

# Deep Learning Generative Algorithm For Lead-Free 3D Perovskites Materials Discovery = Algoritma Generatif Pembelajaran Dalam Untuk Penemuan Materi Perovskites 3D Bebas Timah

Gilbert Lesmana, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920526357&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Meningkatnya kebutuhan akselerasi untuk penemuan material untuk perovskite 3D sangat penting untuk menemukan material yang bebas timah dan ramah lingkungan untuk semikonduktor dan sel surya. Solusi dominan untuk tren ini bergantung pada klasifikasi material dan penyaringan sejumlah besar material perovskit yang dilakukan setelah simulasi ab-initio. Untuk menyelesaikan masalah dua langkah, kami menggunakan algoritme pembelajaran mendalam sebagai cara untuk mengeluarkan materi baru, mempercepat penemuan materi, dan memberikan opsi yang lebih cepat untuk bereksperimen. Dalam studi ini, pembuatan perovskit 3D bebas timah baru melibatkan dua algoritme: berbasis generasi dan berbasis prediksi. Model yang digunakan masing-masing didasarkan pada Conditional Variational Autoencoders (CVAE) dan Convolutional Neural Networks (CNN). Metrik evaluasi kerugian divergensi khusus Kullback-Leibler sebesar 38 dihasilkan dari dekoder CVAE. Skor R2 0,74 - 0,81, Akurasi 0,73 - 0,87, MAE 0,3631 - 6,2339, RMSE 0,34 - 0,57 diperoleh dari 4 model prediksi yang berbeda berdasarkan 4 properti menggunakan tipe regresi dan multi kelas. Eksperimen dengan Materials Studio juga dilakukan untuk memvalidasi hasil yang dihasilkan dari algoritma CVAE. Eksperimen ini menggunakan CsPbBr<sub>3</sub> sebagai properti target untuk membuat material baru, PrLiO<sub>3</sub>. Seperti yang diperkirakan, energi celah pita PrLiO<sub>3</sub> kelas 2 ( $0 < x < 1$  eV) dihitung dari Materials Studio menjadi 0,979 eV, menunjukkan bahan semikonduktor dan kemampuan prediksi yang tepat dari algoritme.

.....The growing need of acceleration for materials discovery for 3D perovskites are imperative to find lead-free and environmentally friendly materials for semiconductors and solar cells alike. The dominant solutions for these trends rely on the classification of materials and filtering of a huge range of perovskite materials done after ab-initio simulations. To resolve the two-step problem, we used a deep learning algorithm as a way to output new materials, accelerate materials discovery and providing quicker options to experiment upon. In this study, the generation of new lead-free 3D perovskites involves two algorithms: generational-based and prediction-based. Models used were based on Conditional Variational Autoencoders (CVAE) and Convolutional Neural Networks (CNN) respectively. The evaluation metrics Kullback-Leibler custom divergence loss of 38 were generated from the CVAE decoders. R2 score of 0.74 - 0.81, Accuracy of 0.73 - 0.87, MAE of 0.3631 - 6.2339, RMSE of 0.34 - 0.57 are obtained from 4 different prediction models based on the 4 properties using both regression and multi-class type. Experiments with Materials Studio was also done to validate the generated result of the CVAE algorithm. This experiment used CsPbBr<sub>3</sub> as the target properties to create the new material, PrLiO<sub>3</sub>. As predicted, the band gap energy of PrLiO<sub>3</sub> class 2 ( $0 < x < 1$  eV) was calculated from Materials Studio to be 0.979 eV, indicating a semiconductor material and the correct predictive capability of the algorithm.