

様式 F - 7 - 1

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）実施状況報告書（研究実施状況報告書）（平成29年度）

所属研究機関名称		奈良先端科学技術大学院大学	機関番号	14603
研究代表者	部局	物質創成科学研究科		
	職	特任助教		
	氏名	JUNG MINCHERL		

1. 研究種目名 基盤研究(C)(一般) 2. 課題番号 17K050333. 研究課題名 Physical understanding of defects in organometal halide perovskite4. 補助事業期間 平成29年度～平成31年度

5. 研究実績の概要

In this year, the most important research targets were 1) Construction of vacuum chamber and 2) Confirmation of organohalide perovskite thin film fabrication. We completed the plan smoothly. The first manuscript using the constructed chamber is published at The Journal of Physical Chemistry Letters (IF=9.353)

The detailed progress:

1. We have performed the construction of vacuum chamber for the fabrication of organohalide perovskite thin film. And in the pre-testing experiment, we confirmed the sequential vacuum evaporation method was useful.
2. To understand the instability of Sn-based perovskite, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, photoelectron spectroscopy with synchrotron radiation and theoretical calculations, such as density functional theory and ab-initio molecular dynamics, were performed. Findings from this experimental and theoretical study highlight the crucial changes of surface-chemical states, the broken chemical bondings in Sn-I, and the depletion of a $\text{CH}_3\text{-NH}_3^+$ cation on the surface region. The material instability origin of Sn-based perovskite can be explained by the chemical state instability in the surface.
3. Now, the manuscript is published at The Journal of Physical Chemistry Letters (IF=9.353). (<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcllett.8b00494>) (The reviewer mentioned our manuscript would be in TOP 10% reading in Journal of Physical Chemistry Letters)

6. キーワード

Surface defect structure Chemical instability Material instability

7. 現在までの進捗状況

区分 (2) おおむね順調に進展している。

理由

According to the proposed plan, the research is going very smoothly. There is no problem.

2 版

8. 今後の研究の推進方策

1. We will focus on the molecular defect at the grain boundary such as CH_3NH_2 . We would like to understand the perovskite stability at the grain boundary and its effect in the device performance.

2. And we will prepare to see the interface and possible defects in there between organohalide perovskite thin film and hole transport layer (HTL). We already decided to use P40 polymer for HTL.

9. 次年度使用が生じた理由と使用計画

Several items in the initial plan are still considering to buy very carefully. They will be purchased at the next year.

10. 研究発表（平成29年度の研究成果）

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 YoungMi Lee, Jinwoo Park, Byung Deok Yu, Suklyun Hong, Min-Cherl Jung, and Masakazu Nakamura	4. 巻 9
2. 論文標題 Surface Instability of Sn-based Hybrid Perovskite Thin Film, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$: The Origin of Its Material Instability	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 2293-2297
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpcllett.8b00494	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 Min-Cherl Jung
2. 発表標題 The presence of CH_3NH_2 neutral species in organometal halide perovskite films
3. 学会等名 2017 Collaborative Conference on Materials Research (CCMR) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Min-Cherl Jung, Young Mi Lee, Han-Koo Lee, Jinwoo Park, Sonia R. Raga, Luis K. Ono, Shenghao Wang, Matthew R. Leyden, Byung Deok Yu, Suklyun Hong, Yabing Qi
2. 発表標題 The presence of CH ₃ NH ₂ neutral species and different chemical states between surface and bulk in organometal halide perovskite film
3. 学会等名 ELECTRONIC STRUCTURE AND PROCESSES AT MOLECULAR-BASED INTERFACES" (ESPMI 9) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Young Mi Lee, Min-Cherl Jung, Han-Koo Lee, Jinwoo Park, Sonia R. Raga, Luis K. Ono, Shenghao Wang, Matthew R. Leyden, Byung Deok Yu, Suklyun Hong, and Yabing Qi
2. 発表標題 Observation of chemical defect in CH ₃ NH ₃ PbI ₃ thin film using synchrotron radiation
3. 学会等名 The 8th International Symposium on Surface Science (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 I. Maeng, J. Park, Y. M. Lee, S. R. Raga, L. K. Ono, Y. Qi, S. Hong, B. D. Yu, C. Kang, C.-S. Kee, M.-C. Jung, and M. Nakamura
2. 発表標題 Observation of THz absorption on organic-inorganic hybrid perovskites using THz time-domain spectroscopy
3. 学会等名 The 8th International Symposium on Surface Science (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

1 1. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

計0件（うち出願0件 / うち取得0件）

1 2. 科研費を使用して開催した国際研究集会

計0件

2 版

1 3 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
Republic of Korea	POSTECH	Sejong Univ.	Univ. of Seoul	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-				

1 4 . 備考

Research page of laboratory
http://mswebs.naist.jp/LABs/greendevic/research/index_e.html