

# 머신러닝을 활용한 플라즈몬 페로브스카이트 태양전지 효율 검증

문예총, 유승주, 강가사گار 샤르마 가우델, 하사나 사니무, 노원엽\*  
전북대학교, 에너지-AI 융합공학대학원

catalystm47@gmail.com, ysj\_0708@naver.com, gangasagar@gmail.com ,  
hasanahsanimu97@gmail.com, rho7272@jbnu.ac.kr\*

## Verification of Plasmon Perovskite Solar Cell Efficiency Using Machine Learning

Ye-Chong Moon, Seung-Ju Yu, Gangasagar Sharma Gaudel, Hasanah Sanimu,  
Won-Yeop Rho \*  
Jeonbuk National University, Graduate School of Integrated Energy-AI

### 요약

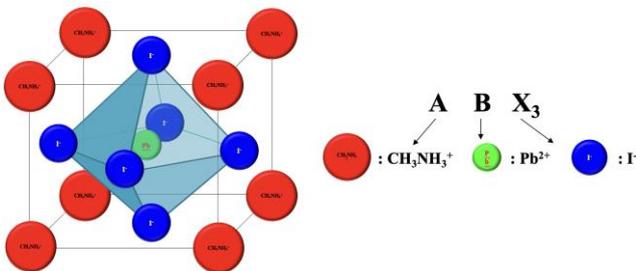
본 논문은  $\text{TiO}_2$ -NTs(이산화 타이타늄 나노튜브)와 Ag-NPs(은 나노입자)가 도입된 플라즈몬 페로브스카이트 태양전지를 실제 제작하였고,  $\text{TiO}_2$ -NTs와 Ag-NPs의 도입에 따른  $J_{sc}$ (Short-Circuit Current),  $V_{oc}$  (Open-Circuit Voltage),  $ff$ (Fill Factor),  $PCE$ (Power Conversion Efficiency)의 변화를 확인하였다. 그 결과  $\text{TiO}_2$ -NTs를 도입하였을 때에는  $J_{sc}$ 가 향상되어  $PCE$ 가 향상됨을 확인할 수 있었고, Ag-NPs가 도입되었을 때에는 “Charging effect”에 의해  $V_{oc}$ 가 향상되어  $PCE$ 가 향상됨을 확인할 수 있었으며, Pristine 데이터를 이용한 머신러닝 예측 결과를 사용하여 기존과는 다른 접근 방법을 통해 위와 같은 결과가 타당한지 검토하였다.

### I. 서론

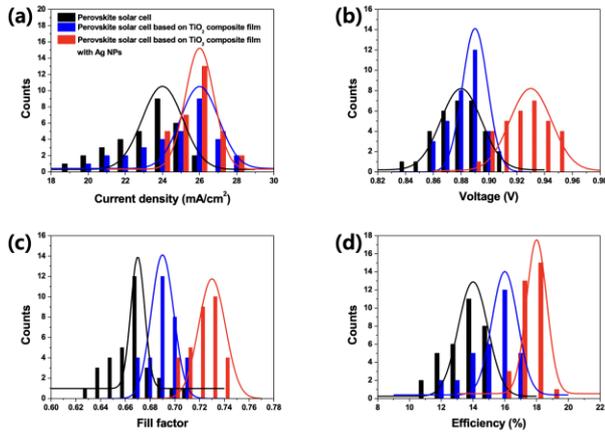
페로브스카이트는 1839년 러시아에서 처음 발견된 광물에 붙여진 이름으로서, 러시아의 광물학자인 레프 페로브스키(Lev Perovski)의 이름을 따서 명명되었다. 이후 티탄산 칼륨( $\text{CaTiO}_3$ )의 구조가 밝혀지면서  $\text{ABX}_3$ 의 일반 화학식을 가지고 있는 물질을 통칭하는 단어가 되었다.  $\text{ABX}_3$ 구조는 A-Site 양이온 1개, B-Site 양이온 1개 및 X-Site 할로젠화물 음이온 3개를 포함하는 3차원의 결정 구조로서[1], 고온의 열처리가 필요하지 않고, 용액 속에 양이온과 음이온으로 구성된 기반 물질을 섞어 코팅만 하면 되기에 생산단가가 낮아 최근 태양전지 개발 및 연구에 사용되고 있다. 우리는 이 페로브스카이트 태양전지에  $\text{TiO}_2$ -NTs와 Ag-NPs를 도입하여 효율을 증대시킨 플라즈몬 페로브스카이트 태양전지를 제작하였고, 이러한 효율 증대의 주된 원인과 feature 간 상관관계를 머신러닝을 통해 기존 검증방식과는 다른 관점으로 검증하였다.

### II. 본론

실제 실험을 통해 얻은 세 종류의(Pristine,  $\text{TiO}_2$ -NTs, Ag-NTs) 180개(60개 \* 3) 데이터를 검증하기 위해서, 실험 환경과 셀 접합 순서(Cell Stack Sequence)가 같은 데이터를 ‘The Perovskite Database Project’에서 수집하였으며, 이는 42,497개의 데이터 중  $\text{TiO}_2$ -c| $\text{TiO}_2$ -mp|Perovskite( $\text{MaPbI}_3$ )|Spiro 순서로 이루어진 4,494개의 데이터 [2]이다. 예측 모델로는 보편적으로 높은 정확도를 보이는 의사결정트리를 사용한 앙상블 모델 중 가장 많이 쓰이는 RF(RandomForest)와 XGB(XGBoost)를 사용하였으며, 모델의 적합성을 판단하기 위해 4,494개의 데이터 셋을  $J_{sc}$ 와  $V_{oc}$ , 그리고  $ff$ 를 레이블로 지정하여  $PCE$ 를 예측하도록 학습 데이터와 테스트 데이터를 8:2로 분할하여 학습한 결과 RF는 96.37%, XGB는 96.33%의 sklearn.score 값을 보여 추가적인 하이퍼파라미터 튜닝 없이도 비슷하게 둘 다 높은 정확도를 보였다. 그 후, 실제 실험 결과를 잘 예측하는지 보기 위하여 Fitting된 해당 모델을 이용하여 Pristine 데이터를 검증한 결과, XGB를 통해 score값 64.9%, MSE는 0.405, RMSE는 0.637,  $R^2$ 값은 0.511이 나왔으나, 이는  $PCE$ 의 범위가 좁아 약간의 실제 값 차이를 커다란 오차로 판단하는 부적합한 지표이며, 실제 회귀 지표로서 나타내면, 실제 실험 결과의  $PCE$  평균과 머신러닝 예측 결과의  $PCE$  평균의 오차가 0.387%( $PCE$ )로 매우 적으므로 적절하게  $PCE$ 를 예측하였다. 본 연구에서는, 이전 실제 실험 결과인 [그림 2]를 통해  $\text{TiO}_2$ -NTs를 도입할 경우  $J_{sc}$ 의 급격한 향상을 통해  $PCE$ 가 증가한 것을 발견하였고, Ag-NTs를 추가 도입한 경우  $V_{oc}$ 의 향상에 의하여  $PCE$ 가 증가한다는 것을 발견하였다.

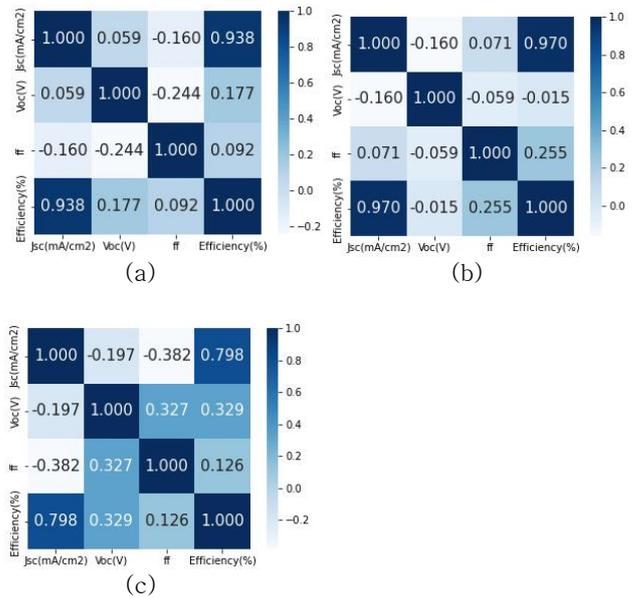


[그림 1]  $\text{ABX}_3$  결정구조 ( $\text{MaPbI}_3$ )



[그림 2] Pristine, TiO<sub>2</sub>-NTs, Ag-NPs 실험결과 히스토그램

이를 검증하기 위해서 같은 Cell Stack Sequence를 가진 기존 데이터를 활용, 실험 데이터의 TiO<sub>2</sub>-NTs와 Ag-NPs를 머신러닝으로 예측하면 해당 모델은 Pristine 상태로 예측할 것이기 때문에, 두 예측 결과 모두 실제 실험 결과 수치에 비해 낮은 PCE가 나와야 한다. 이에 전과 같이 TiO<sub>2</sub>-NTs와 Ag-NPs의 J<sub>sc</sub>와 V<sub>oc</sub>, 그리고 ff를 레이블로 지정하여 PCE를 예측한 결과 둘 다 실제 실험 데이터의 PCE값 보다 낮게 예측되어 TiO<sub>2</sub>-NTs와 Ag-NPs의 도입이 PCE에 영향을 끼친다는 것을 증명하였고, 그중 TiO<sub>2</sub>-NTs 실험 데이터를 PCE와 V<sub>oc</sub>, 그리고 ff를 레이블로 지정하여 J<sub>sc</sub>를 예측한 결과, 예상대로 실제 실험 데이터에 비해 현저히 낮은 J<sub>sc</sub>를 예측하였기에, TiO<sub>2</sub>-NTs는 J<sub>sc</sub>를 향상시켜 PCE를 향상시킨다는 것을 역으로 증명하였다. 하지만 Ag-NPs 실험 데이터를 검증한 결과는 예상과는 다르게 모델이 예측한 V<sub>oc</sub>값이 실제 실험 결과보다 높게 나왔다. 이유를 확인해 본 결과, 실제 실험 환경이 같은 구조의 태양전지의 평균 V<sub>oc</sub>값보다 낮은 경향을 띠었고, 그로 인해 자연스럽게 모델이 실제보다 더 높은 V<sub>oc</sub>를 예측한 것이다. 이러한 상황에서 Ag-NPs가 V<sub>oc</sub>에 끼치는 영향의 상관관계를 찾기 위해 실제 실험 결과값을 이용하여 피어슨 상관계수를 추출하였으며, 그 결과 TiO<sub>2</sub>-NTs가 추가된 경우 Pristine일 때에 비해 J<sub>sc</sub>의 상관계수 값이 0.938에서 0.970으로 높아져 모델의 J<sub>sc</sub> Feature에 대한 가중치가 높아지므로 J<sub>sc</sub>로 인한 PCE의 향상을 증명하였고, Ag-NPs가 추가된 경우, V<sub>oc</sub>에 영향을 주어서 PCE가 높아진다는 것을, Pristine에서 PCE와 V<sub>oc</sub>는 0.177로 약한 양의 상관관계에서 Ag-NPs가 추가된 경우 0.329로 증가하는 결과로서 Ag-NPs가 V<sub>oc</sub>의 향상에 기인하여 PCE가 증가한다는 것을 증명하였다. 추가로 TiO<sub>2</sub>-NTs의 피어슨 상관계수 표에서 PCE와 V<sub>oc</sub>의 상관계수는 -0.15로 약한 음의 상관관계에서, Ag-NPs가 추가된 경우, PCE와 V<sub>oc</sub>의 상관계수가 0.329로 급격한 증가 및 상관관계의 방향이 바뀌었음이 확인되었다. 이는 기존 데이터를 통한 모델의 V<sub>oc</sub> 예측 결과는 실제 실험 데이터보다 높게 나왔지만, 실험 환경의 차이에 따라 불가피하게 도출된 결과였으며, 실질적인 관계는 Ag-NPs의 도입으로 인한 V<sub>oc</sub>의 증가가 PCE의 증가에 기인하였다는 점을 입증한다.



[그림 3] 피어슨 상관계수표

(a) Pristine (b) TiO<sub>2</sub>-NTs (c) Ag-NPs

### III. 결론

기존 실제 실험 결과를 통해 우리는 Perovskite Solar Cell에서 TiO<sub>2</sub>-NTs는 튜브를 통해 전자를 신속히 전달하기 때문에 전자와 정공의 재결합(Recombination)을 줄이고, J<sub>sc</sub>를 증가시켜 PCE의 향상이 이루어졌으며, Ag-NPs는 'Charging effect'에 의해, V<sub>oc</sub>를 증가시켜 PCE를 증가시킨다는 결과를 얻었다. 기존까지의 방식대로라면 실제 실험 결과를 기반으로 학습 데이터와 테스트 데이터로 나누어 모델 학습 후, 테스트 데이터로 결과물을 예측하여 실제 실험값과 비교하는 방식을 사용하였겠지만, 모델 학습을 충분히 할 만큼 방대하게 실제 실험 데이터를 얻기 힘든 상황에서 기반 구조가 같은 기존 데이터를 이용하여 그 차이를 통해 결과물을 검증하는 새로운 방식으로 발상을 전환하여 사용하였다. 또한 실제 값과 예측 값이 실험 환경에 의해 격차가 생긴 경우 이를 인정하고 피어슨 상관계수를 통해 실질적인 수치가 아닌 그 관계성에 집중하여 실험 결과의 당위성을 증명 및 보충하는 방법으로 인공지능을 사용하였다. 이를 좀 더 보완하고 다양한 인공지능 기법을 추가로 사용한다면, 실제 실험을 하기 위해 방대한 실험 비용 투자와 시간의 소모 없이 높은 정확도로 결과를 예측할 수 있는 방안이 될 수 있다.

### ACKNOWLEDGMENT

본 연구는 2020년도 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지기술연구원(KETEP)의 에너지인력양성사업으로 지원받아 수행한 인력양성 성과입니다. (No.20204010600470)

### 참고 문헌

- [1] Zongmei Guo, "Machine learning stability and band gap of lead-free halide double perovskite materials for perovskite solar cells", Solar Energy, pp. 689-699.
- [2] T. J. Jacobsson et al., "The perovskite database," Document version 5.4, 2020 (<https://www.perovskitedatabase.com>).