

Polymerization
Quarterly, 2022
Volume 11, Number 4
Pages 51-64
ISSN: 2252-0449

Machine Learning Applications in Organic Solar Cells

Mohammad Ali Nikouei^{1,2}, Amir Hossein Berendjchi¹,
Ali Akbar Yousefi^{1*}, and Maghsoud Amiri²

1. Energy Core, Iran Polymer and Petrochemical Institute, P.O. Box 14975-112, Tehran, Iran

2. Industrial Management Group, Department of Management and Accounting,
University of Allame Tabataba'i, Postal Code 1489684511, Tehran, Iran

Received: 20 January 2021, Accepted: 4 July 2021

Abstract

Today, the growing need for energy due to the development of human societies is inevitable. Given the limited energy resources of the planet as well as the environmental pollution caused by the consumption of fossil fuels, the use of solar energy as a clean energy is an undeniable necessity. The use of photovoltaic converters, i.e. solar cells, is one of the effective solutions for the optimal use of this huge source of energy. So far, several studies have been conducted on the design, manufacture and optimization of solar cells. One of the most invaluable approaches is machine learning methods. Machine learning is considered as a new branch of academic science that provides valuable new information by processing existing data. Areas of application of machine learning in the design and manufacture of polymer solar cells are divided into three general categories: predicting the solar cells efficiency, selecting appropriate materials, and optimizing the manufacturing process. In this article, we have tried to briefly introduce the machine learning methods and then explain their applications in the field of designing and manufacturing solar cells. Due to several research activities, this article is limited to peer-reviewed articles in the years 2019 and 2020.

Key Words

organic solar cell,
power conversion efficiency,
machine learning,
supervised learning,
unsupervised learning

(*) To whom correspondence should be addressed.
E-mail: a.yousefi@ippi.ac.ir

کاربردهای یادگیری ماشین در سلول‌های خورشیدی آلی

محمدعلی نیکوئی^۱، امیرحسین برنج‌چی^۱، علی‌اکبر یوسفی^{۲*}، مقصود امیری^۲
 ۱- تهران، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، هسته انرژی، صندوق پستی ۱۱۲-۱۴۹۷۵
 ۲- تهران، دانشگاه علامه طباطبائی، دانشکده مدیریت و حسابداری، گروه مدیریت صنعتی،
 کد پستی ۱۴۸۹۶۸۴۵۱۱

دریافت: ۱۳۹۹/۱۱/۱۱، پذیرش: ۱۴۰۰/۴/۱۳

امروزه نیاز روزافزون به مصرف انرژی به دلیل توسعه جوامع انسانی، امری اجتناب‌ناپذیر است. با توجه به محدودیت منابع انرژی کره زمین و همچنین ایجاد آلودگی‌های زیست‌محیطی ناشی از مصرف سوخت‌های فسیلی، استفاده از انرژی خورشیدی به عنوان یک انرژی پاک ضرورتی انکارناپذیر است. استفاده از مبدل‌های فوتوولتایی (سلول‌های خورشیدی) از راهکارهای مؤثر برای استفاده بهینه از این منبع عظیم انرژی است. تاکنون پژوهش‌های متعددی درباره طراحی، ساخت و بهینه‌سازی سلول‌های خورشیدی انجام شده است. در حوزه بهینه‌سازی سلول‌های خورشیدی، روش‌های یادگیری ماشین یکی از رویکردهای مفید و مورد استفاده است. یادگیری ماشین به عنوان شاخه جدیدی از حوزه علوم دانشگاهی محسوب می‌شود که با پردازش داده‌های موجود، اطلاعات ارزشمند نوینی ارائه می‌دهد. زمینه‌های کاربرد یادگیری ماشین در طراحی و ساخت سلول‌های خورشیدی پلیمری به سه دسته کلی پیش‌بینی عملکرد سلول خورشیدی، انتخاب مواد مناسب و بهینه‌سازی فرایندهای ساخت تقسیم‌بندی شده است. در این نوشتار سعی شده است تا روش‌های یادگیری ماشین به طور اجمالی معرفی و در ادامه، کاربردهای آن در زمینه طراحی و ساخت سلول‌های خورشیدی توضیح داده شود. در این نوشتار، با توجه به مطالعات بسیار انجام‌شده، مرور مقالات نمایه‌شده بین‌المللی معتبر به سال‌های ۲۰۱۹ و ۲۰۲۰ میلادی محدود شده است.

بسیارش
 فصلنامه علمی
 سال یازدهم، شماره ۴
 صفحه ۶۴-۵۱، ۱۴۰۰
 ISSN: 2252-0449

چکیده



محمدعلی نیکوئی



امیرحسین برنج‌چی



علی‌اکبر یوسفی



مقصود امیری

واژگان کلیدی

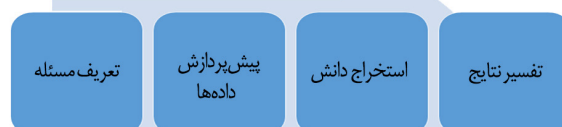
سلول خورشیدی آلی،
 بازده تبدیل انرژی،
 یادگیری ماشین،
 یادگیری نظارتی،
 یادگیری غیرنظارتی

مقدمه

در حال حاضر، انسان در تأثیرگذارترین دوره از حیات خود قرار گرفته است. دورانی که در آن، تصمیم‌گیری از ذهن‌ها به رایانه‌ها منتقل شده‌اند. یادگیری ماشین، حوزه‌ای از هوش مصنوعی بوده که دارای کاربردهای متنوعی در سایر علوم است. در علوم پزشکی، به منظور تشخیص ابتلا به بیماری‌هایی نظیر سرطان از روش‌های یادگیری ماشین استفاده می‌شود. در علوم رایانه، موتورهای جست‌وجوی اینترنتی، به‌منظور یافتن مطالب مرتبط با نتایج جست‌وجوهای انجام‌شده، از الگوریتم‌های یادگیری ماشین استفاده می‌کنند. تشخیص هرزنامه‌ها در خدمات پست الکترونیکی، کشف علاقه‌مندی‌های کاربران در وبگاه‌های فروش از طریق رصد کلیک‌های کاربر و ارائه مطالب جدید، همه و همه نمونه‌های متنوعی از سایر کاربردهای یادگیری ماشین هستند [۱].

گسترش روزافزون فناوری موجب شده است، داده‌های فراوانی در تمام زمینه‌ها در دسترس پژوهشگران قرار گیرد. با این حال پرسش اصلی این است، چگونه می‌توان اطلاعات ارزشمندی را استخراج کرد که در انبوهی از داده‌های خام نهفته است؟ یادگیری مهم‌ترین ویژگی بشری است که به‌عنوان روشی بنیادی برای کشف دانش شناخته می‌شود. یادگیری ماشین، دانشی است که با الهام از فرایند یادگیری در انسان، به کسب دانش و مهارت‌های جدید می‌پردازد، کاری که به‌دلیل توانمندی‌های رایانه‌ها در پردازش بیشتر، با فرایند به‌مراتب سریع‌تری انجام می‌شود. یادگیری ماشین، شاخه‌ای از هوش مصنوعی بوده که بنابر تعریف، دانشی در حوزه علوم رایانه است و به‌وسیله آن می‌توان با پردازش داده‌ها به اطلاعات ارزشمند نوینی دست یافت [۲].

شکل ۱، فرایند کشف دانش را نشان می‌دهد. گام‌های اول و دوم فرایند کشف دانش، به تعریف مسئله، جمع‌آوری داده‌های مورد نیاز و پیش‌پردازش آن‌ها اختصاص داده شده است. منظور از



شکل ۱- فرایند کشف دانش [۳].

پیش‌پردازش داده‌ها، حذف یا اصلاح داده‌های جمع‌آوری شده است که به دلایل مختلف نظیر خطای انسانی، مغشوش و ناقص هستند. ضروری است، این نقص‌ها در فرایند پیش‌پردازش داده‌ها اصلاح شوند. در گام سوم، یکی از الگوریتم‌های یادگیری ماشین، براساس ماهیت مسئله در حال بررسی و پیشینه پژوهش‌های گذشته، برای حل آن انتخاب می‌شود و نتایج پژوهش، صحت‌سنجی می‌شود. در آخرین گام، تفسیر نتایج راهی به سوی افزایش دانش در حوزه مسئله در حال بررسی است [۴].

یادگیری ماشین روشی است که در آن اعتبارسنجی مدل و تفسیر نتایج پژوهش، از طریق علوم ریاضی و به‌ویژه آمار و احتمالات انجام می‌شود. بر این اساس با رویکردی علمی، فرضیات علمی اولیه پذیرفته یا رد می‌شوند.

در یادگیری ماشین، پردازش داده‌ها منحصر به داده‌های عددی نیست و انواع متنوع داده‌ها نظیر متون، عکس و فیلم، از طریق مدل‌های متنوع قابل پردازش است. متن‌کاوی یکی دیگر از حوزه‌های یادگیری ماشین است که در آن به کاوش متون پرداخته می‌شود. به‌عنوان نمونه کاربردی در حوزه کاوش متون، می‌توان به خلاصه‌سازی مقالات منتشرشده در یک حوزه علم در بازه‌های زمانی چندساله و ارائه نتایج آن در قالب جداول و نمودارهای مفید، برای دست‌یابی به اشراف کامل بر پژوهش‌های انجام‌شده، اشاره کرد [۵]. همچنین، پژوهش‌یادشده می‌تواند شکاف پژوهش در حوزه علمی در حال بررسی را آشکار سازد و از نتایج آن، می‌توان برای تعریف طرح‌های پژوهشی جدید استفاده کرد.

از دیگر کاربردهای یادگیری ماشین، بررسی پیوسته اخبار علم و فناوری در زمینه علمی خاص و پردازش آن‌هاست. بدین ترتیب، به روندهای نوظهور علم در حوزه در حال بررسی می‌توان احاطه کاملی یافت، کاری که در بهترین حالت، بدون استفاده از روش‌های یادگیری ماشین به‌سختی امکان‌پذیر است [۶]. تاکنون قابلیت کشف الگو از میان داده‌ها، تنها برای بشر مشاهده شده، با وجود این ازدیاد روزافزون داده‌ها بر پیچیدگی موضوع افزوده است. در این شرایط، استخراج دانش و کشف الگو ناممکن است. از این رو، نیاز به استفاده از رایانه‌ها در استخراج الگوی میان داده‌ها انکارناپذیر است. به‌طور کلی، روش‌های یادگیری ماشین به سه دسته تقسیم شده است [۷]:

- ۱- یادگیری نظارتی (supervised learning)،
- ۲- یادگیری غیرنظارتی (unsupervised learning) و
- ۳- یادگیری تقویتی (reinforcement learning).

یادگیری نظارتی

اولین طبقه از الگوریتم‌های یادگیری ماشین، روش‌های یادگیری نظارتی است. در این روش‌ها، از طریق مجموعه‌ای از ورودی‌ها، خروجی‌های مورد نیاز پیش‌بینی می‌شوند. با استفاده از این روش، تابعی ایجاد می‌شود که ورودی‌ها را به خروجی‌های مطلوب مرتبط می‌کند. آموزش الگوریتم زمانی متوقف می‌شود که مدل به سطح مطلوبی از دقت و صحت رسیده باشد. روش‌های یادگیری نظارتی، خود به دسته‌های مختلف تقسیم می‌شوند که از میان آن‌ها می‌توان به روش‌های رده‌بندی اشاره کرد. رده‌بندی روشی برای تحلیل داده‌هاست که مدلی برای توصیف دسته‌ها و طبقه‌بندی آن‌ها ایجاد می‌کند. به عنوان نمونه، براساس پیشینه‌های افراد در بانک، این روش می‌تواند افراد متقاضی وام را به دو دسته خوش حساب و بدحساب تقسیم‌بندی کرده و سیاست اعطای وام را درباره هر فرد با توجه به پیشینه مالی وی تعیین کند. در این مثال روش‌های رده‌بندی، مدل پیش‌بینی رفتار آتی فرد را براساس پیشینه وی ارائه می‌کنند [3]. از میان تعداد متنوع روش‌های یادگیری نظارتی می‌توان به روش‌های شبکه‌های عصبی، درخت تصمیم (decision tree)، ماشین بردار پشتیبان (support vector machine)، جنگل تصادفی (random forest)، رده‌بند بیز ساده (naive Bayes classifier) و الگوریتم نزدیک‌ترین همسایه k (k-nearest neighbors algorithm) اشاره کرد.

یادگیری غیرنظارتی

در دومین دسته که از آن به عنوان یادگیری غیرنظارتی یاد می‌شود، خروجی‌ها مشخص نیستند. کار این مدل، تبدیل ورودی‌ها به اطلاعاتی است که از آن در کاربردهای عملی استفاده می‌شود. از روش‌های مرسوم این یادگیری، خوشه‌بندی (clustering) است. روش‌های خوشه‌بندی مشابه با روش‌های رده‌بندی به تفکیک و طبقه‌بندی داده‌ها می‌پردازند، با این تفاوت که در روش‌های خوشه‌بندی برخلاف رده‌بندی، دسته‌ها و تعداد آن‌ها از ابتدا مشخص نیست.

یادگیری تقویتی

سومین نوع از الگوریتم‌های یادگیری ماشین، یادگیری تقویتی نام دارد که مبتنی بر روانشناسی رفتار است. در این حالت، با عاملی روبه‌رو هستیم که با محیط در حال تعامل است و با یادگیری از این طریق می‌کوشد تا عملی بهینه را برای دستیابی به هدف انتخاب کند. این روش بر رفتارهایی تمرکز دارد که مدل باید

برای پیشینه‌کردن بهینگی انجام دهد. از کاربردهای ارزشمند این رویکرد، تصمیم‌گیری در شرایط اطلاعات محدود است. از آنجا که هدف اصلی نگارش این نوشتار، ارائه گزارشی از کاربردهای یادگیری ماشین در طراحی و ساخت سلول‌های خورشیدی پلیمری است، در ادامه سلول‌های خورشیدی پلیمری به طور مختصر مرور می‌شود.

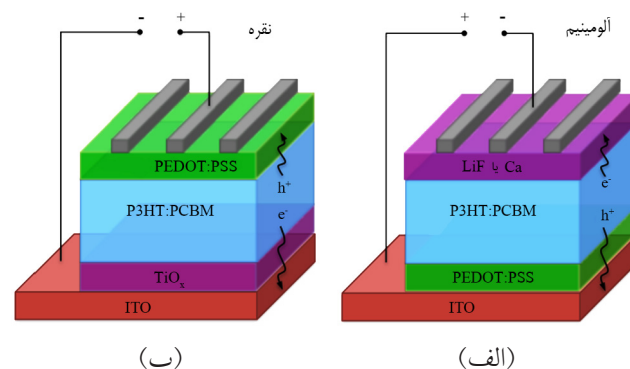
سلول‌های خورشیدی پلیمری نسل به نسبت جدیدی از مبدل‌های فوتوولتایی هستند که در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. به دلیل مزیت‌های فراوان، قابلیت زیادی برای تجاری‌سازی دارند. از معایب این نسل از سلول‌های خورشیدی، بازده کمتر تبدیل انرژی و همچنین پایداری کمتر آن‌ها نسبت به سلول‌های خورشیدی سیلیکونی تجاری است.

در حال حاضر، مطالعات زیادی درباره بهبود بازده تبدیل انرژی و نیز پایداری سلول‌های خورشیدی پلیمری انجام می‌شود. مروری بر مطالعات اخیر نشان می‌دهد، از طیف گسترده‌ای از مواد در ساخت سلول‌های خورشیدی پلیمری استفاده می‌شود. اما، انتخاب مناسب مواد و همچنین پیش‌بینی مقادیر شاخص‌های فوتوولتایی و پایداری سلول‌های خورشیدی برای تمام حالت‌های ممکن از ترکیبات با روش‌های کنونی، پیچیدگی زیادی دارد. از این رو، در مطالعات اخیر درباره طراحی و ساخت سلول‌های خورشیدی پلیمری، توجه ویژه‌ای به کاربردهای یادگیری ماشین شده است. با استفاده از این روش‌ها، از میان کلیه مواد ممکن برای ساخت سلول‌های خورشیدی، با انجام غربالگری، تعداد محدودی از مواد، برای ورود به فاز مطالعات آزمایشگاهی انتخاب می‌شوند.

در گام بعدی، انتخاب بهترین مواد از میان تعداد معدودی ترکیب، به طور عملی و در آزمایشگاه، کار دشواری نیست. با اجرای این روش انتخاب دومارحله‌ای، که ترکیبی از روش‌های نظری و عملی است، در هزینه و زمان صرفه‌جویی درخور ملاحظه‌ای می‌شود، ضمن اینکه کارایی روش و صحت مدل در سطح قابل قبولی قرار دارد.

کاربرد یادگیری ماشین در طراحی و ساخت سلول‌های خورشیدی پلیمری

امروزه با گسترش علوم رایانه و فناوری اطلاعات، روش‌هایی مؤثرتر از روش متداول سعی و خطا، برای یافتن مواد مورد نیاز در ساخت سلول‌های خورشیدی به وجود آمده است. یکی از زمینه‌های کاربرد یادگیری ماشین در حوزه بهینه‌سازی سلول‌های خورشیدی پلیمری است. همان‌طور که از نام آن‌ها پیداست، در این نسل از سلول‌های خورشیدی در قسمت لایه فعال برای جذب نور، تولید

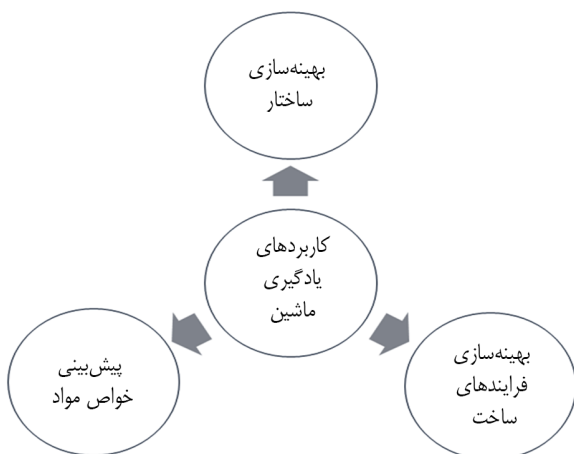


شکل ۲- ساختارهای سلول‌های خورشیدی پلیمری: (الف) ساختار عادی و (ب) ساختار معکوس [۸].

حامل‌های بار (زوج الکترون-حفره) و در نهایت جداسازی آن‌ها و همچنین، تولید جریان الکتریکی از مواد پلیمری استفاده می‌شود. برای ساخت این دسته از سلول‌های خورشیدی، معمولاً دو ساختار عادی و معکوس متصور می‌شود (شکل ۲). در ساختار عادی قطب مثبت (محل جمع‌آوری حفره)، متشکل از زیرلایه پوشش‌یافته با اکسید فلزی شفاف و رساناست که روی آن یک لایه انتقال‌دهنده حفره، معمولاً پلی (۳،۴-اتیلن دی‌اکسی تیوفن) پلی استیرن سولفونات (PEDOT:PSS) برای انتقال حفره‌های به‌دست آمده از لایه فعال، به زیرلایه پوشش‌دهی می‌شود.

در قسمت لایه فعال که در آن جذب نور، تولید اکسایتون، جداسازی و در نهایت تولید حامل‌های بار انجام می‌شود، مواد نیمه‌رسانای آلی به‌کار می‌روند. در این ساختار، در قطب منفی (محل جمع‌آوری الکترون) از فلزی با تابع عملکرد کم، نظیر آلومینیم، استفاده می‌شود. در این قسمت از سلول، فلز به‌دلیل تابع عملکرد کم، به‌سادگی الکترون را از لایه فعال و ماده پذیرنده الکترون دریافت و وارد مدار خارجی می‌کند. در نتیجه، در درون سلول جریان الکتریکی برقرار می‌شود. برای انتقال بهتر الکترون از لایه فعال (ماده پذیرنده الکترون) به کاتد و همچنین مسدود کردن عبور حفره به کاتد، معمولاً از یک لایه بافری میان لایه فعال و کاتد استفاده می‌شود. این لایه، اصطلاحاً لایه بافری کاتد نامیده می‌شود. در این قسمت نیز از یک فلز، مانند کلسیم یا هالید فلزی نظیر لیتیم فلوئورید استفاده می‌شود که به مراتب دارای تابع عملکرد کمتر از فلز موجود در کاتد است.

در سلول‌های خورشیدی پلیمری با ساختار معکوس، محل قطب‌های مثبت و منفی جابه‌جا شده است. به عبارتی، الکترون‌ها در آند، قسمتی از سلول که زیرلایه پوشش‌یافته با قلع اکسید دپه شده با ایندیم (ITO) قرار دارد و حفره‌ها در قسمت کاتد جمع‌آوری

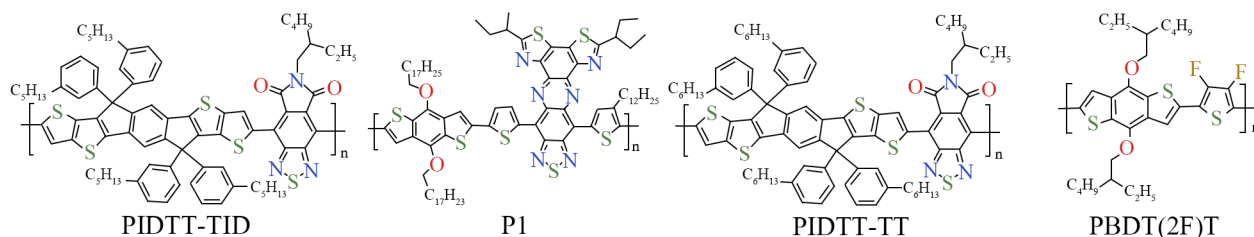


شکل ۳- دسته‌بندی کاربردهای یادگیری ماشین در طراحی و ساخت سلول‌های خورشیدی پلیمری.

می‌شوند. تفاوت این دسته از سلول‌ها با ساختار عادی در این است که لایه انتقال‌دهنده حفره (PEDOT:PSS) به قسمت بالایی سلول انتقال یافته است. روی زیرلایه، از یک لایه انتقال‌دهنده الکترون و مسدودکننده حفره استفاده می‌شود. تفاوت دیگر این ساختار با نوع عادی، استفاده از فلزی با تابع عملکرد زیاد، نظیر فلز نقره، در قسمت کاتد است. در این دسته از سلول‌های خورشیدی، از اکسیدهای فلزی نظیر روی اکسید (ZnO) یا تیتانیم دی‌اکسید (TiO_2) به‌عنوان لایه انتقال‌دهنده الکترون استفاده می‌شود.

کاربردهای یادگیری ماشین در طراحی و ساخت سلول‌های خورشیدی مطابق با شکل ۳ به سه دسته تقسیم‌بندی می‌شوند که در ادامه مقاله توضیح داده می‌شوند.

تاکنون مطالعات زیادی درباره بهینه‌سازی اجزای مختلف سلول‌های خورشیدی پلیمری به‌منظور بهبود بازده و پایداری انجام شده است. به‌عنوان نمونه، در پژوهشی به‌منظور کشف ارتباط میان بازده تبدیل انرژی و ساختار و خواص مواد پلیمری به‌کاررفته در لایه فعال، از یکی از روش‌های یادگیری ماشین به‌نام نقشه‌های خودسازمان‌ده به‌همراه داده‌های مربوط به توصیف‌کننده‌های مولکولی (molecular descriptors) مواد پلیمری سلول‌های خورشیدی استفاده شده است. توصیف‌کننده‌ها مقادیر عددی بیانگر ویژگی‌های مولکول‌ها هستند. هر توصیف‌کننده، بیانگر اطلاعات خاصی از یک مولکول است. از آنجا که تعداد توصیف‌کننده‌های مولکولی بسیار زیاد است، وارد کردن تعداد بسیار زیادی از آن‌ها در مدل پیش‌بینی‌کننده، به افزایش خطای پیش‌بینی و کاهش دقت مدل منجر می‌شود. از این رو، در این پژوهش از یکی از روش‌های آماری به‌نام تحلیل مؤلفه‌های اصلی (principal component analysis)



شکل ۴- نمونه‌هایی از ساختار مونومرهای مواد پلیمری الکترون‌دهنده در سامانه فوتوولتایی پلیمری حاوی فولرن [۹].

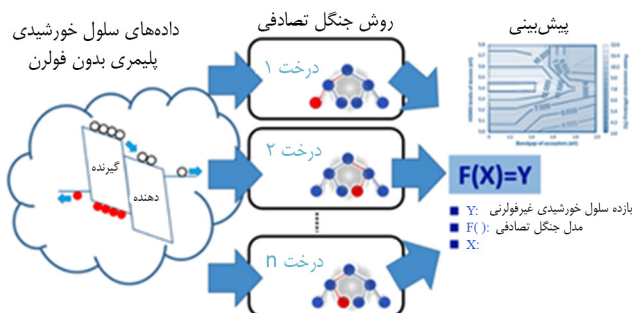
پلیمرها عمدتاً پنج‌تایی (تیوفن) و شش‌تایی (بنزن) هستند. با ازدیاد تعداد حلقه‌های آروماتیک، برهم‌کنش‌های π - π میان حلقه‌ها افزایش پیدا می‌کند. در نتیجه، انتقال حامل‌های بار (به‌ویژه الکترون) در زنجیر پلیمر با سهولت بیشتری انجام می‌شود. هرچه قدرت تحرک‌پذیری و انتقال حامل‌های بار بیشتر باشد، جداسازی حامل‌ها و در نتیجه ولتاژ و جریان سلول خورشیدی افزایش می‌یابد. این عوامل به‌طور مستقیم باعث افزایش ضریب پرتشدگی سلول خورشیدی می‌شود. افزایش حلقه‌های آروماتیک در ساختار پلیمر، مقدار انحلال‌پذیری آن را در حلال‌ها کاهش می‌دهد. در نتیجه، امتزاج‌پذیری مناسبی با سایر مواد (مواد پذیرنده الکترون) انجام نمی‌شود. افزودن زنجیرهای جانبی آلکیل اثر بسزایی بر انحلال‌پذیری پلیمر دارد و باعث می‌شود که انحلال‌پذیری آن در حلال‌ها افزایش پیدا کند. افزایش انحلال‌پذیری پلیمر به نوبه خود باعث ایجاد لایه یکنواخت‌تر و در نتیجه ارتقای خواص فوتوولتایی سلول خورشیدی می‌شود. در این پژوهش، با توجه به شکل ۵ اثر اتم‌های سنگین (غیرهیدروژن‌دار) موجود در شاخه جانبی پلیمر بر بازده سلول خورشیدی مطالعه شده است. براساس این شکل ادعا شده است، اکثر سلول‌های خورشیدی با بازده زیاد در حدود ۷ تا ۱۲ اتم غیرهیدروژن‌دار در زنجیر جانبی دارند.

از آنجا که تجسم داده‌های با ابعاد زیاد برای انسان آسان نیست، از روش یادگیری ماشین با نام نقشه خودسازمان‌ده برای این کار استفاده می‌شود. این روش ابعاد داده‌ها را از طریق کاربرد شبکه عصبی خودسازمان‌ده کاهش می‌دهد. هدف اصلی این فن، کاهش ابعاد داده‌ها به یک یا دو بعد است. در این پژوهش، نسبت تعداد اتم‌ها به تعداد زنجیرهای جانبی در ۱۲۰۳ ماده پلیمری آلی استفاده شده در ساخت سلول خورشیدی بررسی شده است. نتایج خوشه‌بندی در شکل ۵ ارائه شده است. نتایج برای این نسبت، پنج دسته ۱-۶، ۷-۱۲، ۱۳-۱۸، ۱۹-۲۴ و ۲۵-۳۰ آمده که هر دسته در شکل، با یک رنگ مجزا مشخص شده است. همان‌طور که شکل نشان می‌دهد، بیشتر مواد با کارایی تبدیل انرژی زیاد، دارای ۷-۱۲

استفاده شده است. مزیت استفاده از این روش آن است که با وجود کاهش ابعاد، صحت و اعتبار داده‌ها حفظ می‌شود.

داده‌های استفاده شده در این پژوهش، شامل مواد گوناگون پلیمری بوده که از بیش از ۵۰۰ مقاله استخراج شده است. ساختار شیمیایی تعدادی از پلیمرهای الکترون‌دهنده در شکل ۴ نشان داده شده است. در این پژوهش، خواص مواد پلیمری نظیر جرم مولکولی، مونومر، شاخص جریان‌پذیری پلیمر، ترازهای انرژی (بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال‌شده، HOMO و پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال‌نشده، LUMO)، کاف انرژی و افت انرژی فوتون و اثر آن‌ها بر شاخص‌های فوتوولتایی سلول‌های خورشیدی پلیمری نظیر حداکثر ولتاژ خروجی، چگالی جریان نوری در حالت مدار بسته، ضریب پرتشدگی (fill factor) و میزان بازده تبدیل انرژی ثبت شده است. هدف از پژوهش، بررسی اثر توصیف‌کننده‌های مولکولی: الف) وجود-عدم وجود عناصر نیتروژن، اکسیژن، گوگرد و فلورین در ساختار شیمیایی پلیمر، ب) تعداد زنجیرهای جانبی، پ) تعداد حلقه‌های آروماتیک، ت) تعداد حلقه‌های پنج‌تایی آروماتیک مشتمل بر پیرول، پیریدین، فوران و تیوفن، ث) تعداد حلقه‌های شش‌تایی آروماتیک، شامل سیکلوهگزان، بنزن و ج) نسبت بین زنجیرهای جانبی خطی و حلقه‌های آروماتیک در ساختار مولکولی پلیمر بر عامل بازده تبدیل انرژی سلول خورشیدی است. نتایج این پژوهش نشان داد، عوامل افت انرژی فوتون و تعداد اتم‌های فلورین در ساختار پلیمر بیشترین اثر را بر بازده تبدیل انرژی سلول خورشیدی دارند. همچنین ادعا شده است، سلول‌های خورشیدی با بازده تبدیل زیاد انرژی عموماً در قسمت لایه فعال، دارای پلیمر شاخه‌ای و زنجیرهای جانبی با هفت تا ده اتم عاری از هیدروژن هستند. همچنین در ساختار ماده پلیمری الکترون‌دهنده، حدود شش تا نه حلقه آروماتیک وجود دارد. با در نظر گرفتن نتایج پژوهش در طراحی و ساخت سلول‌های خورشیدی پلیمری، می‌توان بازده بیشتری به دست آورد.

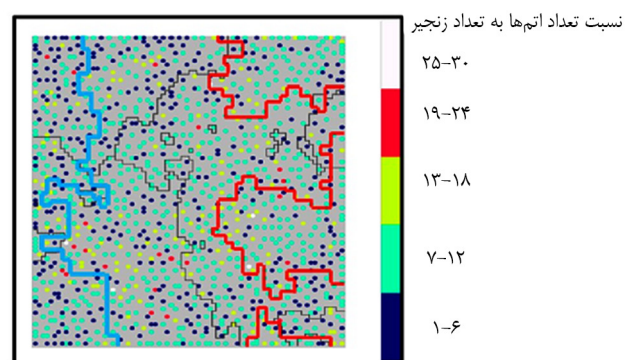
در این پژوهش، حلقه‌های آروماتیک بررسی شده در ساختار



شکل ۶- طرحواره کاربرد یادگیری ماشین در مدل‌سازی تراز انرژی در سلول خورشیدی پلیمری بدون فولرن [۲۲].

الکترون‌دهنده پلیمری از درون مقالات معتبر جمع‌آوری شده و به منظور ارزیابی عملکرد سلول خورشیدی بررسی شده است.

روش یادگیری ماشین استفاده شده در این پژوهش، روش جنگل تصادفی است که دارای دقت پیش‌بینی ۸۵٪ است. در شکل ۷، نمودار ضریب هم‌بستگی Pearson میان ورودی‌ها و خروجی‌ها نشان شده است. در این نمودار عدد ۱ نشانگر هم‌بستگی شدید مثبت و عدد -۱ نشانگر هم‌بستگی شدید منفی است. نتایج پژوهش نشان داد، کاف انرژی پذیرنده غیرفولرنی و تراز انرژی HOMO ماده الکترون‌دهنده پلیمری، مهم‌ترین پارامترها برای درک خواص نوری و فیزیکی این نوع از سلول‌های خورشیدی هستند. در این پژوهش به طور عمده، کاربرد یادگیری ماشین بر تعیین نوع ارتباط توصیف‌کننده‌های مولکولی و بازده سلول خورشیدی و همچنین بهینه‌سازی عملکرد سلول از طریق تعیین تراز انرژی مواد دهنده و پذیرنده الکترون متمرکز بود [۲۲]. در پژوهشی که درباره سلول‌های خورشیدی پلیمری بدون فولرن به چاپ رسیده است، با کمک الگوریتم‌های یادگیری ماشین، ۳۲ میلیون

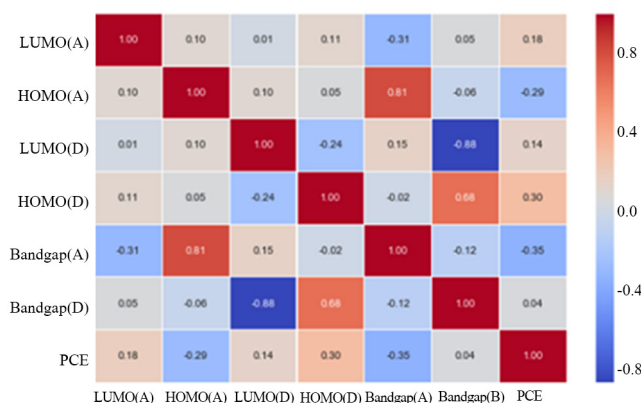


شکل ۵- نتایج خوشه‌بندی دوبعدی برای تعداد میانگین اتم‌های غیرهیدروژنی در هر زنجیر مونومر [۹].

اتم غیرهیدروژنی در زنجیر جانبی هستند [۹].

اخیراً به کارگیری سلول‌های خورشیدی حاوی مواد الکترون‌گیرنده غیرفولرنی در لایه فعال، بسیار مورد توجه قرار گرفته است و در پژوهش‌ها، بازده تبدیل انرژی بیش از ۱۰٪ با استفاده از این ترکیبات گزارش شده است [۱۴-۱۰]. در مقایسه با سلول‌های خورشیدی برپایه ترکیبات فولرنی، سلول‌های خورشیدی بدون فولرن دارای ویژگی‌هایی نظیر جذب نوری زیاد، سطوح انرژی و بلورینگی مناسب و خواص تنظیم‌شدنی هستند [۱۷-۱۵]. برای تضمین عملکرد مناسب این سلول‌ها ضروری است، پیش‌نیازهایی نظیر عدم وجود سد انرژی زیاد (اختلاف زیاد میان ترازهای انرژی اوربیتال‌های LUMO و HOMO مواد دهنده و گیرنده الکترون) در نظر گرفته شود [۲۱-۱۸]. برای دستیابی به خواص بهتر در سلول‌های خورشیدی، همسانی ترازهای انرژی اوربیتال‌های مولکولی مواد دهنده و گیرنده الکترون در طراحی سلول‌های خورشیدی بدون فولرن مدنظر قرار می‌گیرد. با وجود این، انجام محاسبات کمی با هدف انتخاب مواد دهنده و گیرنده غیرفولرنی، کاری زمان‌بر و پیچیده است. در پژوهشی شش توصیف‌کننده مولکولی شامل ترازهای انرژی HOMO و LUMO در هر دو نوع از مواد دهنده و گیرنده الکترون و همچنین کاف‌های انرژی این دو، یعنی اختلاف تراز انرژی میان اوربیتال‌های LUMO و HOMO، مدنظر قرار گرفته است. خروجی‌های مدنظر از طراحی سلول خورشیدی، حداکثر ولتاژ خروجی آن و چگالی جریان نوری در حالت مدار بسته، ضریب پرتشدگی و بازده تبدیل انرژی هستند. یادگیری ماشین مطابق با شکل ۶ توانسته است، ارتباط ورودی‌ها و خروجی‌ها را به طور مطلوب مشخص کرده و در تعیین مواد در فاز طراحی سلول خورشیدی نقش ارزنده‌ای ایفا کند. در این راستا، داده‌های مرتبط با ۱۳۵ زوج پذیرنده الکترون بدون فولرن و ۳۰ ماده

نقشه گرمایی هم‌بستگی منسوب به سلول‌های خورشیدی غیرفولرنی



شکل ۷- ضرایب هم‌بستگی میان توصیف‌کننده‌های مولکولی و خروجی‌های مدانتظار در سلول خورشیدی مطالعه شده [۲۲].

جدول ۱- خروجی‌های واقعی و پیش‌بینی شده در مطالعه سلول خورشیدی بدون فولرن [۲۳].

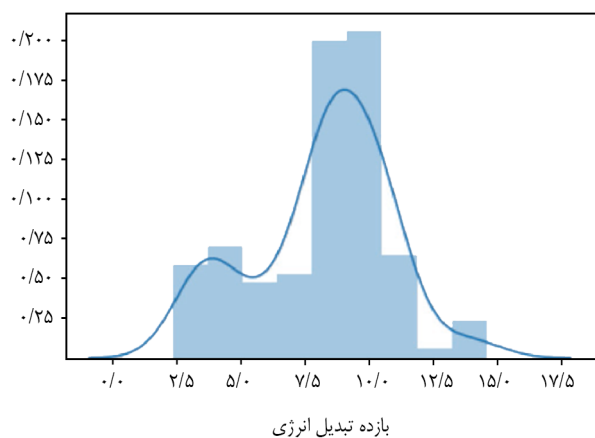
ماده استفاده شده	چگالی مدار باز، V_{oc} (V)	چگالی جریان، J_{sc} ($mA \cdot cm^{-2}$)		ضریب پرتشدگی (%)	بازده (%)	
		به دست آمده	اندازه گیری شده		به دست آمده	اندازه گیری شده
PM6:Y-ThCN	۰/۹۰۶	۲۱/۹۱	۲۰/۲۰	۶۶/۴۴	۱۳/۱۸	۱۰/۵۲
PM6:Y-ThCH3	۰/۹۵۲	۱۲/۸۹	۱۴/۸۱	۵۴/۳۰	۶/۶۷	۱۰/۴۱
PM6:Y-PhCl	۰/۸۴۵	۲۶/۸۲	۲۴/۶۸	۶۰/۷۰	۱۵/۷۱	۱۳/۳۱
PBDB-T:Y-ThCN	۰/۸۵۴	۲۱/۷۲	۲۰/۹۷	۵۹/۴۳	۱۱/۰۲	۱۱/۴۹
PBDB-T:Y-ThCH3	۰/۸۵۶	۲۲/۷۸	۲۲/۱۵	۵۶/۸۶	۱۱/۰۸	۱۱/۶۴
PBDB-T:Y-PhCl	۰/۷۶۳	۲۳/۱۴	۲۲/۶۲	۶۳/۳۷	۱۱/۱۹	۱۱/۳۲

محدوده بازده سلول‌های مورد بررسی از ۲/۳۲٪ تا ۱۴/۶٪ است. در این پژوهش، از دو سازوکار کلی برای ارزیابی خواص جداسازی و انتقال حامل‌های بار و در نهایت ایجاد ولتاژ الکتریکی استفاده شده که در شکل ۹ نشان داده شده است. براساس این سازوکارها، لایه فعال سلول خورشیدی امکان بهره‌گیری از دو پذیرنده به همراه یک ترکیب الکترون‌دهنده (شکل ۹ب) و همچنین دو ماده الکترون‌دهنده همراه با یک ترکیب پذیرنده الکترون (شکل ۹الف) را دارد. براساس این پژوهش در صورتی که از یک ترکیب الکترون‌دهنده و دو ماده پذیرنده الکترون استفاده شود که اختلاف تراز انرژی میان اوربیتال‌های LUMO آن‌ها eV ۰/۷- باشد، بازده سلول خورشیدی افزایش چشمگیری می‌یابد. براساس الگوریتم‌های یادگیری ماشین، برآورد بیشترین بازده تبدیل انرژی مربوط به سلولی است که در آن از PC71BM به عنوان پذیرنده،

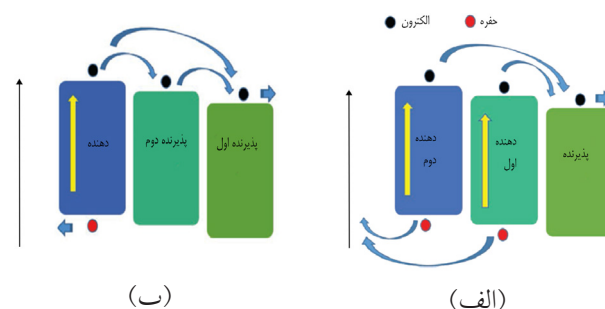
زوج دهنده و پذیرنده الکترون بررسی شدند. از میان آن‌ها شش زوج منتخب PM6:Y-ThCN، PM6:Y-ThCH3، PM6:Y-PhCl، PBDB-T:Y-ThCN، PBDB-T:Y-ThCH3 و PBDB-T:Y-PhCl با خواص فوتوولتایی مناسب (بازده زیاد تبدیل انرژی) به صورت زیر انتخاب شدند.

بدیهی است، بررسی ۳۲ میلیون زوج ماده در سامانه آزمایشگاهی امکان‌پذیر نیست و مدل یادگیری ماشین نقش منحصر به فردی در انتخاب زوج‌های دهنده و پذیرنده الکترون داشته است. در جدول ۱ نتایج واقعی که نتیجه از سنتز و مطالعات آزمایشگاهی است به همراه محاسبات پیش‌بینی شده از روش مدل‌سازی یادگیری ماشین آورده شده است. بررسی مقادیر پیش‌بینی شده به وسیله مدل و مقادیر واقعی آن نشان داد، صحت مدل یادگیری ماشین ۷۱٪ بوده است [۲۳].

در سال‌های اخیر، توجه ویژه‌ای به سلول‌های خورشیدی پلیمری سه گانه آلی، معطوف شده است. در پژوهشی، اطلاعات ۱۲۴ ترکیب مشتق شده از فولرن براساس مطالعات گذشته تهیه شده است. به کمک قابلیت محاسباتی روش جنگل تصادفی و با آموختن از داده‌های گذشته، پیش‌بینی بازده تبدیل انرژی یک سلول خورشیدی پلیمری امکان‌پذیر شده که در لایه فعال آن از ترکیب هم‌زمان سه ماده پلیمری استفاده شده است. بدین ترتیب، بینش ارزشمندی درباره سطوح انرژی اوربیتال‌های مولکولی مواد پلیمری به کاررفته ارائه شد. از میان مواد الکترون‌گیرنده انتخابی، ۱۵ عدد PC61BM و بقیه PC71BM با محدوده‌های متفاوت ترازهای انرژی اوربیتال‌های مولکولی هستند. محدوده تراز انرژی اوربیتال‌های HOMO و LUMO ترکیب PC61BM به ترتیب از eV ۲/۷- تا eV ۵/۸۵- و برای ترکیب PC71BM این مقادیر به ترتیب از eV ۳/۲- تا eV ۵/۵- متغیر بود. براساس شکل ۸



شکل ۸- نمودار بازده تبدیل انرژی مواد سازنده سلول‌های خورشیدی با ترکیب سه گانه دارای فولرن [۲۴].



شکل ۹- طرحواره ساختار سلول خورشیدی: (الف) ۱ پذیرنده و ۲ دهنده الکترون و (ب) ۲ پذیرنده و ۱ دهنده الکترون [۲۴].

شکل ۱۰- طرحواره نمودار تخریب سلول خورشیدی پلیمری [۲۶].

پلیمر پایه تیوفن PTB7-Th به عنوان الکترون دهنده و جاذب نور و ترکیب COi8DFIC به عنوان پذیرنده دوم استفاده شده باشد [۲۴]. در پژوهش دیگری دو پلیمر فلوئوردار نیمه رسانا (الکترون دهنده) با دو نوع ساختار زنجیر خطی و شاخه دار و نوعی ترکیب آلی پذیرنده الکترون، برای کاربرد در لایه فعال سلول خورشیدی استفاده شده است. به دلیل ساختار فضایی، پلیمر الکترون دهنده با زنجیر خطی نسبت به پلیمر دارای زنجیر شاخه دار تراکم پذیری بیشتری را داراست. همچنین، به علت فصل مشترک بیشتر میان پلیمر الکترون دهنده و ترکیب آلی پذیرنده الکترون در این ساختار، انتقال الکترون راحت تر انجام می شود که موجب بازده بیشتر سلول خورشیدی متناظر شده است. وظیفه روش جنگل تصادفی در این پژوهش، پیش بینی بازده سلول های خورشیدی بود. بیشترین بازده سلول خورشیدی ۱۱/۲٪ پیش بینی شده که در عمل مقدار واقعی آن ۱۱٪ گزارش شده است. این موضوع، بیانگر موفقیت مدل پیش بینی کننده است [۲۵]. در این پژوهش، استفاده از ترکیب آلی پذیرنده الکترون در لایه فعال باعث گسترده تر شدن طیف جذبی سلول خورشیدی شده است. با توجه به پیک جذبی ترکیب m-ITIC-OR-4CI در محدوده ۷۰۰ nm مقدار جذب نور در محدوده مرئی افزایش می یابد. همچنین، امکان جذب امواج خورشیدی در محدوده نزدیک به زیرقرمز نیز وجود دارد که باعث افزایش مقدار بازده سلول خورشیدی شده است. با توجه به اینکه محدوده جذب نور دو پلیمر الکترون دهنده در محدوده ۵۵۰ nm است، استفاده از ترکیب آلی پذیرنده الکترون، نه تنها باعث افزایش مقدار جذب نور در لایه فعال شده است، بلکه با توجه به تراز انرژی این ترکیب، سد انرژی زیادی برای ممانعت از انتقال الکترون وجود ندارد و در نتیجه جداسازی و انتقال الکترون به نحو مناسبی انجام می شود [۲۵].

با کمک الگوریتم های یادگیری ماشین، ۱۸۵۰ سلول خورشیدی

پلیمری به طور جامع مطالعه شده اند. در این مطالعه، اثر ۱۷ شاخص ساختار سلول خورشیدی، مواد به کاررفته در سلول، نوع زیرلایه و ماده آب بندی، روش های تعیین بازده سلول، شرایط محیطی اندازه گیری سلول، شدت منبع نور، شرایط محیطی انجام آزمون نظیر رطوبت و دما و سایر موارد بر پایداری سلول های خورشیدی پلیمری بررسی شده است. در این پژوهش، پس از برآورد سه عامل بازده اولیه تبدیل انرژی سلول خورشیدی (E_0)، مدت زمان رسیدن بازده سلول خورشیدی به ۸۰٪ مقدار اولیه آن (T_{80}) و مدت زمان رسیدن بازده سلول به ۸۰٪ مقدار پایداری آن (T_{S80}) (شکل ۱۰)، اثر ۱۷ شاخص که بخشی به ساختار سلول خورشیدی و بخشی به عوامل محیطی و شرایط اندازه گیری مربوط است بر بازده تبدیل انرژی و در نتیجه پایداری سلول خورشیدی ارزیابی شده است.

در این پژوهش، از مدل ماشین بردار پشتیبان استفاده شده است. برای آموزش مدل مزبور، از الگوریتم بهینه سازی کمینه متوالی (sequential minimal optimization) استفاده شده است. از این الگوریتم، به طور گسترده به منظور آموزش مدل های ماشین بردار پشتیبان استفاده می شود. براساس الگوریتم یادشده و جدول ۲ که نشانگر اثر عوامل مربوط به ساختار سلول خورشیدی است، ملاحظه می شود، برای افزایش بازده اولیه تبدیل انرژی سلول خورشیدی، بیشترین تأثیر مربوط به مواد به کاررفته در لایه فعال، لایه های انتقال دهنده حفره و الکترون و الکترودها و همچنین ساختار و نحوه چینش لایه ها در سلول خورشیدی است (شکل ۱۱).

در طرف مقابل ملاحظه می شود، نوع مواد به کاررفته در لایه ها (از جمله لایه فعال و لایه های انتقال دهنده الکترون و حفره) بر کاهش مقدار پایداری سلول خورشیدی اثرگذار است. براساس این جدول، انتخاب نوع ماده به کاررفته در لایه فعال و پس از آن استفاده از سلول های متوالی، بیشترین تأثیر را بر بهبود پایداری سلول های

جدول ۲- بهترین و بدترین مشخصات به دست آمده در پژوهش [۲۶].

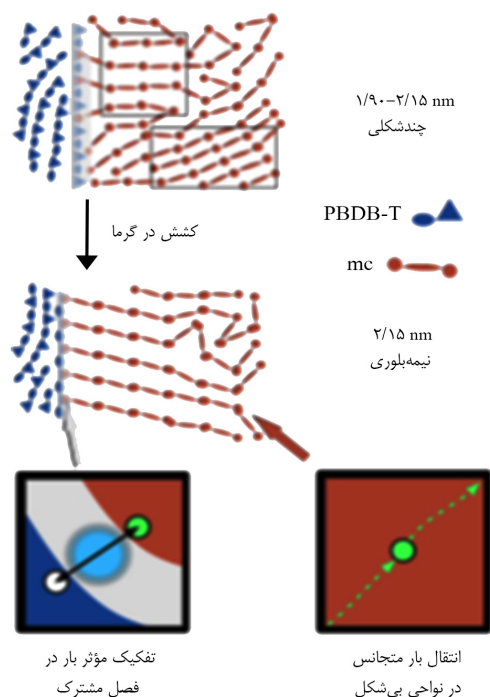
ردیف	نام	بهترین حالت	بدترین حالت
۱	لایه فعال اول	PCDTBT, PTB7 و PBDTTT-c	PBbTTT-T, P3HT
۲	پیکربندی	تاندم	معکوس
۳	لایه فعال ۲	ICBA و OXCBA	-
۴	الکتروود ۱	نقره	نقره
۵	الکتروود ۲	پلاتین	-
۶	لایه انتقال دهنده اول	گرافن اکسید	آزو
۷	لایه انتقال دهنده دوم	وانادیم اکسید	-

به طور خلاصه، در این پژوهش از یادگیری ماشین به عنوان نوعی روش غربالگری مؤثر و سریع برای انتخاب مواد مناسب سلول خورشیدی استفاده شده است. همچنین، ویژگی‌های مؤثر بر تخریب سلول خورشیدی پلیمری شناسایی شده‌اند که بر عامل‌های بازده اولیه، مدت زمان رسیدن بازده سلول خورشیدی به ۸۰٪ مقدار اولیه آن و بازده اولیه، اثر مثبت یا منفی دارند. با این روش، ماده بهینه در هر یک از لایه‌های سلول شناسایی شده است. عامل مهم در انتخاب این مواد، عملکرد و پایداری سلول خورشیدی است [۲۶]. از رویکردهای مهم در حوزه بهبود بازده تبدیل انرژی سلول‌های خورشیدی، استفاده از ترکیبات الکترون گیرنده غیر فولرنی است. این ترکیبات، به دلیل مزیت‌هایی از جمله امکان فرایندپذیری در حالت محلول، سمیت کمتر و در نتیجه مشکلات کمتر زیست محیطی و مهم‌تر از همه افزایش بازده تبدیل انرژی بسیار مورد توجه قرار گرفته است. در مطالعات جدید، اکثراً از این ترکیبات به جای فولرن استفاده می‌شود. در این باره یکی از مهم‌ترین شاخص‌ها برای افزایش بازده سلول‌های خورشیدی، کنترل شکل شناسی مخلوط پلیمر جاذب نور و ماده الکترون گیرنده غیر فولرنی در مقیاس نانومتری است. به دلیل محدود بودن قدرت تفکیک میکروسکوپ‌های الکترونی و شباهت‌های بسیار زیاد ساختار الکترونی و شیمیایی پلیمرهای نیمه‌رسانا و ترکیبات غیر فولرنی، بررسی بسیار جزئی و دقیق شکل شناسی لایه فعال یک سلول خورشیدی با این میکروسکوپ‌ها بسیار دشوار یا غیرممکن است. در پژوهشی با استفاده از الگوریتم‌های یادگیری ماشین، بررسی شکل شناسی لایه فعال یک سلول خورشیدی پلیمری که در آن از ترکیب ماده نیمه‌رسانای پلیمری PBDB-T و ماده الکترون گیرنده غیر فولرنی ITIC استفاده شده، امکان پذیر شده است. پس از تابش نور خورشید و جذب امواج آن در لایه فعال به وسیله پلیمر نیمه‌رسانا، حامل‌های بار یا اکسایتون‌ها (زوج الکترون-حفره) تولید می‌شوند. برای جداسازی اکسایتون‌ها و در نهایت تولید ولتاژ الکتریکی باید انتقال الکترون مؤثری از پلیمر نیمه‌رسانا به ترکیب غیر فولرنی انجام شود. نحوه این انتقال به دو عامل اصلی حالت‌های تشکیل بلور (چندشکلی) و نحوه آرایش یافتگی مولکولی در سطح مشترک پلیمر و ترکیب غیر فولرنی بستگی دارد. با توجه به ساختار صفحه‌ای تر ITIC نسبت به فولرن (با ساختار کروی)، اگر در فصل مشترک با پلیمر PBDB-T، آرایش یافتگی مولکولی مناسبی میان این دو رخ ندهد، انتقال الکترون میان اوربیتال‌های π دو ترکیب به طور مؤثری انجام نمی‌شود و سلول خورشیدی بازده کمی خواهد داشت. در این پژوهش بیان شده است، براساس تصاویر

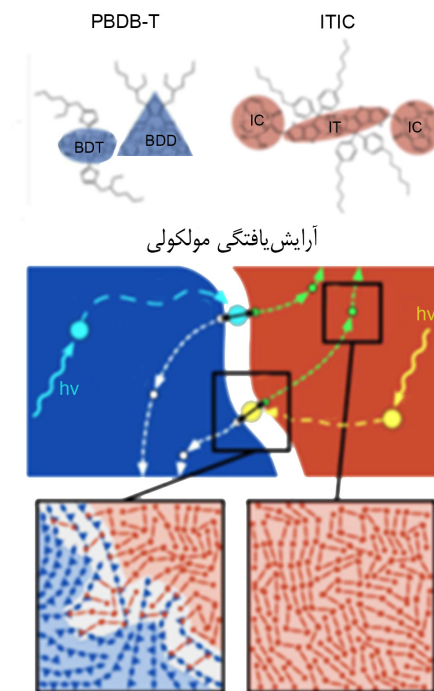
خورشیدی پلیمری دارد. استفاده از پلیمر پلی (۳-هگزیل تیوفن) (P3HT) که یکی از متداول‌ترین پلیمرهای نیمه‌رسانای استفاده شده در سلول‌های خورشیدی پلیمری بوده، اثر منفی بر پایداری سلول خورشیدی دارد. در طرف مقابل، استفاده از پلیمرهای PTB7 و PBDTTT-C اثر مثبتی بر افزایش پایداری سلول خورشیدی دارد. همچنین ملاحظه می‌شود، استفاده از پلیمر PBbTTT-T یا فتالوسیانین مس در لایه فعال نسبت به P3HT اثر منفی‌تری بر پایداری سلول خورشیدی دارد. درباره مواد انتقال دهنده الکترون یا حفره نیز به کارگیری MeO-TPD بیشترین اثر را بر کاهش پایداری سلول خورشیدی دارد. همچنین، استفاده از روی اکسید دوپه شده با آلومینیم (AZO) به عنوان ماده انتقال دهنده الکترون نیز اثر منفی بر پایداری سلول دارد. درباره چیدمان لایه‌ها، استفاده از سلول‌های متوالی نسبت به سلول‌های دارای ساختار معکوس اثر بسزایی بر بهبود پایداری سلول خورشیدی دارد. درباره روش لایه‌نشانی نیز ملاحظه می‌شود، استفاده از چاپ جوهرافشان برای لایه‌نشانی شبکه نقره باعث کاهش پایداری سلول خورشیدی می‌شود.



شکل ۱۱- ساختار سلول خورشیدی مطالعه شده [۲۶].



شکل ۱۳- طرحواره شکل‌شناسی بهینه در سلول خورشیدی پلیمری مبتنی بر PBDB-T:ITIC [۲۷].



شکل ۱۲- طرحواره اتصال ناهمگون توده‌ای در لایه جاذب سلول خورشیدی پلیمری [۲۷].

نسبت به ترکیبات معدنی، فرایندپذیری ساده، قیمت ارزان، وزن سبک و مهم‌تر از همه انعطاف‌پذیری آن‌هاست.

یکی از ویژگی‌های بسیار ضروری برای به‌کارگیری این دسته از ترکیبات در سلول‌های خورشیدی، مقدار تحرک‌پذیری حامل‌های بار در آن‌هاست. پس از جذب نور خورشید و تولید اکسایتون‌ها، چنانچه ماده نیمه‌رسانای پلیمری دارای قابلیت تحرک‌پذیری زیادی باشد، عمل جداسازی و انتقال حامل‌ها به دو قطب سلول خورشیدی با سهولت بیشتری انجام می‌شود و در نتیجه سلول خورشیدی حاصل بازده زیادی خواهد داشت. بنابراین، درباره انتخاب مواد مختلف برای کاربرد در سلول‌های خورشیدی پلیمری، آگاهی از مقدار تحرک‌پذیری حامل‌های بار در مواد نیمه‌رسانای پلیمری از اهمیت بسیار زیادی برخوردار است.

در پژوهشی به‌منظور طراحی، کشف و معرفی ترکیبات جدید آلی و پلیمری که مقدار تحرک‌پذیری بار زیادی دارند، مطالعه جامعی به کمک الگوریتم‌های یادگیری ماشین و براساس محاسبات نظریه عملکرد چگالی و دینامیک‌های مولکولی، انجام گرفته است. مدل یادگیری ماشین استفاده‌شده در این پژوهش برپایه مقادیر نظری محاسبه‌شده از مقدار تحرک‌پذیری حفره‌های ۳۲ ترکیب برپایه پلی‌تیوفن، مشتقات بنزودی‌فوران، کربازول و پرلین‌دی‌ایمید با حداکثر مقدار $10^{-1/96} \text{ cm}^2/\text{V.s}$ طراحی شده است. روش

میکروسکوپ الکترونی و به‌کمک الگوریتم‌های یادگیری ماشین، مطالعه دقیق و جزئی شکل‌شناسی مخلوط PBDB-T و ITIC در ابعاد نانو انجام گرفته است (شکل ۱۲).

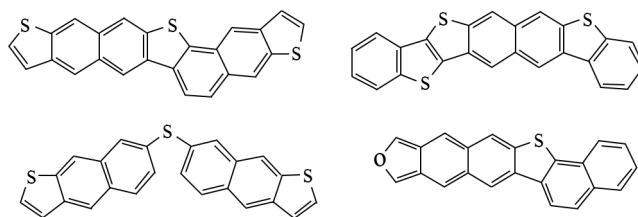
به‌کمک الگوریتم‌های یادگیری ماشین چنین نتیجه‌گیری شده است، انجام عملیات گرمایی طی فرایند تولید سلول خورشیدی باعث ایجاد آرایش‌یافتگی شاخه‌ای مانند ویژه‌ای در ITIC می‌شود. این آرایش‌یافتگی باعث می‌شود تا از یک سو طول این مولکول کوچک مشابه با زنجیر بلند پلیمر PBDB-T شود. از سوی دیگر، گروه‌های الکترون‌گیرنده ITIC در فصل مشترک با پلیمر در راستای گروه‌های الکترون‌دهنده آن قرار گیرند، در نتیجه انتقال الکترون با سهولت بیشتری انجام می‌پذیرد. این پژوهش نشان داد، آرایش‌یافتگی مزبور، به‌ویژه در مولکول ITIC (مطابق شکل ۱۳) و تغییر حالت آن از چندشکلی به نیمه‌بلوری باعث افزایش چگالی نوری سلول خورشیدی می‌شود که با کمک الگوریتم‌های یادگیری ماشین و براساس تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM) و الگوهای پراش الکترونی بررسی شده است.

اخیرا مواد نیمه‌رسانای آلی، نظیر پلیمرهای نیمه‌رسانا، به‌سبب برخورداری از قابلیت بالقوه به‌کارگیری در حوزه تجهیزات تولیدکننده انرژی از جمله سلول‌های خورشیدی بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. برخی از مزیت‌های مهم ترکیبات نیمه‌رسانای پلیمری

است. نتایج پژوهش نشان داده است، مدل Scharber پیش‌بینی ضعیفی داشته و الگوریتم یادگیری ماشین نتایج قابل قبولی برای پیش‌بینی بازده سلول خورشیدی ارائه داده است [۲۹].

نتیجه‌گیری

یادگیری ماشین یکی از شاخه‌های هوش مصنوعی است که به اکتشاف دانش و خلق الگوهای نوین از داده‌های موجود می‌پردازد. این شاخه از علم، اشتراک فراوانی با آمار، ریاضیات و رایانه دارد. در این نوشتار سعی شد، با مروری بر مجلات معتبر نمایه‌شده بین‌المللی در سال‌های ۲۰۱۹ و ۲۰۲۰، به ارائه گزارشی از پژوهش‌های انجام‌شده درباره کاربردهای الگوریتم‌های یادگیری ماشین در ساخت و طراحی سامانه‌های سلول خورشیدی پرداخته شود. نیاز جامعه به انرژی انکارناپذیر است. با توجه به منابع محدود انرژی زمین، انجام پژوهش درباره استفاده از انرژی‌های پاک، نظیر انرژی خورشیدی منافع بسیاری برای جامعه دارد. فناوری تولید و ساخت سلول‌های خورشیدی پلیمری، فرایندی است که به دلیل مصرف اندک انرژی و نیز مواد اولیه، عدم استفاده از مواد سمی و آلاینده محیط زیست، سرعت زیاد تولید و از همه مهم‌تر امکان تولید تجهیزات فوتوولتایی انعطاف‌پذیر از مزایای متعددی برخوردار است. در حال حاضر، تمرکز پژوهش‌ها در این حوزه بر افزایش بازده سلول‌های خورشیدی پلیمری است. از مهم‌ترین عوامل مؤثر بر افزایش بازده سلول‌های خورشیدی، نوع پلیمر به کاررفته، تراز انرژی اوربیتال‌های مولکول پلیمرهای دهنده و گیرنده الکترون، جذب نور مرئی مواد موجود در لایه فعال، کاهش مقاومت مواد در برابر انتقال حامل‌های بار و سطح مشترک مواد به کاررفته در لایه‌های مختلف سلول خورشیدی است. در این میان، یادگیری ماشین ابزار قدرتمندی است که در مبحث سلول‌های خورشیدی معدنی و آلی، در زمینه‌های انتخاب مواد مورد نیاز و پیش‌بینی خواص آن‌ها به طور موفقیت‌آمیز استفاده شده است. پیشینه پژوهش نشان می‌دهد، مطالعات بیشتری در زمینه سلول‌های خورشیدی معدنی انجام گرفته است که ضرورت انجام پژوهش‌های آتی در سلول‌های خورشیدی آلی را نشان می‌دهد. پیش‌بینی می‌شود، با پیشرفت علم و گذر زمان، بر کاربردهای یادگیری ماشین درباره طراحی و ساخت سلول‌های خورشیدی به منظور بهینه‌سازی بازده تبدیل انرژی این تجهیزات افزوده شود.



شکل ۱۴- ساختارهای بهینه پژوهش [۲۸].

یادگیری ماشین که در این پژوهش استفاده شده، روش جنگل تصادفی است که از رویکرد یادگیری متوالی استفاده می‌کند. از این رویکرد ترکیبی، برای انتخاب ترکیبات به کاررفته در نظریه عملکرد چگالی و دینامیک مولکولی، برای محاسبه مقدار تحرک‌پذیری حفره در مواد آلی و پلیمری بهره‌گیری شده است.

از محدودیت‌های ترکیب نظریه عملکرد چگالی و دینامیک مولکولی، محدودیت ترکیبات استفاده‌شده برای انجام محاسبات است. کاربرد روش‌های یادگیری ماشین در غربالگری برای انتخاب مواد مورد نیاز، روش مؤثری برای چیره‌شدن بر این مشکل است. تلاش‌های ارزنده‌ای در باب به کارگیری یادگیری ماشین در زمینه‌های ساخت و انتخاب مواد، با هدف یک پارچه‌سازی کاربرد آن با ساختار جاری اجرای پژوهش‌ها انجام شده است. در این پژوهش، هدف از کاربرد یادگیری ماشین در ترکیب با نظریه عملکرد چگالی و دینامیک مولکولی، ارائه مدل جایگزین و همچنین شناسایی مواد جدید دارای خاصیت تحرک‌پذیری زیاد، ذکر شده است. پس از ۶۰ تکرار مدل و اجرای ۱۶۵ گام از محاسبات دینامیک مولکولی و نظریه عملکرد چگالی، چند مولکول آلی با ساختار بهینه و تحرک‌پذیری $10^{-1/86} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ طراحی و ارائه شده است [۲۸].

باتوجه به شکل ۱۴ ملاحظه می‌شود، مواد طراحی‌شده دارای ۷ حلقه آروماتیک بوده که ۳ حلقه آن‌ها تیوفنی هستند. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد، برای تولید مواد پلیمری نیمه‌رسانا با تحرک‌پذیری بار زیاد، افزایش حلقه‌های آروماتیک دارای اولویت است و طراحی ساختار مولکولی ماده باید به نحوی باشد که حداقل نیمی از حلقه‌های آروماتیک ترکیب، حلقه‌های تیوفنی (یا فوران) باشند [۲۸].

در پژوهش دیگری، به منظور پیش‌بینی خواص سلول‌های پلیمری آلی از دو روش مدل Scharber و روش نزدیک‌ترین همسایه k استفاده شده، که از روش‌های یادگیری ماشین است. عوامل مؤثر بر انتخاب مواد، معیارهای تقارن فضایی و خواص انتقال حامل‌های بار در نظر گرفته شده است. این دو روش پیش‌بینی برای ۲۴۹ زوج ماده نیمه‌رسانا (الکترون‌دهنده و پذیرنده الکترون اعمال شده

مراجع

1. Zhang X.D., *Machine Learning, in a Matrix Algebra Approach to Artificial Intelligence*, Springer, USA, 223-440, 2020.
2. Roscher R., Bohn B., Duarte M.F., and Garcke J., Explainable Machine Learning for Scientific Insights and Discoveries, *IEEE Access*, **8**, 42200-42216, 2020.
3. Shmueli G., *Data Mining for Business Analytics: Concepts, Techniques, and Applications in R*, John Wiley & Sons, USA, 2017.
4. Molnar C., *Interpretable Machine Learning*, LeanPub, Canada, 1-302, 2020.
5. Xiong H., Cheng Y., Zhao W., and Liu J., Analyzing Scientific Research Topics in Manufacturing Field Using a Topic Model, *Comput. Ind. Eng.*, **135**, 333-347, 2019.
6. Sohrabi B., Vanani I.R., and Jalali S.M.J., Evaluation of Research Trends in Knowledge Management: A Hybrid Analysis Through Burst Detection and Text Clustering, *J. Inform. Knowl. Manag.*, **18**, 19-43, 2019.
7. Fišter D., Mun J.C., Jagrič V., and Jagrič T., Deep Learning for Stock Market Trading: A Superior Trading Strategy, *Neural. Netw. World.*, **29**, 151-171, 2019.
8. Wong K.H., Mason C.W., and Devaraj S., Low Temperature Aqueous Electrodeposited TiOx Thin Films as Electron Extraction Layer for Efficient Inverted Organic Solar Cells, *ACS. Appl. Mater. Inter.*, **6**, 2679-2685, 2014.
9. Huang Y., Zhang J., Jiang E.S., and Oya Y., Structure–Property Correlation Study for Organic Photovoltaic Polymer Materials Using Data Science Approach, *J. Phys. Chem. C*, **124**, 12871–12882, 2020.
10. Yuan J., Zhang Y., Zhou L., Zhang G., Yip H.L., and Lau T.K., Single-Junction Organic Solar Cell With Over 15% Efficiency Using Fused-Ring Acceptor with Electron-Deficient Core, *Joule*, **3**, 1140-1151, 2019.
11. Cui Y., Yao H., Hong L., Zhang T., Xu Y., and Xian K., Achieving Over 15% Efficiency in Organic Photovoltaic Cells Via Copolymer Design, *Adv. Mater.*, **31**, 18-36, 2019.
12. Gao K., Jo S., Shi X., Nian L., Zhang M., and Kan Y., Over 12% Efficiency Nonfullerene All-Small-Molecule Organic Solar Cells with Sequentially Evolved Multilength Scale Morphologies, *Adv. Mater.*, **31**, 18-28, 2019.
13. Zhou Z., Xu S., Song J., Jin Y., Yue Q., Qian Y., and Liu F., High-Efficiency Small-Molecule Ternary Solar Cells with a Hierarchical Morphology Enabled by Synergizing Fullerene and Non-Fullerene Acceptors, *Nature Energ.*, **3**, 952-959, 2018.
14. Fan B., Du X., Liu F., Zhong W., Ying L., Xie R., and Tang X., Fine-Tuning of the Chemical Structure of Photoactive Materials for Highly Efficient Organic Photovoltaics, *Nature Energ.*, **3**, 1051-1058, 2018.
15. Liu J., Chen S., Qian D., Gautam B., Yang G., and Zhao J., Fast Charge Separation in a Non-Fullerene Organic Solar Cell with a Small Driving Force, *Nature Energ.*, **1**, 1-7, 2016.
16. Bin H., Gao L., Zhang Z.G., Yang Y., and Zhang Y., 11.4% Efficiency Non-Fullerene Polymer Solar Cells with Trialkylsilyl Substituted 2D-Conjugated Polymer as Donor, *Nat. Commun.*, **20**, 1-11, 2019.
17. Wadsworth A., Moser M., Marks A., and Little M.S., Critical Review of the Molecular Design Progress in Non-Fullerene Electron Acceptors Towards Commercially Viable Organic Solar Cells, *Chem. Soc. Rev.*, **48**, 1596-1625, 2019.
18. Graetzel M., Janssen R.A.J., Mitzi D.B., and Sargent E.H., Materials Interface Engineering for Solution-Processed Photovoltaics, *Nature*, **488**, 304-312, 2012.
19. Zhang G., Zhao J., Chow P.C.Y., Jiang K., and Zhang J., Nonfullerene Acceptor Molecules for Bulk Heterojunction Organic Solar Cells, *Chem. Rev.*, **118**, 3447-3507, 2018.
20. Li Y., Molecular Design of Photovoltaic Materials for Polymer Solar Cells: Toward Suitable Electronic Energy Levels and Broad Absorption, *Accounts. Chem. Res.*, **45**, 723-733, 2012.
21. Cheng P., Li G., Zhan X., and Yang Y., Next-Generation Organic Photovoltaics Based on Non-Fullerene Acceptors, *Nat. Photonics.*, **12**, 131-142, 2018.
22. Lee M.H., Robust Random Forest Based Non-Fullerene Organic Solar Cells Efficiency Prediction, *Organ. Electron.*, **76**, 131-142, 2020.
23. Wu Y., Guo J., Sun R., and Min J., Machine Learning for Accelerating the Discovery of High-Performance Donor/Acceptor Pairs in Non-Fullerene Organic Solar Cells, *npj Comput. Mater.*, **6**, 1-8, 2020.
24. Lee M.H., Insights from Machine Learning Techniques for Predicting the Efficiency of Fullerene Derivatives-Based Ternary Organic Solar Cells at Ternary Blend Design, *ADV Energ. Mater.*, **9**, 1-10, 2019.
25. Lin Y.C., Lu Y.J., Tsao C.S., Saeki A., and Li J.X., Enhancing Photovoltaic Performance by Tuning the Domain Sizes of a Small-Molecule Acceptor by Side-Chain-Engineered Polymer Donors, *J. Mater. Chem. A*, **7**, 3072-3082, 2019.
26. David T.W., Anizelli H., Jacobsson T.J., Gray C., and Teahan W., Enhancing the Stability of Organic Photovoltaics Through Machine Learning, *Nano Energ.*, **78**, 10-25, 2020.
27. Köntges W., Perkhun P., and Kammerer J., Visualizing Morphological Principles for Efficient Photocurrent Generation in Organic Non-Fullerene Acceptor Blends,

- Energ. Environ. Sci.*, **13**, 1259-1268, 2020.
28. Antono E., Matsuzawa N.N., Ling J., and Saal J.E., Machine-Learning Guided Quantum Chemical and Molecular Dynamics Calculations to Design Novel Hole-Conducting Organic Materials, *J. Phys. Chem. A*, **124**, 8330-8340, 2020.
29. Padula D., Simpson J.D., and Troisi A., Combining Electronic and Structural Features in Machine Learning Models to Predict Organic Solar Cells Properties, *Mater. Horizons.*, **6**, 343-349, 2019.