

機械学習による逆構造有機薄膜太陽電池の効率予測

Design of efficient inverted organic solar cells by machine learning approach

○中嶋 悠翔¹, 永瀬 隆^{1, 2}, 小林 隆史^{1, 2}, 内藤 裕義^{1, 2}

(1. 大阪府大工, 2. 大阪府立大分子エレクトロニックデバイス研)

○Y. Nakajima¹, T. Nagase^{1, 2}, T. Kobayashi^{1, 2}, H. Naito^{1, 2}

(1. Osaka Pref. Univ., 2. RIMED)

E-mail : yuto.nakajima.oe@pe.osakafu-u.ac.jp

1. はじめに 逆構造有機薄膜太陽電池 (inverted OPV)は可視光域で透明である ZnO などの金属酸化物を陰極に用いている。そのため、poly(3,4-ethylenedioxythiophene):poly(styrenesulfonate) (PEDOT:PSS)を陽極に、反応性の高い Ca などを陰極に用いる従来の順構造 OPV と比べ電力変換効率 (PCE)が高く、大気安定性が良好、長寿命、フレキシブルという優位性がある[1]。しかし、OPV のバルクヘテロ接合に用いるドナー性およびアクセプター性半導体の光電物性を反映させた太陽電池特性の定式化は困難であるため、効率予測も困難である。

本研究では、機械学習のアルゴリズムの一つであるランダムフォレストを用いて、実際の inverted OPV の実験結果を機械学習により解析することで OPV の効率予測を試みた。

2. 解析 cathode/electron transport layer/bulk heterojunction/hole transport layer/anode を素子構造とし、特徴量として各材料の HOMO、LUMO、バンドギャップ、膜厚など、これらの記載のある 317 種類の inverted OPV に関する論文から特徴量を収集し、ランダムフォレストにより開放起電力(V_{oc})、短絡電流密度(J_{sc})、曲線因子(FF)、PCE に関連のある特徴量を解析した。

3. 結果 アクセプター性半導体に[6,6]-pheynl-C₇₁-butyric acid methyl ester (PC₇₁BM)を用いた OPV のドナー性半導体のエネルギー構造に対するランダムフォレストによるPCE予測をFig. 1に示す。ランダムフォレストによるPCE予測が、文献[2]によるPCE予測を良く再現しており、Fig. 1からドナー性半導体材料が1.8eV付近に最適なBand Gapを有することが分かる。文献[2]によるPCE予測が実際の実験結果と良く一致することが報告されており[3]、ランダムフォレストによる特性予測と文献[2]の結果がほぼ一致することは妥当な結果である。

ドナー性半導体にpoly[(ethylhexyl-thiophenyl)-benzodithiophene-(ethylhexyl)-thienothiophene] (PTB7-Th)を用いたOPVのアクセプター性半導体のエネルギー構造に対するランダムフォレストによるPCE予測をFig. 2に示す。Fig. 2からバンドギャップが1.5eV程度、LUMOが4.1eV程度のアクセプター性半導体であればPCEは

10%を超えることが期待できる。これまでにアクセプター性半導体のエネルギー構造に対するOPVのPCE予測は報告されておらず、こうした知見は新規材料開発において重要な指針となる。

当日は、 V_{oc} , J_{sc} , FF についての解析結果とともに、デバイスシミュレーション結果の機械学習による解析から得られた V_{oc} , J_{sc} , FF, PCE と電子移動度、正孔移動度、二分子再結合定数、活性層膜厚との関係性についても議論する。

4. 参考文献 [1] S. K. Hau *et al.*, J. Mater. Chem. **18**, 5113 (2008). [2] M. C. Scharber *et al.*, Adv. Mater., **18**, 789 (2006). [3] T. Otsura *et al.*, J. Nanosci. Nanotechnol., **16**, 3349 (2016).

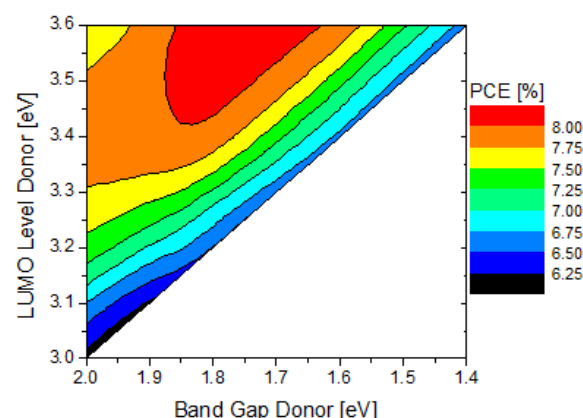


Fig. 1 Counter plot showing the predicted efficiency of inverted donor:PC₇₁BM solar cells.

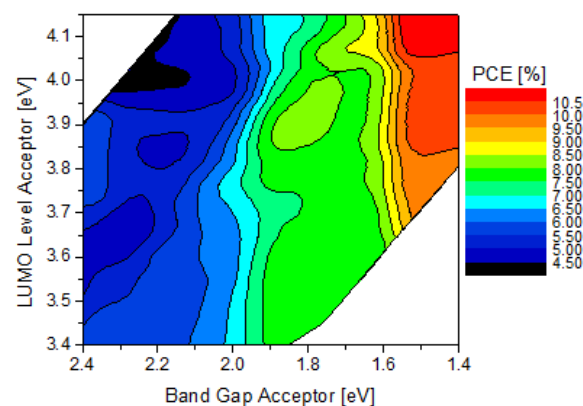


Fig. 2 Counter plot showing the predicted efficiency of inverted PTB7-Th:acceptor solar cells.