

機械学習による有機太陽電池特性からの電子物性予測

A machine-learning study on the prediction of electronic transport properties in inverted organic solar cells

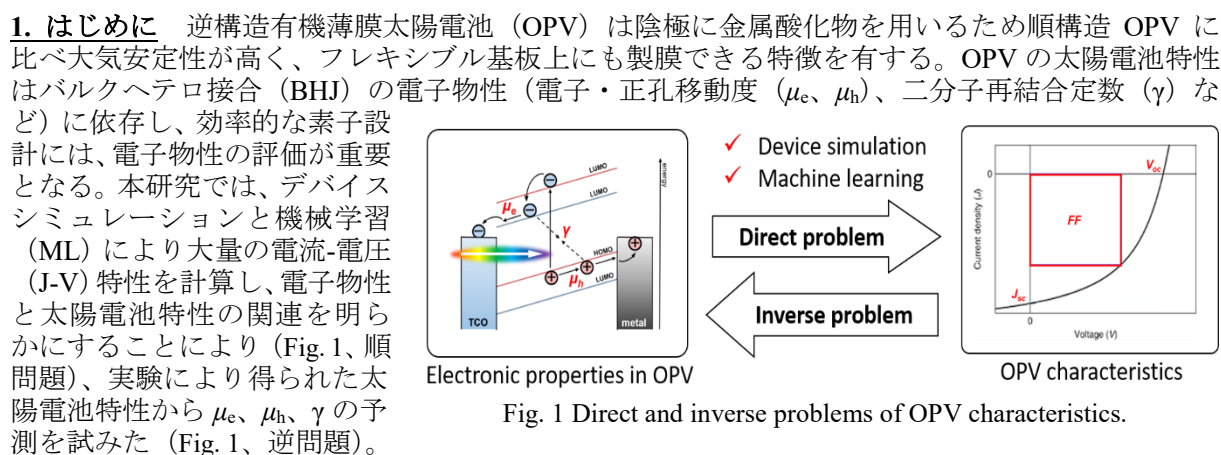
○奥野 友基¹, 永瀬 隆^{1, 2}, 小林 隆史^{1, 2}, 内藤 裕義^{1, 2}

(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. Okuno¹, T. Nagase^{1, 2}, T. Kobayashi^{1, 2}, H. Naito^{1, 2}

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

E-mail : yuuki.okuno.oe@pe.osakafu-u.ac.jp



2. 解析 デバイスシミュレーション (Atlas, Silvaco) により poly-3-hexylthiophene : [6,6]-phenyl-C₆₁-butyric acid methyl ester (P3HT:PCBM) BHJ の光吸収スペクトルを有する逆構造 OPV において、 μ_e , μ_h , γ を変化させることで、384 の J-V 特性を算出した。J-V 特性から太陽電池特性である開放起電力 (V_{oc})、短絡電流密度 (J_{sc})、曲線因子 (FF) を求め、ニューラルネットワークにより電子物性と太陽電池特性の関係を機械学習させることにより、設定した電子物性値の範囲内で太陽電池特性を予測するモデル[1]を構築した。このモデルを用い、多段グリッドサーチにより太陽電池特性から電子物性値を求める逆問題を解いた。

3. 結果 これまで、我々はOPVの電子物性評価法として変調光電流 (MPC) 法[2]や変調光起電力 (MPV) [3]を提案し、実際に動作しているP3HT:PCBM OPVの μ_e , μ_h , γ の組成依存性をFig. 2のように報告している。これらP3HT:PCBM OPVの太陽電池特性から上述の逆問題を解く手法を用いて μ_e , μ_h , γ を求めることができれば、Fig. 2の実験値と比較することができ、本手法の有用性を示すことができる。Fig. 2において、P3HT:PCBM OPVの太陽電池特性の実験値から本手法により μ_e , μ_h , γ を求めた。 μ_e , γ は実験値とほぼ同じ値を得ることができた。一方、 μ_h はP3HTの組成が40、50 wt.%の場合は、実験値よりも一桁程度大きくなった。この原因は、局在準位、直列抵抗などをデバイスシミュレーションでは無視したことにあると考えられる。BHJの組成により、 μ_h には一桁程度の差はあるものの、太陽電池特性 (V_{oc} , J_{sc} , FF) の実験値を入力するだけで、瞬時に電子物性が得られることを示せた。

当日は、P3HT:PCBM以外のOPVの電子物性予測についても報告する。

【謝辞】 本研究の一部は、科学研究費補助金 (JP17H01265, JP19H02599, JP20H02716, 21H04564) の助成を受けた。

【参考文献】 [1] 中嶋他: 第 80 回応物秋 21p-E101-4 (2019). [2] H. Nojima *et al.*, Sci. Rep. **9**, 20346 (2019). [3] 森他: 第 81 回応物秋 10p-Z11-5 (2020)

