

機械学習を活用したペロブスカイト薄膜の成膜条件間での安定性評価

(早大院先進理工¹・早大データ科学²) ○深澤 亮¹・朝日 透¹・谷口 卓也²

Stability evaluation of perovskite thin films by machine learning (¹Graduate School of Advanced Science and Engineering, Waseda University, ²Center for Data Science, Waseda University) ○Ryo Fukasawa,¹ Toru Asahi,¹ Takuya Taniguchi²

While perovskite solar cells (PSCs) are low-cost and highly efficient, they present stability challenges due to chemical degradation. In order to find deposition process conditions that enhance the stability of PSCs, we used machine learning regression with an open database to identify deposition conditions that affect the stability of solar cells. Based on this insight, we fabricated perovskite thin films with different deposition conditions and compared the degradation behavior between the different films as read by XRD measurements. From these results, we discuss the relationship between the stability of perovskite solar cells and the stability of perovskite thin films.

Keywords : Perovskite Solar Cells; Machine learning; Stability

ペロブスカイト太陽電池は低コストかつ高効率である一方、化学的劣化による安定性の課題がある。太陽電池の安定性は、各機能層の材料だけでなく成膜条件にも大きく左右されるが、全層の条件を一度に考慮すると膨大な組合せが存在する。そのため、効率的な開発にはデバイス作製前に薄膜の安定性を評価し、重要な因子を特定することが望まれる。デバイスデータは公開データベースが整備されて一方で、薄膜データは小規模なデータセットに依存している。本研究では、デバイスに関する公開データベース The Perovskite Database¹⁾を活用し、MAPbI₃をモデル系とした機械学習回帰を実施した。

まずデバイスの安定性指標 $\ln(\text{TS80m})$ ²⁾に対し既報³⁾のエンコーディング法を用いて回帰分析を実施した(図1a)。その結果、溶媒の種類、熱アニール工程の時間および温度がデバイス安定性に重要なプロセスパラメーターであることが判明した。これらの条件を調整して作製した薄膜をX線回折測定で評価した結果、特定した3つのプロセスパラメーターが薄膜の安定性にも影響を及ぼすことを確認した(図1b)。本研究は、薄膜評価がデバイス安定性の向上に不可欠であることを示すものである。

1) T. J. Jacobsson, *et al.*, *Nat. Energy*, **2022**, 7, 107-115. 2) Z. Zhang, *et al.*, *Nat. Comm.*, **2022**, 13, 7639. 3) R. Fukasawa, *et al.*, *Energy Adv.*, **2024**, 3, 812-820.

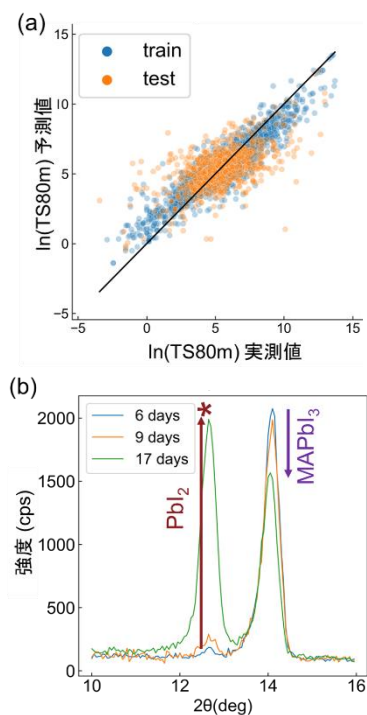


図 1. (a) 太陽電池の安定性回帰 (b) 40 分加熱した MAPbI₃ 薄膜の XRD ピークの時間変化