

# 2022 年度研究ステーション研究成果報告書

## 1. 研究ステーション名 先進エネルギーデバイスと AI 融合技術研究ステーション

研究代表者名 i-パワードエネルギー・システム研究センター (iPERC) 准教授 曾我部東馬

## 2. 研究組織

### <学内構成員>

電気通信大学	i-パワードエネルギー・システム研究センター	准教授	曾我部 東馬
電気通信大学	i-パワードエネルギー・システム研究センター	特任教授	早瀬 修二
電気通信大学	i-パワードエネルギー・システム研究センター	研究員	小野 洋
電気通信大学	基盤理工学専攻・電子工学	教授	山口 浩一
電気通信大学	基盤理工学専攻・光工学	教授	沈 青
電気通信大学	基盤理工学専攻・電子工学	准教授	宮下 直也
電気通信大学	基盤理工学専攻・電子工学	助教	坂本 克好

### <学外構成員>

東京大学 先端科学技術研究センター 教授 岡田 至崇  
国立大学法人筑波大学 特命教授 森賀 俊典

## 3. 2022 年度の研究の特筆すべき成果

本年度の特筆すべき成果は主に下記 2 点となる。

### 成果 1) ペロブスカイトリガンド付き PbS 量子ドットの光学特性と移動度解析

近年の実験により、ペロブスカイト型配位子 PbS 量子ドット (QDs) の高い移動度が効率的な太陽電池への応用に役立つことが示唆されている。しかし、第一原理モデリングによるメカニズムの理論的解明はまだ不十分である。本研究では、ペロブスカイト配位子 PbS (QD) 配列における電子的・光学的・温度依存性導体移動度を非平衡グリーン関数法 (NEGF) と分子動力学法 (MD) -Landauer アプローチを組み合わせた第一原理密度汎関数理論 (DFT) を用いて計算した。その結果、ホルムアミジニウム (FA) 配位子 QDs は Cl 配位子 QDs に比べて高い移動度と光吸収を示すことがわかった。この違いは、中間バンドの特徴的な電子構造に起因する可能性がある。

### 成果 2) 液相成長 (LPD) 法を用いて酸化鉄膜被覆シリコン光電極を作製し、低電位領域での光応答の確認

東京大学先端科学技術研究センターとの協力体制のもと半導体電極を用いた光-化学エネルギー変換素子の作製及びその電気化学特性評価を実施した。昨年度に引き続き、水の光分解用電極を LPD 法で作製した。シリコン基板上に被覆する酸化鉄の成膜・堆積条件を詳細に検討するため、LPD 法で使用する母液 ( $\beta$ -FeOOH・フッ化水素アンモニウムの混合液) の濃度とホウ酸の濃度及び母液とホウ酸の混合比・基板の浸漬時間などを系統的に変化させ試料を作製した。LPD 法でシリコン基板上に堆積させた膜は堆積時 FeOOH の状態であり、これを大気中で 400°C 以上の温度で加熱処理することで酸化鉄 (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) へ変化していることが XPS 分析によって確認された。本研究で使用した LPD 法での成膜速度は母液の FeOOH の濃度およびホウ酸の濃度とこれら溶液の混合比に強く依存することが判明した。また浸漬時間がある程度長くなると膜厚が時間に比例しなくなる傾向が見られた。試料電極の電流-電圧測定から低電位領域での光応答が確認された。

本研究で作製した電極の将来的な用途として高感度の光センサーとしての応用など広く様々な分野での利用が期待できる。

#### 4. 2022年度の研究成果の公表実績

1. 「エネルギー最適化に向けたリスク評価型強化学習手法の開発に成功～不確実な電力需要や天候のもとでも効果的に運用可能～」電通大ニュースリリース(2022/7/28)
2. 「AI最大の課題「フレーム問題」解決の糸口をグリッドが開発」ロボスタ(2022/8/2)

#### 5. 外部資金の獲得状況

##### 1. 受諾研究(NEDO)

「太陽光発電主力電源化推進技術開発／太陽光発電の新市場創造技術開発／壁面設置太陽光発電システム技術開発(ビル壁面開口部向けシースルー太陽電池の開発)」

代表者名 曾我部 東馬 直接経費 11,539,000円・間接経費 1,730,500円.

##### 2. 共同研究(株式会社グリッド、国立大学法人東京大学)

「エネルギー環境分野における数理モデルと人工知能融合」

代表者名 曾我部 東馬 直接経費 4,545,500円・間接経費 454,500円

#### 6. 今後の研究発展

2022年度は、株式会社グリッドとの共同研究において、強化学習アルゴリズムにリスク評価技術とアンサンブル学習を適用することで不確実な環境におけるエネルギー最適化問題をより高い精度で解決できることを示し、カーボンニュートラルの実現に向けた「スマートグリッド」最適化によるエネルギーの有効活用への大きな足がかりとなった。2023年度は、下記の点に注力しAIを融合した先進エネルギーデバイス技術の開発を推進していく。

- ① 中間バンドは散乱による緩和の余分なチャネルを提供し、それゆえキャリア輸送を妨げる可能性がある。これがペロブスカイト型配位子QD太陽電池の今後の開発の指針になる。
- ② 液相成長(LPD)法を用いて作製した酸化鉄膜被覆シリコン光電極の将来的な用途として、高感度の光センサーとしての応用など広く様々な分野での利用が期待できる。

#### 7. 発表論文等

「雑誌論文(査読あり)」:

1. Yusuke Oteki, Naoya Miyashita, Maxime Giteau, Kento Kitahara, Kodai Shiba, Tomah Sogabe, Yoshitaka Okada; "Enhanced current generation in quantum-dot intermediate band solar cells through optimizing the position of quantum dot layers", *Optical Materials*:X, Volume16, 2022.
2. Hibiki Yoshida, Katsuyoshi Sakamoto, Naoya Miyashita, Koichi Yamaguchi, Qing Shen, Yoshitaka Okada, Tomah Sogabe; "Ultrafast inverse design of quantum dot optical spectra via a joint TD-DFT learning scheme and deep reinforcement learning", *AIP Advances*, Volume12, Issue11, 2022.
3. Tatsugi Sho, Miyashita Naoya, Tomah Sogabe, Yamaguchi Koichi; "Demonstration of in-plane miniband formation in InAs/InAsSb ultrahigh-density quantum dots by analysis of temperature dependence of photoluminescence", *Japanese Journal of Applied Physics*, Volume61, Number10, 2022.
4. Tomah Sogabe, D. Malla, C-C. Chen, Katsuyoshi Sakamoto; "Attention and masking embedded ensemble reinforcement learning for smart energy optimization and risk evaluation under uncertainties", *Journal of Renewable and Sustainable Energy*, Volume14, Issue4, 2022.
5. Chao Ding, Dandan Wang, Dong Liu, Hua Li, Yusheng Li, Shuzi Hayase, Tomah Sogabe, Taizo Masuda, Yong Zhou, Yingfang Yao, Zhigang Zou, Ruixiang Wang, Qing Shen; "Over 15% Efficiency PbS Quantum-Dot Solar Cells by Synergistic Effects of Three Interface Engineering", *Reducing Nonradiative Recombination and Balancing Charge Carrier Extraction*, *Advanced Energy Materials*, Volume12, Issue35, 2022.
6. Tomah Sogabe, Kodai Shiba, Katsuyoshi Sakamoto; "Hydrodynamic and Energy Transport Model Based Hot Carrier Effect in GaAs pin Solar Cell", *Electronic Materials*, Volume3, Number2, 2022.

### 「学会発表」：

1. Kodai Shiba, Koichi Yamaguchi, Qing Shen, Shuzi Hayase, Yoshitaka Okada, Tomah Sogabe; "Inverse design of perovskite/PbS quantum dot intermediate band solar cells", PVSEC-33, 2022/11/13-17, Online.
2. Kenta Kumakura, Katsuyoshi Sakamoto, Qing Shen, Naoya Miyashita, Tomah Sogabe; "Analysis of electronic and optical properties and mobility simulation of perovskite ligand passivated PbS quantum dot", PVSEC-33, 2022/11/13-17, Online.
3. 斯波 廣大, 山口 浩一, 沈 青, 早瀬 修二, 岡田至崇, 曾我部 東馬; "光干渉効果を考慮したシースルー型ペロブスカイト/PbS量子ドット中間バンド太陽電池の逆設計と作製", 第83回 応用物理学会秋季学術講演会, 2022/9/20-23, オンライン.
4. 熊倉 健太, 坂本 克好, 曾我部 東馬; "ペロブスカイト配位子で不動態化されたPbS量子ドットの電子および光学的特性と移動度シミュレーションの分析", 第83回 応用物理学会秋季学術講演会, 2022/9/20-23, オンライン.
5. 吉田 響, 坂本 克好, 山口 浩一, 沈 青, 岡田 至崇, 曾我部 東馬; "量子ドットの光物性における強化学習逆設計手法の応用", 第83回 応用物理学会秋季学術講演会, 2022/9/20-23, オンライン.

### 「招待講演発表」：

1. 曾我部東馬; "再生可能エネルギーシステムにおけるリスクヘッジ型 AI 最適化手法の開発と展望", 第2回 電気通信大学のカーボンニュートラル戦略 電気通信大学産学官連携センター主催, 2023/1/19, オンライン.
2. 曾我部東馬; "Research examples in i-PERC", The 9th UEC Seminar in ASEAN fiscal 2022 UEC ASEAN 教育研究支援センター主催, 2022/12/10, オンライン.
3. 曾我部東馬; "AI 予測最適化手法を用いた窓用透明太陽電池の設計と開発", 環境科学会 2022 年会シンポジウム9 (公社)環境科学会主催, 2022/9/9, オンライン.
4. 曾我部東馬; "AI を用いた透明型太陽電池の開発と水素生成デバイスの設計", 2022 年度 SSDS/JMAC 技術講演会 日本モーダル解析協議会(JMAC)主催, 2022/9.8, オンライン.

「図書」：なし

「受賞」：該当なし

「特許出願」：該当なし

### 「その他」

先進エネルギーデバイスと AI 融合技術研究ステーション(EDITAS)ホームページ

<https://www.editas.org/home>