高速スクリーニングと機械学習による非鉛ペロブスカイト太陽電池材料の探索

（阪大院工 [1]）○佐伯 昭紀 [1]

Exploration of Non-Lead Perovskite Solar Cells by Fast Experimental Screening and Machine Learning

([1]*Graduate School of Engineering, Osaka University*) ○Akinori Saeki[1]

Connecting data science (machine learning) with experimental methods is critical for accelerating material science research. Herein, we report a multivariate analysis for exploring A-site organic cation mixing in tin iodide perovskite ($ASnI_3$) solar cells (PSC), which are the most suitable Pb-free PSC candidates. To address the common drawbacks of Sn perovskites (facile oxidation of Sn^{2+} to Sn^{4+} and large degree of mixing), we proposed an efficient experimental screening method to predict the power conversion efficiency (PCE) of $ASn(II)I_3$, in which A is a ternary or quaternary mixed organic cations. The high correlation coefficient of our model (0.953) and experimental validation (0.982) allowed us to identify a new $(FA_{0.92}IM_{0.08})_{0.9}PEA_{0.1}SnI_3$ Sn-PSC with a PCE of 7.22%. Our results provide a basis for exploring A-site cation mixing in Sn-PSCs for improving their performance.

Keywords : Non-lead Perovskite Solar Cells; Machine Learning; Microwave Conductivity; Bismuth and Antimony

鉛ペロブスカイト太陽電池の実用化が近づいている一方、非鉛太陽電池材料の探索はまだ未踏の領域である。Sn 、Bi、Sb、Cu、Si、Ga、Ag といったものが候補として考えられ [1,2]、特に Pb と同族の Sn は非鉛ペロブスカイト太陽電池の中で比較的高い効率が達成されている。しかし、Sn は酸素や水に対して非常に不安定である点が大きな問題であり、他の元素太陽電池はその組み合わせ種類や多岐にわたる溶液プロセスの自由度に加え、太陽電池の作製・評価に関わる労力・時間のため未だ研究は進んでいない。時間分解マイクロ波伝導度（time-resolved microwave conductivity: TRMC）は電極レスで高速・安定に太陽電池性能に相関する過渡伝導度信号を得ることできる [3]。本講演では、本手法と多変量解析を組み合わせた独自の探索法とその結果について議論する。特に不安定な Sn ペロブスカイト太陽電池の A サイトカチオン混合について、安定な 4 価 Sn の実験データを基にした 2 価 Sn ペロブスカイト太陽電池性能の予測に関する最近の成果を紹介する [4,5]。

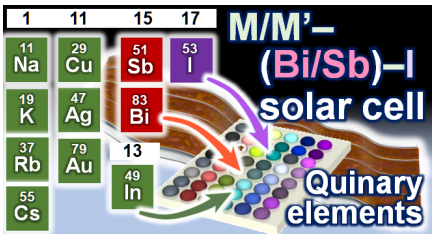

Fig. 1. Exploration of multi-element solar cell materials

1) F. Iyoda, R. Nishikubo, A. Wakamiya, A. Saeki, *ACS Appl. Energy Mater.* **2020**, *3*, 8224. 2) C. Nishikawa, R. Nishikubo, F. Ishiwari, A. Saeki, *ACS Appl. Energy Mater.* **2022**, *5*, 6291. 3) A. Saeki, *Polym. J.* **2020**, *52*, 1307. 4) E. Nakanishi, R. Nishikubo, A. Wakamiya, A. Saeki, *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, *11*, 4043. 5) E. Nakanishi, R. Nishikubo, F. Ishiwari, T. Nakamura, A. Wakamiya, A. Saeki, *ACS Materials Lett.* **2022**, *4*, 1124.

© The Chemical Society of Japan