

プロセス情報を用いた有機薄膜太陽電池設計に向けた デバイス性能予測モデルの構築

氏名 井上 泰彰

研究室名 計算システムズ生物学研究室研

主指導教員名 金谷 重彦 教授

内容梗概 (1ページ目に収めること)

有機薄膜太陽電池（OPV）は、軽量性、柔軟性、溶液プロセス適性といった利点から次世代太陽電池として注目されている。しかし OPV の性能は、材料の分子構造だけでなく、多数の製造プロセス条件にも大きく依存するため、高性能デバイスの設計は依然として困難である。近年、材料科学分野ではデータ駆動型アプローチが注目されているものの、既存研究の多くは分子記述子のみに着目し、プロセス条件やデバイス構造の影響を十分に考慮していない。

本研究では、文献から収集したポリマー構造、デバイス構造、製造プロセス、性能指標を統合した包括的な OPV データセットを構築した。分子構造は SMILES 由来のフィンガープリントにより符号化し、プロセス変数は数値化を行った。これらを用いて、PCE、J_{sc}、V_{oc}、FF を予測する複数の機械学習モデルを構築した。

さらに、欠損値を含む変数空間に対しても適用可能な多次元尺度法（MDS）に基づくクラスタリング手法を導入し、材料特性とプロセス条件の関係性を体系的に解析した。本手法により、デバイス性能に強く寄与する分子・プロセス要因の組み合わせを可視化し、溶媒選択や添加剤使用といったプロセス要因が分子構造と同程度に性能を左右することを明らかにした。

以上の結果より、分子情報とプロセス情報を統合することで OPV 性能予測モデルの精度が大幅に向上することを示した。本研究は、合理的な OPV 材料設計に向けた実践的な指針を提供するとともに、データ駆動型材料開発の重要性を示すものである。