AI 予測最適化手法を用いたペロブスカイト/PbS コロイド量子ドット 中間バンド太陽電池の逆設計

Inverse design of PbS quantum dot / Perovskite intermediate band solar cell by AI based prediction and optimization method

電通大 i-PERC&基盤理エ¹,(株)グリッド²,東大先端研³

 $^{\circ}$ (M2) 斯波 廣大^{1,2}, 坂本 克好¹, 山口 浩一¹, 沈 青¹, 岡田 至崇³, 曽我部東馬^{1,2,3}

¹Univ. of Electro-Comm. ² Grid inc., T. Sogabe, K. Yamaguchi

E-mail : sogabe@uec.ac.jp

はじめに 近年、溶液法に基づくペロブスカイト/PbS 量子ドット中間バンド太陽電池が実証され、 注目を集めている[1]。ただし、溶液法中間バンド太陽電池の変換効率は3%前後にとどまり、非 集光条件化での中間バンド太陽電池の理論変換効率 47%より遥かに低い状況になっている。本研

究はペロブスカイト/PbS 量子ドット中間バ ンド太陽電池の高効率化に向けた逆設計を 図るため、最新鋭の機械学習手法と光干渉 を考慮した量子ドット太陽電池デバイスシ ミュレーションを融合した AI 予測最適化手 法の構築(図1)を目指す。



図1 AI 予測最適化手法を用いた溶液法中間バンド 太陽電池の逆設計の仕組み

実験結果図2は、文献[1]に報告されたペロブスカイト/PbS 量子ドット中間バンド太陽電池デバ イス構造に基づきシミュレーションした結果を示している。デバイスの構造は ITO/Tio₂/PbS QD/CH₃NH₃PbBr₃(×5)/OMeTAD/Au というモノリシック設計を取り入れた。また、ペロブスカイ トと量子ドットの混合領域に5周期のペロブスカイト層と量子ドット層を交互に配置することで 中間バンド超格子構造を設けた。図2aに溶液法有機太陽電池の解析[2]に特徴とする励起子生成率

(左)と光干渉によるデバイス内の 光電場[E]²の位置分布(中)、そし て各層において換算された短絡電 流(右)を示している。また比較 のために、発電層が CH₃NH₃PbBr₃ ペロブスカイト層のみの場合(図 2b)と PbS 量子ドット層のみの場 合(未表示)と比較解析を行った。

今後、AI予測最適化を用いた逆



図2 光干渉効果を考慮した光活性層におけるデバイス特性解析:励起子生成率、電場分布と短絡電流;(a) 発電層は量子ドット/ペロブスカイト超格子からなるデバイス構造の場合;(b)発電層はペロブスカイト構造のみの場合

設計手法と中間バンドを導入したデバイスの解析とを融合したデバイスの逆設計について研究を 行い、会議の際にその結果について報告する。

[1] Hosokawa et al., Nature communications 10, 43(2019)

[2] Pettersson et al., Journal of Applied Physics 86,487(1999)