

DX 計測と機械学習によるペロブスカイト太陽電池の特性評価

Evaluation of Perovskite Solar Cell Characteristics

via Digital Transformation (DX) Measurements and Machine Learning

阪大院工¹, ICS-OTRI², JST-CREST³ ◦佐伯 昭紀^{1,2,3}Osaka Univ.¹, ICS-OTRI², JST-CREST³ ◦Akinori Saeki^{1,2,3}

E-mail: saeki@chem.eng.osaka-u.ac.jp

軽量・高効率・低コストな次世代太陽電池として、鉛もしくは非鉛ペロブスカイト太陽電池 (PSC) に大きな期待が集まっている。溶液から塗布で簡便に作製できる反面、材料組成やプロセスや作成時の環境因子のわずかな変化によって活性層の特性が大きく変わるが、その完全な理解には至っていない。また、塗布型・非鉛・有機無機ハイブリッド半導体 (Sn に加えて Bi, Sb, Ga など含む) の探索もその膨大な元素・材料・プロセスに起因して広大な領域が残されている。したがって、光電変換材料探索研究を加速する上で、自動実験と機械学習によるデジタル・トランスフォーメーション (DX) は有効なアプローチである^[1]。

我々のグループでは薄膜や粉末半導体の光電変換性能を高速かつ高精度に実験スクリーニング可能な、自動 TRMC (time-resolved microwave conductivity) 測定装置を開発した^[2]。Fig. 1a に示すように、本システムはロボット、TRMC 測定部、光吸収・発光分光システムおよび光学顕微鏡部から構成され、1 サイクル約 5 分で測定可能なハイスループットシステムである。光吸収・発光スペクトルから自動でバンドギャップを計算し、光学顕微鏡像も自動で解析し、多角的な特徴量を提供できる。

本システムを用いて、Cs-Bi-Sb-I から成る塗布型太陽電池の新元素組成・成膜プロセスの開拓を行った。12 種類の組成、有機塩添加剤と濃度 (4×3)、異なる熱アニール温度(4)の計 12×4×3×4=576 種類の薄膜を作製し、本自動システムによる実験スクリーニングを行った。得られたデータの光学顕微鏡の明暗分布 (Brightness STD) と TRMC 信号強度 ($\Delta\sigma_{\max}$) の解析から、高い $\Delta\sigma_{\max}$ かつ低い Brightness STD の薄膜が高い変換効率 (PCE) を示すことを見出した (Fig. 1b)。これらプロセス探索の結果、0.38%であった Cs-Bi-Sb-I 太陽電池の変換効率を 2.36%まで向上させることに成功した (Fig. 1c)。

講演では 2D・3D ペロブスカイト太陽電池のプロセス可視化と変換効率へ与える影響についても議論する^[3]。

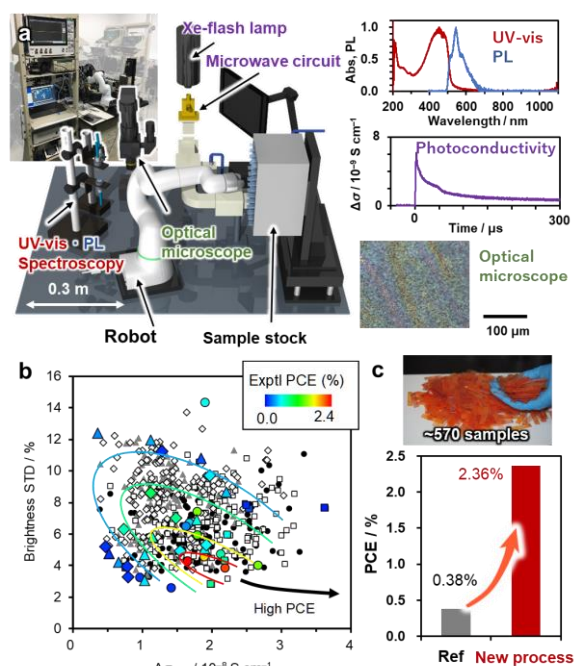


Fig. 1. (a) Automated TRMC, UV-vis absorption, PL spectroscopy system. (b) Plot of brightness STD vs $\Delta\sigma_{\max}$ obtained for 576 films of Cs-Bi-Sb-I semiconductors. (c) Pictures of films and improvement of PCE based on the automated experiments.

- [1] Reviews: (a) A. Saeki, K. Kranthiraja, *Jpn. J. Appl. Phys.* **2020**, *59*, SD0801. (b) A. Saeki, *Polym. J.* **2020**, *52*, 1307. (c) Y. Miyake, A. Saeki, *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, *12*, 12391.
 [2] (a) C. Nishikawa, R. Nishikubo, F. Ishiwari, A. Saeki, *JACS Au* **2023**, *3*, 3194. (b) YouTube: <https://www.youtube.com/watch?v=qqHKA41UtRY>
 [3] R. Shimono, R. Nishikubo, M. Pylnev, F. Ishiwari, A. Wakamiya, A. Saeki, *ACS Appl. Energy Mater.* **2023**, *6*, 9381.