1A1069707
부처명	과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명	한국연구재단
연구사업명	미래소재디스커버리지원(R&D)
연구과제명	휴리스틱스 전산기반 기능성 무기소재 창제 연구
기 여 율	7/10
과제수행기관명	세종대학교
연구기간	2021.01.04 ~ 2021.12.03

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1415174611
과제번호	20012196
부처명	산업통상자원부
과제관리(전문)기관명	한국산업기술평가관리원
연구사업명	산업기술알키미스트프로젝트(R&D)
연구과제명	AI 기반 초임계 소재
기 여 율	2/10
과제수행기관명	연세대학교 산학협력단
연구기간	2021.05.01 ~ 2022.02.28

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1345332026
과제번호	2014R1A6A1030419
부처명	교육부
과제관리(전문)기관명	한국연구재단
연구사업명	대학중점연구소지원사업
연구과제명	차세대IT-융합소재 연구소
기 여 율	1/10
과제수행기관명	순천대학교
연구기간	2021.03.01 ~ 2022.02.28

명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 [화학식 1]로 표시되는 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물.

[화학식 1]

$A_3M_2X_7$

(A는 $C(NH_2)_3$, C_2OH_5, C_3OH_7, $(CH_3)_2CHNH_3$, $CH_3CH_2NH_3$, $CH_3C(NH_2)_2$, $(CH_3)_2NH_2$ 중에서 선택된 1종 이상이고, M은 Sn 및 Ge 중에서 선택된 1종 이상이며, X는 Br과 I중에서 선택된 1종 이상이다.)

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물의 공간군(space group)은 I4/mmm 인 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

상기 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 태양전지의 광흡수 물질 또는 발광다이오드의 발광물질에 사용되는 것인 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물.

청구항 4

제 1 전극과,

상기 제 1 전극과 마주보는 제 2 전극과,

상기 제 1 전극과 제 2 전극의 사이에 위치하는 광흡수층을 포함하고,

상기 광흡수층은 제 1 항 또는 제 2 항에 기재된 페로브스카이트 화합물을 포함하는 태양 전지.

청구항 5

제 1 전극과,

상기 제 1 전극과 마주보는 제 2 전극과,

상기 제 1 전극과 제 2 전극의 사이에 위치하는 발광층을 포함하고,

상기 발광층은 제 1 항 또는 제 2 항에 기재된 페로브스카이트 화합물을 포함하는 발광 소자.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 신규한 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물에 관한 것으로, 특히 납이나 다른 독성 성분을 포함하지 않고 태양 전지 및 발광 소자와 같은 전기 광학 분야에 적합하게 사용될 수 있는 상 안정성, 밴드 갭 및 유효 질량(effective mass)을 가지는 화합물에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0003] 지난 10여년 동안 하이브리드 유무기 페로브스카이트는 태양전지와 발광 소자와 같은 전기 광학 응용 분야에의

적용에 대한 가능성으로 인해 주목을 받아 왔고, 하이브리드 유무기 페로브스카이트에 대한 연구개발이 활발하게 이루어져 왔다.

[0004] 그럼에도 불구하고, 다양한 물성 요구에 대응할 수 있도록 새로운 조성이나 결정구조를 가지는 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물의 개발이 필요하다.

선행기술문헌

특허문헌

[0006] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허공보 제2019-0034516호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명은 납이나 독성 성분을 포함하지 않으면서 태양 전지 및 발광 소자와 같은 전기 광학 분야에 적합하게 사용될 수 있는 상 안정성, 밴드 갭 및 유효 질량(effective mass)을 가지는 신규한 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물을 제공하는데 있다.

과제의 해결 수단

[0009] 상기 과제를 해결하기 위해 본 발명은, 하기 [화학식 1]로 표시되는 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물을 제공한다.

[0010] [화학식 1]

[0011] $A_3M_2X_7$

[0012] (A는 $C(NH_2)_3$, C_2OH_5, C_3OH_7, $(CH_3)_2CHNH_3$, $CH_3CH_2NH_3$, $CH_3C(NH_2)_2$, $(CH_3)_2NH_2$ 중에서 선택된 1종 이상이고, M은 Sn 및 Ge 중에서 선택된 1종 이상이며, X는 Br과 I중에서 선택된 1종 이상이다.)

발명의 효과

[0014] 본 발명에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 기존에 알려져 있지 않은 조성이나 결정구조를 가지는 것으로, 납이나 기타 독성 성분을 포함하지 않고 태양전지의 광흡수층 또는 LED의 발광체와 같은 전기 광학 분야에 적합하게 사용될 수 있는 안정성, 밴드갭 에너지 및 유효 질량을 나타낸다.

도면의 간단한 설명

[0016] 도 1은 본 발명에 따른 조성물에서 A 자리를 구성하는 유기분자들을 나타낸 것이다.

도 2는 본 발명의 일 실시형태에 따른 조성물이 가지는 결정 구조를 나타낸 것이다.

도 3은 본 발명의 일 실시형태에 따른 발광 소자의 층 구조를 나타낸 것이다.

도 4는 본 발명의 일 실시형태에 따른 태양 전지의 층 구조를 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0017] 이하, 첨부한 도면을 참조하여 본원이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자가 용이하게 실시할 수 있도록 본원의 실시예를 상세히 설명한다. 그러나 본원은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며 여기에서 설명

하는 실시예에 한정되지 않는다. 그리고 도면에서 본원을 명확하게 설명하기 위해서 설명과 관계없는 부분은 생략하였으며, 명세서 전체를 통하여 유사한 부분에 대해서는 유사한 도면 부호를 붙였다.

[0018] 본원 명세서 전체에서, 어떤 부분이 어떤 구성 요소를 "포함"한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성 요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성 요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.

[0019] 본원 명세서 전체에서 사용되는 정도의 용어 "약", "실질적으로" 등은 언급된 의미에 고유한 제조 및 물질 허용 오차가 제시될 때 그 수치에서 또는 그 수치에 근접한 의미로 사용되고, 본원의 이해를 돕기 위해 정확하거나 절대적인 수치가 언급된 개시 내용을 비양심적인 침해자가 부당하게 이용하는 것을 방지하기 위해 사용된다.

[0020] [하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물]

[0021] 본 발명의 제 1 실시형태는, 하기 [화학식 1]로 표시되는 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물을 제공하는 것이다.

[0022] [화학식 1]

[0023] $A_3M_2X_7$

[0024] (A는 $C(NH_2)_3$, C_2OH_5, C_3OH_7, $(CH_3)_2CHNH_3$, $CH_3CH_2NH_3$, $CH_3C(NH_2)_2$, $(CH_3)_2NH_2$ 중에서 선택된 1종 이상이고, M은 Sn 및 Ge 중에서 선택된 1종 이상이며, X는 Br과 I중에서 선택된 1종 이상이다.)

[0025] 본 발명에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 납(Pb)을 포함하지 않고, 독성 성분으로 알려진 성분도 포함하지 않아 상용화에 유리하다. 또한, 본 발명에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 밴드갭 에너지가 0.8~3eV의 범위에 있기 때문에, 태양전지 애플리케이션(밴드갭 에너지 0.8~2.2eV 범위) 또는 LED 애플리케이션(밴드갭 에너지 1.65~3eV)에 적합하게 사용될 수 있다. 또한, 본 발명에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 기존에 알려져 있지 않은 조성 및/또는 결정구조로 이루어져 있기 때문에, 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물에서 구현할 수 있는 물성의 범위를 확장할 수 있을 것으로 기대된다.

[0026] 또한, 상기 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물의 공간군(space group)은 I4/mmm 일 수 있다.

[0027] 또한, 본 발명의 상기 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 태양전지의 광흡수 물질 또는 발광다이오드의 발광물질에 사용되는 것일 수 있다. 그러나, 본 발명의 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물의 용도가 이에 제한되는 것은 아니다.

[0029] [태양 전지]

[0030] 도 3은 본 발명의 제 2 실시형태에 따른 발광 소자의 층 구조를 나타낸 것이다. 도 3을 참조하면, 본 발명의 제 2 실시형태는, 제 1 전극(110)과, 상기 제 1 전극과 마주보는 제 2 전극(150)과, 상기 제 1 전극(110)과 제 2 전극(150)의 사이에 위치하는 광흡수층(130)을 포함하고, 상기 광흡수층(130)은 전술한 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 태양 전지(100)를 제공한다.

[0031] 상기 제 1 전극(110)에는 전도성 투명 기판이 사용될 수 있다. 상기 전도성 투명 기판은 예를 들어, 불소 함유 산화주석(FTO; Fouorine doped Tin Oxide), 인듐 함유 산화주석(ITO; Indium doped Tin Oxide), ZnO, PEDOT:PSS 등이 사용될 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0032] 상기 제 1 전극(110) 상에는 추가로 전자 전달층(120)이 형성될 수 있고, 전자 전달층(140)으로는 예를 들어, TiO_2, SnO_2, ZnO, Nb_2O_5, Ta_2O_5, WO_3, W_2O_5, In_2O_3, Ga_2O_3, Nd_2O_3, PbO, 또는 CdO를 사용할 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0033] 상기 광흡수층(130) 상에는 추가로 정공 전달층(140)이 형성될 수 있고, 상기 정공 전달층(150)으로는 고체형 정공 전달 물질 또는 액상 전해질이 사용될 수 있다. 상기 고체형 정공 전달 물질로는 예를 들어, 스피로-OMeTAD(2,2',7,7'-테트라키스-(N,N-디-p-메톡시페닐아민)9,9'-스피로비플루오렌)), P3HT(폴리(3-헥실티오펜)), PCPDTBT(폴리[2,1,3-벤조티아디아졸-4,7-디일[4,4-비스(2-에틸헥실)-4H-시클로펜타[2,1-b:3,4-b']디티오펜-2,6-디일]]), PVK(폴리(N-비닐카바졸)), HTM-TFSI(1-헥실-3-메틸이미다졸륨 비스(트리플루오로메틸술포닐)이미드), Li-TFSI(리튬 비스(트리플루오로메탄술포닐)이미드), tBP(tert-부틸피리딘), PDOT:PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene) poly(styrenesulfonate)) 등이 사용될 수 있다. 상기 액상 전해질로는 요오드와 첨가

제를 용매에 용해시킨 것이 사용될 수 있으며, 예를 들어 우레아(urea), 티오우레아(thiourea), 부틸피리딘(tert-butylpyridine) 및 구아니딘 사이오시아네이트(guanidium thiotianate) 등의 첨가제에 에틸아세테이트, 아세토니트닐, 톨루엔 및 메톡시프로피오니트틸 등의 용매를 적용한 것이 사용될 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0034] 상기 제2 전극(150)으로는, ITO, FTO, ZnO-Ga_2O^3, ZnO-Al_2O_3 및 주석계 산화물로 이루어진 군에서 선택되는 1종 이상의 물질을 포함하는 유리 기판 또는 플라스틱 기판에, Pt, Au, Ni, Cu, Ag, In, Ru, Pd, Rh, Ir, Os, C, 및 전도성 고분자로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 물질을 포함하는 도전층이 형성된 것이 사용될 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0036] [발광 소자]

[0037] 본 명세서에서 '발광 소자'란 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 위치하는 발광층에서 정공(hole) 및 전자(electron)가 결합하여 형성된 여기자(exciton)가 에너지를 방출하며 빛을 발하는 소자를 의미한다.

[0038] 도 4는 본 발명의 제 3 실시형태에 따른 태양 전지의 층 구조를 나타낸 것이다. 도 4를 참조하면, 본 발명의 제 3 실시형태는, 제 1 전극(210)과, 상기 제 1 전극(210) 상에 형성되는 전자주입층(220)과, 상기 전자주입층(220) 상에 형성되는 전자수송층(230)과, 상기 전자수송층(230) 상에 형성되는 상기 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물을 포함하는 발광층(240)과, 상기 발광층(240) 상에 형성되는 정공수송층(250)과, 상기 정공수송층(250) 상에 형성되는 정공주입층(260)과, 상기 정공주입층(260) 상에 형성되는 제 2 전극(270)을 포함하는 발광 다이오드(200)를 제공한다.

[0039] 상기 제 1 전극(210)은 일함수가 낮고 반사율이 높은 물질로 구성될 수 있는데, 예를 들어 은(Ag)을 포함할 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0040] 상기 제2 전극(270)은 일함수 및 광투과율이 높은 물질로 구성될 수 있고, 예를 들어 인듐 함유 산화주석(ITO; Indium doped Tin Oxide)이 사용될 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0041] 또한, 상기 전자주입층(220), 전자수송층(230), 정공수송층(250) 및 정공주입층(260)은 발광 다이오드에 사용되는 공지의 물질들이 사용될 수 있다.

[0043] <조성예 1>

[0044] 조성예 1에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 $(C(NH_2)_3)_3Sn_2Br_7$ 이다.

[0045] 조성예 1에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 도 1의 $[C(NH_2)_3]^+$로 나타낸 구조를 가지는 유기 양이온 성분과 함께 도 2의 브라베 격자 및 공간군으로 나타낸 결정구조를 가진다. 또한, DFT 계산에 의한 이 조성물의 Eg^{GGA}는 1.67eV이고, Eg^{HSE06}은 2.41eV이며, 유효질량 $m*_h$와 $m*_e$는 각각 0.36와 0.35 이다.

[0047] <조성예 2>

[0048] 조성예 2에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 $(C_2OH_5)_3Ge_2Br_7$ 이다.

[0049] 조성예 2에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 도 1의 $[C_2OH_5]^+$로 나타낸 구조를 가지는 유기 양이온 성분과 함께 도 2의 브라베 격자 및 공간군으로 나타낸 결정구조를 가진다. DFT 계산에 의한 이 조성물의 Eg^{GGA}는 2.04eV이고 Eg^{HSE06}은 2.82eV이며, 유효질량 $m*_h$와 $m*_e$는 각각 0.77와 0.19 이다.

[0051] <조성예 3>

[0052] 조성예 3에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 $(C_3OH_7)_3Sn_2Br_7$ 이다.

[0053] 조성예 3에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 도 1의 $[C_3OH_7]^+$로 나타낸 구조를 가지는 유기 양이온 성분과 함께 도 2의 브라베 격자 및 공간군으로 나타낸 결정구조를 가진다. 또한, DFT 계산에 의한 이 조성물의 Eg^{GGA}는 1.95eV이고 Eg^{HSE06}은 2.73eV이며, 유효질량 $m*_h$와 $m*_e$는 각각 0.21과 0.11 이다.

[0055] <조성예 4>

[0056] 조성예 4에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 $(C_2OH_5)_3Ge_2I_7$ 이다.

[0057] 조성예 4에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 도 1의 $[C_2OH_5]^+$로 나타낸 구조를 가지는 유기 양이온 성분과 함께 도 2의 브라베 격자 및 공간군으로 나타낸 결정구조를 가진다. 또한, DFT 계산에 의한 이 조성물의 Eg^{GGA}는 1.30eV이고 Eg^{HSE06}은 1.99eV이며, 유효질량 $m*_h$와 $m*_e$는 각각 0.57과 0.49 이다.

[0059] <조성예 5>

[0060] 조성예 5에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 $((CH_3)_2CHNH_3)_3Sn_2Br_7$ 이다.

[0061] 조성예 5에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 도 1의 $[(CH_3)_2CHNH_3]^+$로 나타낸 구조를 가지는 유기 양이온 성분과 함께 도 2의 브라베 격자 및 공간군으로 나타낸 결정구조를 가진다. 또한, DFT 계산에 의한 이 조성물의 Eg^{GGA}는 2.00eV이고 Eg^{HSE06}은 2.78eV이며, 유효질량 $m*_h$와 $m*_e$는 각각 1.37과 1.29 이다.

[0063] <조성예 6>

[0064] 조성예 6에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 $(C_3OH_7)_3Sn_2I_7$ 이다.

[0065] 조성예 6에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 도 1의 $[C_3OH_7]^+$로 나타낸 구조를 가지는 유기 양이온 성분과 함께 도 2의 브라베 격자 및 공간군으로 나타낸 결정구조를 가진다. 또한, DFT 계산에 의한 이 조성물의 Eg^{GGA}는 1.04eV이고 Eg^{HSE06}은 1.70eV이며, 유효질량 $m*_h$와 $m*_e$는 각각 0.58과 0.23 이다.

[0067] <조성예 7>

[0068] 조성예 7에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 $(CH_3CH_2NH_3)_3Sn_2Br_7$ 이다.

[0069] 조성예 7에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 도 1의 $[CH_3CH_2NH_3]^+$로 나타낸 구조를 가지는 유기 양이온 성분과 함께 도 2의 브라베 격자 및 공간군으로 나타낸 결정구조를 가진다. 또한, DFT 계산에 의한 이 조성물의 Eg^{GGA}는 1.82eV이고 Eg^{HSE06}은 2.58eV이며, 유효질량 $m*_h$와 $m*_e$는 각각 1.14와 0.44 이다.

[0071] <조성예 8>

[0072] 조성예 8에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 $(C_2OH_5)_3Sn_2I_7$ 이다.

[0073] 조성예 8에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 도 1의 $[C_2OH_5]^+$로 나타낸 구조를 가지는 유기 양이온 성분과 함께 도 2의 브라베 격자 및 공간군으로 나타낸 결정구조를 가진다. 또한, DFT 계산에 의한 이 조성물의 Eg^{GGA}는 0.62eV이고 Eg^{HSE06}은 1.23eV이며, 유효질량 $m*_h$와 $m*_e$는 각각 0.16과 0.23 이다.

[0075] <조성예 9>

[0076] 조성예 9에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 $(CH_3CH_2NH_3)_3Sn_2I_7$ 이다.

[0077] 조성예 9에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 도 1의 $[CH_3CH_2NH_3]^+$로 나타낸 구조를 가지는 유기 양이온 성분과 함께 도 2의 브라베 격자 및 공간군으로 나타낸 결정구조를 가진다. 또한, DFT 계산에 의한 이 조성물의 Eg^{GGA}는 1.07eV이고 Eg^{HSE06}은 1.74eV이며, 유효질량 m^*_h와 m^*_e는 각각 0.35와 0.29 이다.

[0079] <조성예 10>

[0080] 조성예 10에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 $(CH_3C(NH_2)_2)_3Ge_2I_7$ 이다.

[0081] 조성예 10에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 도 1의 $[CH_3C(NH_2)]^+$로 나타낸 구조를 가지는 유기 양이온 성분과 함께 도 2의 브라베 격자 및 공간군으로 나타낸 결정구조를 가진다. 또한, DFT 계산에 의한 이 조성물의 Eg^{GGA}는 1.36eV이고 Eg^{HSE06}은 2.06eV이며, 유효질량 m^*_h와 m^*_e는 각각 0.62와 1.29 이다.

[0083] <조성예 11>

[0084] 조성예 11에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 $((CH_3)_2NH_2)_3Ge_2Br_7$ 이다.

[0085] 조성예 11에 따른 하이브리드 유무기 페로브스카이트 화합물은 도 1의 $[(CH_3)_2NH_2]^+$로 나타낸 구조를 가지는 유기 양이온 성분과 함께 도 2의 브라베 격자 및 공간군으로 나타낸 결정구조를 가진다. 또한, DFT 계산에 의한 이 조성물의 Eg^{GGA}는 2.09eV이고 Eg^{HSE06}은 2.88eV이며, 유효질량 m^*_h와 m^*_e는 각각 0.57과 1.26 이다.

[0087] 아래 표 1은 상기 조성예 1 ~ 11의 계산결과를 정리한 것이다.

표 1

[0088]

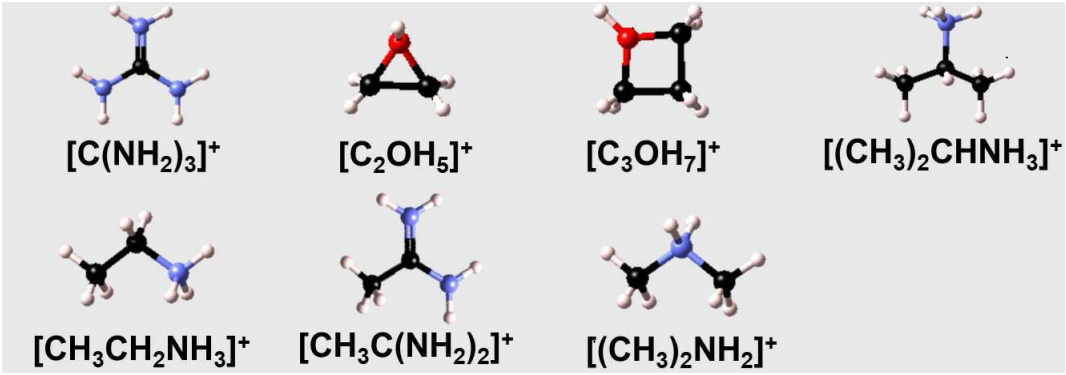
조성물	화학식	공간군	Eg^{GGA}	Eg^{HSE06}	m^*_h	m^*_e	D/I
1	$(C(NH_2)_3)_3Sn_2Br_7$	I4/mmm	1.67	2.41	0.36	0.35	D
2	$(C_2OH_5)_3Ge_2Br_7$	I4/mmm	2.04	2.82	0.77	0.19	D
3	$(C_3OH_7)_3Sn_2Br_7$	I4/mmm	1.95	2.73	0.21	0.11	D
4	$(C_2OH_5)_3Ge_2I_7$	I4/mmm	1.30	1.99	0.57	0.49	D
5	$((CH_3)_2CHNH_3)_3Sn_2Br_7$	I4/mmm	2.00	2.78	1.37	1.29	D
6	$(C_3OH_7)_3Sn_2I_7$	I4/mmm	1.04	1.70	0.58	0.23	D
7	$(CH_3CH_2NH_3)_3Sn_2Br_7$	I4/mmm	1.82	2.58	1.14	0.44	D
8	$(C_2OH_5)_3Sn_2I_7$	I4/mmm	0.62	1.23	0.16	0.23	D
9	$(CH_3CH_2NH_3)_3Sn_2I_7$	I4/mmm	1.07	1.74	0.35	0.29	D
10	$(CH_3C(NH_2)_2)_3Ge_2I_7$	I4/mmm	1.36	2.06	0.62	1.29	D
11	$((CH_3)_2NH_2)_3Ge_2Br_7$	I4/mmm	2.09	2.88	0.57	1.26	D

[0090] 표 1에서 'Eg^{GGA}'는 예측된 GGA(generalized gradient approximation) 밴드갭이고, 'Eg^{HSE06}'은 예측된 HSE06 밴드갭이고, 'm^*_h'와 'm^*_e'는 유효질량이고, 'D/I'는 밴드갭이 다이렉트(direct)인지 인다이렉트(indirect)인지를 나타낸 것이다.

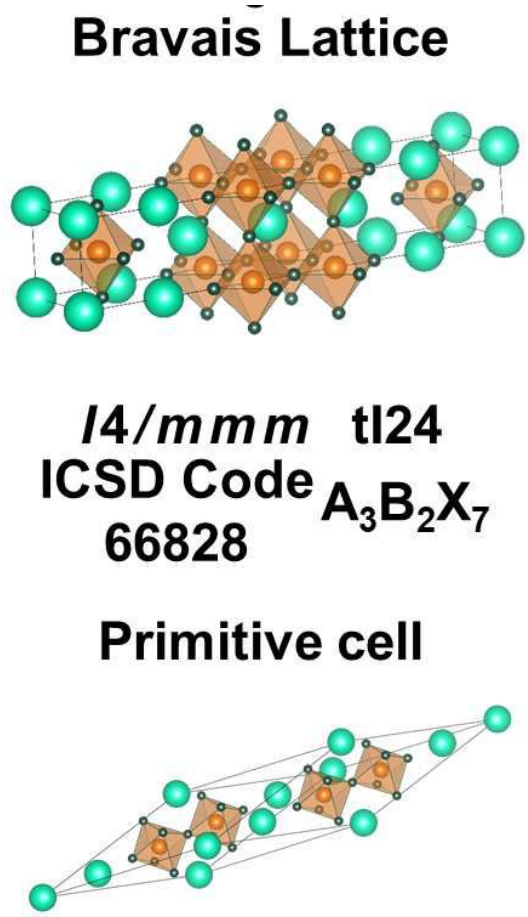
[0091] 상기 표 1에 정리된 바와 같이, 본 발명에 따른 조성물들의 밴드갭과 유효질량은 태양 전지 및 발광 소자와 같은 전기 광학 분야에 적합하게 사용될 수 있는 범위를 가진다.

도면

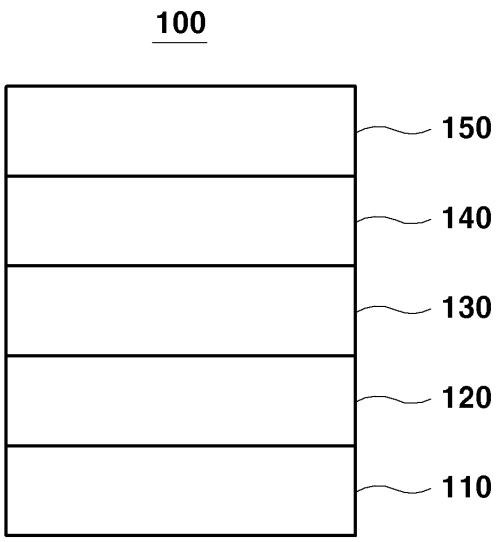
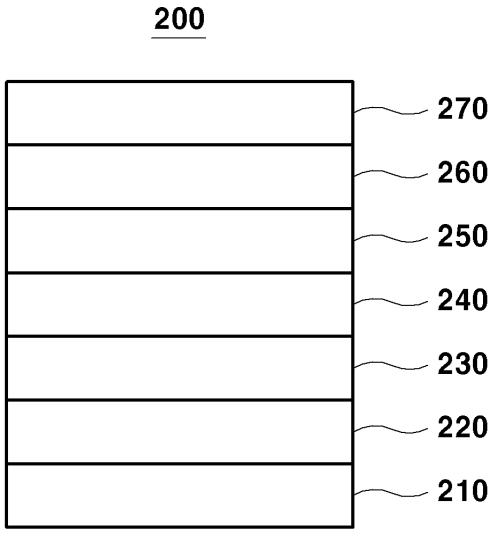
도면1



도면2



도면3



도면4