

Ж.Б. Омарова¹, Д.Е. Ережеп^{1,2,*},
А.У. Алдияров², Н.С. Токмолдин³

¹Сатпаев Университет, Казахстан, г. Алматы

²Физико-технический институт, КазННТУ им. К.И. Сатпаева, Казахстан, г. Алматы

³Потсдамский университет, Германия, г. Потсдам

*e-mail: darhan_13@physics.kz

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЛОТНОСТИ ДЕФЕКТОВ НА ЭКОЛОГИЧЕСКИ ЧИСТЫЙ СОЛНЕЧНЫЙ ЭЛЕМЕНТ С ОПТИМАЛЬНЫМ ВЫБОРОМ HTL

Одним из перспективных направлений в солнечной энергетике является использование солнечных элементов на основе перовскита. Конкуренентоспособность перовскитных солнечных элементов с кремниевыми солнечными элементами с каждым годом растет, но для дальнейшего повышения эффективности солнечных элементов на основе перовскита стоит обратить внимание на тип HTL. Плотность межфазных дефектов в солнечном элементе на основе $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ играет не маловажную роль при повышении эффективности. С целью увеличения производительности солнечного элемента на основе $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ были сделаны работы по подбору с наиболее подходящим межфазным дефектом. В этой работе использовалась программа SCAPS-1D для создания модели солнечного элемента. Программа SCAPS-1D оценивает влияние плотности межфазных дефектов на солнечный элемент на основе $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, которые варьировались в диапазоне от 10^{10} см^{-3} до 10^{17} см^{-3} . В виде оптимальной структуры экологически чистого солнечного элемента предложен $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$, которая обеспечивают оптимальную производительность и лучшую устойчивость к дефектам. В результате исследования выбранным оптимальным вариантом является структура экологически чистого солнечного элемента $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ с $\text{PCE} = 27,95\%$, $\text{FF} 84,05\%$, $V_{\text{OC}} 1,02 \text{ В}$ и $J_{\text{SC}} 32,60 \text{ мА/см}^2$, которая обеспечивают высокую эффективность и лучшую устойчивость к дефектам.

Ключевые слова: солнечная энергетика, экологически чистый солнечный элемент, SCAPS-1D, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, моделирование, HTL.

Zh. Omarova¹, D.Yerezhep^{1,2,*}, A. Aldiyarov², N. Tokmoldin³

¹Satbayev University, Kazakhstan, Almaty

²Institute of Physics and Technology, Satbayev University, Kazakhstan, Almaty

³Potsdam University, Germany, Potsdam

*e-mail: darhan_13@physics.kz

Investigation of the effect of defect density on an environmentally friendly solar cell with an optimal choice of HTL

One of the promising directions in solar energy is the use of perovskite-based solar cells. The competitiveness of perovskite solar cells with silicon solar cells is growing every year, but to further improve the efficiency of perovskite-based solar cells, it is worth paying attention to the HTL type. The density of interfacial defects in a solar cell based on $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ plays an important role in increasing efficiency. In order to increase the performance of a solar cell based on $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, work was done to select the most suitable interfacial defect. In this work, the SCAPS-1D program was used to create a model of a solar cell. The SCAPS-1D program evaluates the effect of the density of interfacial defects on a solar cell based on $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, which ranged from 10^{10} cm^{-3} to 10^{17} cm^{-3} . $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ is proposed as the optimal structure of an environmentally friendly solar cell, which provides optimal performance and better resistance to defects. As a result of the study, the selected optimal option is the structure of an environmentally friendly $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ solar cell with $\text{PCE} = 27.95\%$, $\text{FF} 84.05\%$, $V_{\text{OC}} 1.02 \text{ V}$ and $J_{\text{SC}} 32.60 \text{ mA/cm}^2$, which provides high efficiency and better resistance to defects.

Key words: solar energy, environmentally friendly solar cell, SCAPS-1D, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, modeling, HTL.

Ж.Б. Омарова¹, Д.Е. Ережеп^{1,2,*}, А.У. Алдияров², Н.С. Токмолдин³¹Сәтбаев университеті, Қазақстан, Алматы қ.²Физика-техникалық институт, Қ.И. Сәтбаев атындағы ҚазҰТУ, Қазақстан, Алматы қ.³Потсдам университеті, Германия, Потсдам

*e-mail: darhan_13@physics.kz

Оңтайлы НТЛ таңдауы бар экологиялық таза күн батареясына ақаулар тығыздығының әсерін зерттеу

Күн энергетикасындағы перспективалы бағыттардың бірі-перовскит негізіндегі күн батареяларын пайдалану. Кремний күн батареялары бар перовскит күн батареяларының бәсекеге қабілеттілігі жыл сайын артып келеді, бірақ перовскит негізіндегі күн батареяларының тиімділігін одан әрі арттыру үшін НТЛ түріне назар аударған жөн. $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ негізіндегі күн батареясындағы фазааралық ақаулардың тығыздығы тиімділікті арттыруда маңызды рөл атқарады. $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ негізінде күн батареясының өнімділігін арттыру мақсатында ең қолайлы фазааралық ақаумен сәйкестендіру жұмыстары жүргізілді. Бұл жұмыс күн батареясының моделін жасау үшін SCAPS 1D бағдарламасын қолданды. SCAPS 1D бағдарламасы фазааралық ақаулардың тығыздығының $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ негізіндегі күн батареясына әсерін бағалайды, олар 10^{10} см^{-3} -тен 10^{17} см^{-3} -ке дейін өзгерді. $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ экологиялық таза күн батареясының оңтайлы құрылымы ретінде ұсынылған, ол оңтайлы өнімділік пен ақауларға жақсы төзімділікті қамтамасыз етеді. Зерттеу нәтижесінде таңдалған ең жақсы нұсқа $\text{PCE} = 27,95 \%$, $\text{FF} 84,05 \%$, $V_{\text{oc}} 1,02 \text{ В}$ и $J_{\text{sc}} 32,60 \text{ мА/см}^2$ бар $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ экологиялық таза күн батареясының құрылымы болып табылады, ол жоғары тиімділік пен ақауларға жақсы төзімділікті қамтамасыз етеді.

Түйін сөздер: күн энергиясы, экологиялық таза күн батареясы, SCAPS-1D, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, модельдеу, НТЛ.

Введение

В последние годы перовскитные солнечные элементы на основе металлоорганических галогенидов свинца, имеющие высокую эффективность преобразования энергии (PCE), стали сильными конкурентами кремниевым солнечным элементам на фотоэлектрическом рынке [1]. Таким образом, простота изготовления и высокая эффективность (порядка 25%) фотопреобразователя на основе перовскитов, делает их перспективным материалом для фотовольтаики [2]. Несмотря на высокую эффективность преобразования энергии в перовскитных солнечных элементах на основе металлоорганических галогенидов свинца, данный вид перовскитов перестал широко применяться, из-за токсичности свинца, который представляет серьезную проблему для окружающей среды. Замена свинцового элемента на экологически чистые материалы в кристаллах перовскита является актуальной научной задачей в фотовольтаике [3].

Транспортные слои принято делить на ETL – electron transport layer и НТЛ – hole transport layer, которые выполняют функцию сбора носителей заряда и генерации энергии в перовскитном солнечном элементе. Использование оптимальных свойств ETL и НТЛ играет важную роль для сохранения стабильности перовскитного

солнечного элемента, так как они увеличивают подвижность дырок и электронов на противоположных электродах. На данный момент оптимальным и эффективным ETL является TiO_2 , так как он отлично переносит электроны, эффективно блокирует дырки на границе, обладает химической стабильностью и является экологичным [4]. В свою очередь НТЛ облегчает извлечение и транспортировку дырок, блокируя поток электронов. Оптимальный материал для слоя НТЛ должен обладать следующими основными свойствами [5]: иметь высокую подвижность носителей для повышения коэффициента заполнения; иметь широкую оптическую запрещенную зону, не выступая в качестве второго светопоглощающего слоя; обладать высокой прозрачностью для минимизации оптических потерь; иметь высокую водонепроницаемость; иметь низкие затраты на материалы и производство; быть экологически безопасным; демонстрировать хорошую устойчивость к свету и теплу.

Экспериментальное исследование устройств солнечных элементов дорогой и трудоемкий процесс, поэтому во многих научных направлениях принято использовать моделирование. В настоящем численном исследовании делается попытка определения и оценивания различных конфигурации солнечных перовскитных элементов с высокой эффективностью, приемлемой стабильностью и хорошей произво-

дительностью с помощью симулятора SCAPS 1D. Так, для численного исследования была предложена архитектура ячейки с использованием $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ в виде поглощающего слоя во всех исследованиях, а для альтернативных HTL использовались 2,2',7,7'-Tetrakis-(N,N-di-p-methoxyphenylamine)9,9'-spirobifluorene (Spiro-OMETAD), Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)-poly(styrene sulfonate) (PEDOT:PSS) и cuprous oxide (Cu_2O). Производительность конфигураций дополнительно оптимизируется за счет изменения различных параметров поглощающего слоя $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ и HTL для достижения оптимальных фотоэлектрических характеристик перовскитного солнечного элемента.

Методы и методология

В данной работе предложено использовать в качестве слоя поглотителя перовскит на основе олова ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$). Перовскиты на основе олова обеспечивают более высокую теоретическую эффективность за счет меньшей ширины запрещенной зоны, чем у эквивалентного перовскита на основе свинца. Конфигурации моделируемого солнечного элемента показаны на рисунке 1 и состоят из трех основных слоев с изменением слоя HTL: архитектура 1. $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Spiro-OMETAD}$; архитектура 2. $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{PEDOT:PSS}$; архитектура 3. $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$.

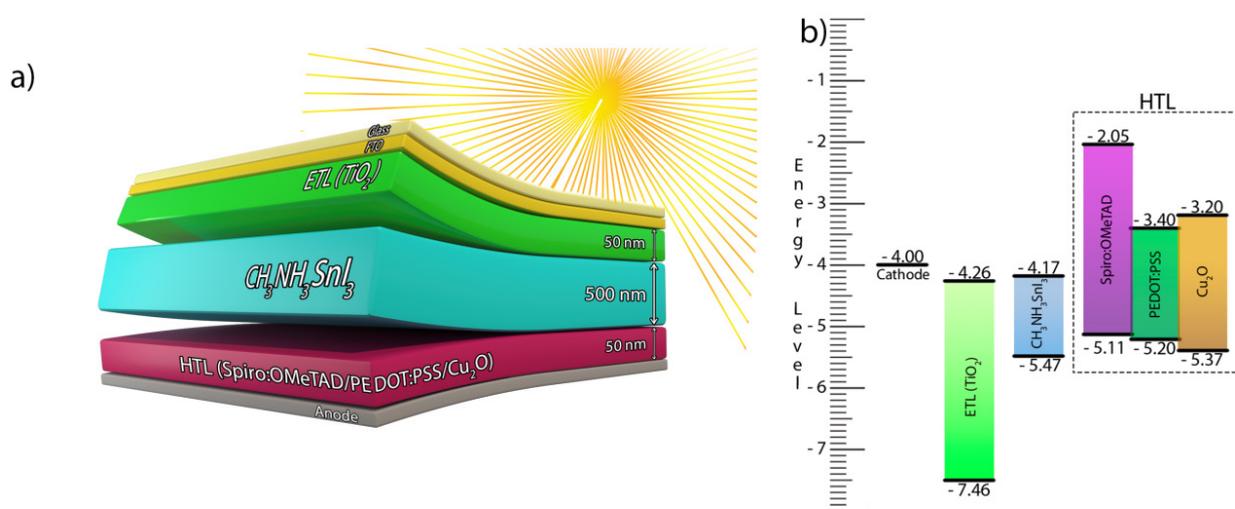


Рисунок 1 – Схематическая диаграмма предлагаемой структуры солнечного элемента из перовскита (а) и выравнивания энергетических зон (б)

Во всех конфигурациях устройства в качестве светопоглощающего слоя выступает $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, который является промежуточным слоем между ETL и HTL. Для всех симуляций используется стандартный спектр солнечной радиации AM 1.5G (1000 Вт/м², T = 300 K). Толщина $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ оставалась фиксированной для большинства результатов моделирования и была равна 500 нм. В настоящее время численное моделирование очень важно для понимания физических свойств и конструкции солнечных элементов на основе кристаллических, поликристаллических и аморфных материалов [6]. Необходимо отметить, что в последнее время численный анализ в программе SCAPS-1D (ELIS, Гентский университет, Бельгия) пользуется популярностью, так как она доказала свою эффек-

тивность в различных научных работах [6]–[9].

В программном обеспечении SCAPS-1D используется комбинация определенных математических уравнений: уравнения Пуассона; уравнения непрерывности электронов; уравнения непрерывности дырок; уравнения переноса полного заряда; уравнения переноса полного заряда для электрона и уравнения переноса полного заряда. Более подробное описание данных уравнений можно найти в других источниках [10], [11].

Все параметры моделируемого солнечного элемента были взяты из опубликованной литературы и представлены в Таблице 1 [12]–[16]. В Таблице 1 показаны параметры полупроводника каждого слоя, а также электрические свойства контактов, которые использовались при моделировании в данной работе.

Таблица 1 – Параметры солнечного элемента

Параметры	FTO	TiO ₂	CH ₃ NH ₃ SnI ₃	Spiro-OMETAD	PEDOT:PSS	Cu ₂ O
Толщина (nm)	500	50*	300-1300*	50*	50*	50*
Ширина запрещенной зоны (eV)	3.5	3.2	1.3	3.06	1.80	2.17
Сродство к электрону (eV)	4.0	4.26	4.17	2.05	3.40	3.2
Диэлектрическая проницаемость	9	9	8.2	3	18.00	7.1
Эффективная плотность состояний СВ (см ⁻³)	2.20×10 ¹⁸	2.20 × 10 ¹⁸	1×10 ¹⁸	2.20×10 ¹⁸	2.20 × 10 ¹⁸	2.00 × 10 ¹⁷
Эффективная плотность состояний VB (см ⁻³)	1.80×10 ¹⁹	1.80 × 10 ¹⁹	1 × 10 ¹⁸	1.80×10 ¹⁹	1.80×10 ¹⁹	1.10×10 ¹⁹
Электронная тепловая скорость (см/s)	10 ⁷	10 ⁷	10 ⁷	10 ⁷	10 ⁷	10 ⁷
Тепловая скорость отверстия (см/s)	10 ⁷	10 ⁷	10 ⁷	10 ⁷	10 ⁷	10 ⁷
Подвижность электронов (см ² /Vs)	20	20	1.6	2.00×10 ⁻⁴	4.50 × 10 ⁻²	200
Подвижность отверстия (см ² /Vs)	10	10	1.6	2.00×10 ⁻⁴	4.50 × 10 ⁻²	80
Неглубокая плотность донора N _D (см ⁻³)	2.00×10 ¹⁹	10 ¹⁸	0	0	0	0
Плотность мелкого акцептора N _A (см ⁻³)	0	0	1.00×10 ¹⁴	1.00×10 ¹⁸	1.00×10 ²⁰	1.00×10 ¹⁸
Ссылки	[12]	[13]	[14]	[15]	[16]	[16]

*В данном исследовании.

Результаты и обсуждения

Необходимо отметить, что ведутся работы по пассивации (passivation) дефектов для предотвращения возникновения рекомбинации [17]–[19]. Для повышения эффективности перовскитного солнечного элемента необходимо уменьшить рекомбинационные потери межфазных слоев. Соответственно, в данной работе проводилось исследование по влиянию плотности межфазных дефектов на обе поверхности раздела солнечного элемента TiO₂/CH₃NH₃SnI₃ (IL1) и CH₃NH₃SnI₃/HTL (IL2) с разными HTL. Все результаты по влиянию концентрации межфазных дефектов, полученные с помощью моделирования, приведены на рисунке 2. Плотности межфазных дефектов варьировались в диапазоне 10¹⁰ см⁻³ до 10¹⁷ см⁻³.

Видно, что при увеличении плотности дефектов с 10¹⁰ см⁻³ до 10¹⁷ см⁻³ V_{oc} непрерывно па-

дает с 1,0 В до 0,7 В, с 1,0 В до 0,8 В и с 1,0 В до 0,8 В для структур 1, 2, 3 соответственно (рисунок 2с). Как видно на рисунке 2а, с увеличением концентрации дефектов до 10¹⁵ см⁻³ значимых изменений J_{sc} для всех структур не произошло, а после увеличения концентрации дефектов с 10¹⁵ см⁻³ до 10¹⁷ см⁻³ наблюдается резкое снижение для всех структур.

Для всех структур существенных изменений FF не произошло до плотности дефектов 10¹⁶ см⁻³, но выше этой плотности наблюдается незначительное уменьшение FF, которое можно увидеть в падениях с 81% до 78%, с 83% до 80% и с 84% до 81%, для структур 1, 2, 3 соответственно (см. рисунок 2d). Также, значительно уменьшилась PCE по сравнению с плотностью дефектов от 10¹⁰ см⁻³ до 10¹³ см⁻³ для всех структур. За счет уменьшения V_{oc} эффективность солнечного элемента снижается, что говорит о важности данного параметра.

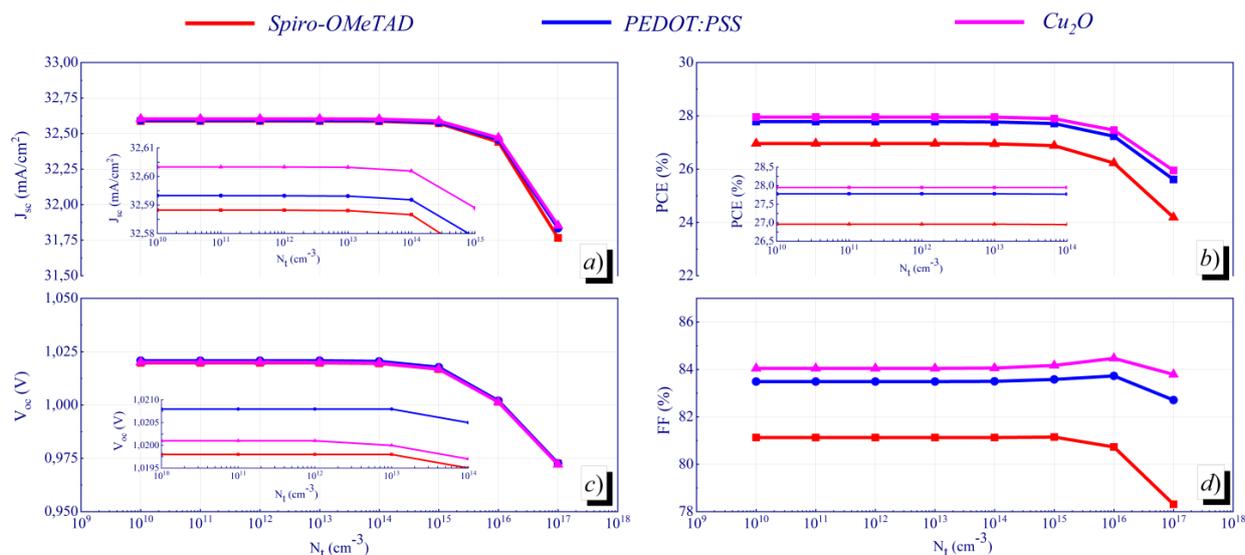


Рисунок 2 – Влияние концентрации межфазных дефектов (N_i) на слой $TiO_2/CH_3NH_3SnI_3$ (IL1) и $CH_3NH_3SnI_3/HTL$ (IL2); а) J_{sc} в зависимости от концентрации дефектов (N_i) б) PCE в зависимости от концентрации дефектов (N_i), в) V_{oc} в зависимости от концентрации дефектов (N_i), д) FF в зависимости от концентрации дефектов (N_i)

Далее, мы смоделировали влияние плотности дефектов в диапазоне от 10^{10} до 10^{17} cm^{-3} на границе ETL/перовскит, а на границе перовскит/HTL значения плотности дефектов выбиралось равным 10^{14} cm^{-3} на протяжении всего численного эксперимента. Чтобы повысить общую эффективность ячейки, рекомбинационные потери на интерфейсах необходимо уменьшать [20].

На рисунке 3 б, с заметно снижение V_{oc} и PCE при повышении плотности дефектов в зависимости от слоя HTL. При достижении плотности дефектного состояния на границе раздела 10^{17} cm^{-3} наблюдаем более интенсивное снижение эффективности у слоя Spiro-OMeTAD (с 26,96 % до 18,74 %). А в слоях PEDOT:PSS и Cu_2O снижения менее интенсивное (с 27,78 % до 21,93% и 27,95 % до 23,71 % соответственно). Параметры солнечного элемента J_{sc} и FF показаны на рисунке 3 а, д, однако нами не было обнаружено заметного снижения значения данных параметров. Однако, характер падения их отличался друг от друга. Необходимо также отметить, что, повышая плотность дефектов до 10^{14} cm^{-3} , мы наблюдали повышение FF, в зависимости от слоя HTL. Так, при слое Cu_2O показал наилучшие характеристики, так как при повышении плотности дефектов до 10^{14} cm^{-3} , значение FF выросло с 84,05 % до 85,84 %. После этого оно практически вышло на плато и при плотности дефектов равной 10^{15} cm^{-3} значение FF составило 85,86 %. После,

оно стало падать и при плотности дефектов равной 10^{17} cm^{-3} FF составил 83,24 %, что является наиболее высоким результатом по сравнению с другими слоями HTL.

Следовательно, допустимая концентрация межфазных дефектов (N_i) на слой $TiO_2/CH_3NH_3SnI_3$ (IL1) составляет 10^{14} cm^{-3} , так как за пределами этого уровня эффективность солнечного элемента сильно ухудшается. При выборе материала в виде Cu_2O для слоя HTL с учетом плотности дефектов равных 10^{14} cm^{-3} , фотогальванические характеристики перовскитного устройств составят: $J_{sc} = 32,5$ mA/cm^2 , PCE = 23,7 %, $V_{oc} = 0,8$ V, FF = 83,2 %.

С другой стороны, мы отдельно изучили зависимость влияния плотности дефектных состояний от 10^{10} cm^{-3} до 10^{17} cm^{-3} на границе HTL/перовскита, так как для определения эффективности всей структуры солнечного элемента необходимо понимание влияния плотности дефектов между транспортными слоями и перовскитным поглотителем. Результаты показаны на рисунке 4а, б, с, д. Было обнаружено, что влияние плотности межфазных дефектов слоя IL1 более явно выражено, чем в слое IL2. Наблюдаем несущественное снижение V_{oc} на рисунке 4 с, как и в случае со слоем IL1. В случае изменения слоя HTL изменение V_{oc} с повышением плотности дефектов имеет одинаковый характер, но разной интенсивность. При достижении плотности

дефектов равной 10^{17} cm^{-3} V_{OC} падает с 1,0198 V до 0,7254 V при слое Spiro-OMeTAD, с 1,0208 V до 0,8233 V в случае со слоем PEDOT:PSS и с 1,0201 V до 0,8743 V в случае слоя Cu_2O . Как можно заметить на рисунке 4а, плотность дефектного состояния на границе раздела HTL/перовскит не оказывало существенного влияния на J_{SC} вплоть до повышения плотности дефектов равной 10^{15} cm^{-3} . Выше этой концентрации J_{SC} резко уменьшается для всех структур с разными HTL. На рисунке 4 d наблюдается зависимость FF при возрастании плотности дефектов. Повышение значения плотности дефектов до 10^{15} cm^{-3} влечет за собой повышение значения FF. Однако видны различия в пиковом значении при измене-

нии структуры перовскитного элемента, так при слое Spiro-OMeTAD пик FF равный 84,2% достигается при плотности дефектов равным 10^{13} cm^{-3} , при слое PEDOT:PSS пик FF равный 85,9% достигается при плотности дефектов равным 10^{14} cm^{-3} и при слое Cu_2O пик FF равный 85,8 % достигается при плотности дефектов равным 10^{15} cm^{-3} . PCE снижается с увеличением плотности дефектов для всех структур с разными HTL как это изображено на рисунке 4 б. Так, при слое Spiro-OMeTAD PCE уменьшается с 26,9 % до 17,9 %, при слое PEDOT:PSS уменьшается с 27,7 % до 21,0 % и при слое Cu_2O с 27,9 % до 22,7 % с увеличением плотности дефектов с 10^{10} cm^{-3} до 10^{17} cm^{-3} .

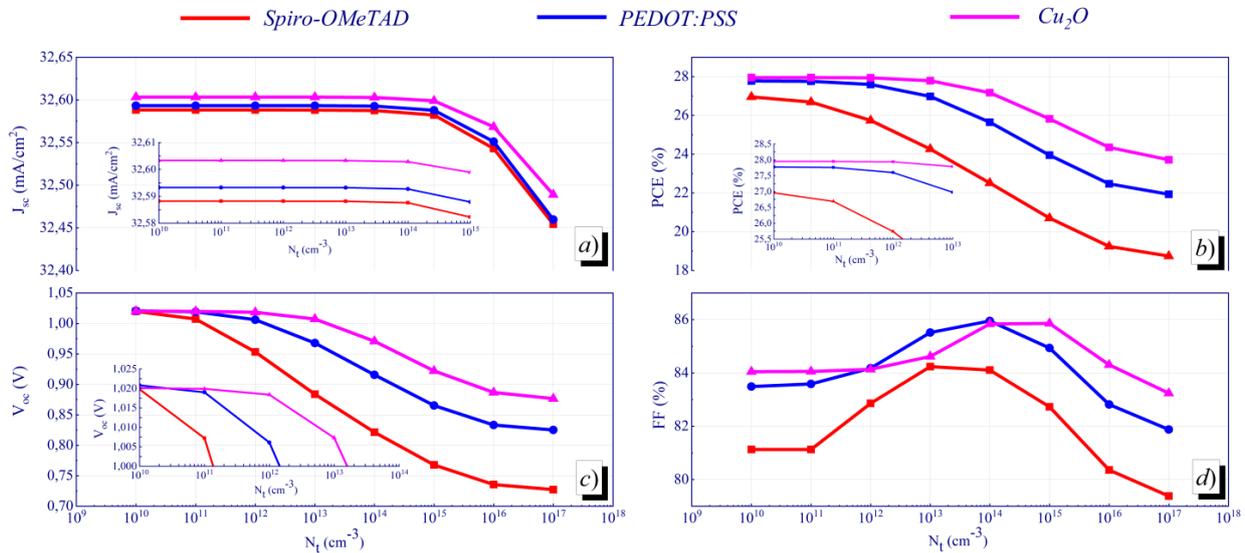


Рисунок 3 – Влияние концентрации межфазных дефектов (N_i) на слой $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3(\text{IL1})$; а) J_{SC} в зависимости от концентрации дефектов (N_i) б) PCE в зависимости от концентрации дефектов (N_i), в) V_{OC} в зависимости от концентрации дефектов (N_i), д) FF в зависимости от концентрации дефектов (N_i)

Предел допустимой плотности дефектов для первой структуры составляет 10^{13} cm^{-3} , для второй структуры 10^{14} cm^{-3} и третьей структуры 10^{15} cm^{-3} . Понижение пределов устойчивости к дефектам в зависимости от слоя HTL может быть связано с интенсивной рекомбинацией носителей на границе раздела и соответственно, снижением производительности устройства. Можно отметить высокий предел устойчивости к плотности дефектов между $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, который указывает на хорошее согласование смещения зон проводимости, которое создает эффективное межфазное электрическое поле.

Таким образом, в данной работе были введены дефекты в заданные слои и сделан вывод, что увеличение количества дефектов в активном перовскитном слое ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$) влияет на эффективность устройства гораздо сильнее, чем увеличение количества дефектов в ETL или HTL вне зависимости от материала HTL. Данные результаты дают количественную информацию для понимания пороговых значений дефектов при различной структуре перовскитного элемента, которые непосредственно влияют на фотогальванические характеристики устройства.

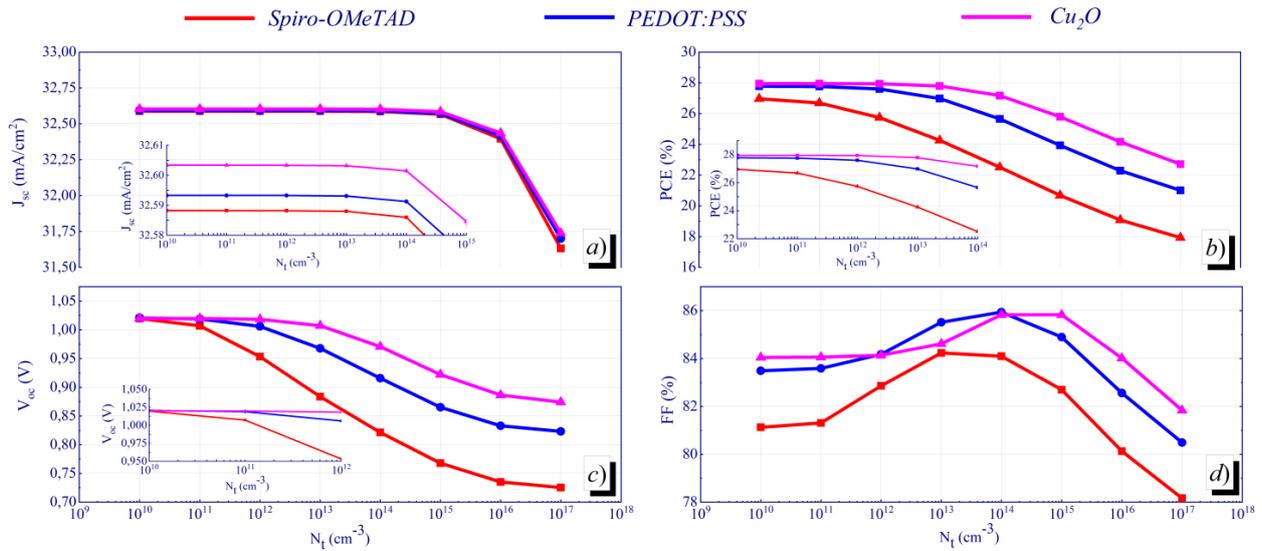


Рисунок 4 – Влияние концентрации межфазных дефектов (N_i) на слой CH₃NH₃SnI₃/HTL(IL2);
 а) J_{sc} в зависимости от концентрации дефектов (N_i) б) PCE в зависимости от концентрации дефектов (N_i),
 с) V_{oc} в зависимости от концентрации дефектов (N_i), d) FF в зависимости от концентрации дефектов (N_i)

Заключение

В этой статье смоделирована перовскитный солнечный элемент на основе CH₃NH₃SnI₃ с помощью программы SCAPS-1D. В моделировании были анализирован плотность межфазных дефектов с разными вариантами HTL. Для выбора оптимального варианта HTL были использованы Spiro-OMeTAD, PEDOT:PSS и Cu₂O. Предел допустимости плотности межфазных дефектов в поверхностях TiO₂/CH₃NH₃SnI₃(IL1) и CH₃NH₃SnI₃/HTL(IL2) с разными HTL составляет 10¹⁴ см⁻³ и 10¹⁰ см⁻³. Среди рассмотренных структур, структура TiO₂/CH₃NH₃SnI₃/Cu₂O

демонстрирует лучший предел устойчивости к дефектам и показывает лучшую производительность В результате исследования выбранным оптимальным вариантом является структура экологически чистого солнечного элемента TiO₂/CH₃NH₃SnI₃/Cu₂O с PCE = 27,95 %, FF 84,05 %, V_{oc} 1,02 В и J_{sc} 32,60 mA/cm², которая обеспечивают высокую эффективность и лучшую устойчивость к дефектам.

Данное исследование выполнено по гранту AP15473758 при финансовой поддержке Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан.

Литература

1. P. K. Nayak, S. Mahesh, H. J. Snaith, and D. Cahen, "Photovoltaic solar cell technologies: analysing the state of the art," *Nat. Rev. Mater.*, vol. 4, no. 4, pp. 269–285, Apr. 2019, doi: 10.1038/s41578-019-0097-0.
2. Gagandeep, M. Singh, R. Kumar, and V. Singh, "Investigation of CH₃NH₃PbI₃ and CH₃NH₃SnI₃ based perovskite solar cells with CuInSe₂ nanocrystals," *Optik (Stuttg.)*, vol. 246, p. 167839, Nov. 2021, doi: 10.1016/j.ijleo.2021.167839.
3. W. Cao *et al.*, "Defects and doping engineering towards high performance lead-free or lead-less perovskite solar cells," *J. Energy Chem.*, vol. 68, pp. 420–438, May 2022, doi: 10.1016/j.jechem.2021.12.002.
4. B. Mahapatra, R. V. Krishna, Laxmi, and P. K. Patel, "Design and optimization of CuSCN/CH," *Opt. Commun.*, vol. 504, p. 127496, Feb. 2022, doi: 10.1016/j.optcom.2021.127496.
5. B. Xu *et al.*, "Bifunctional spiro-fluorene/heterocycle cored hole-transporting materials: Role of the heteroatom on the photovoltaic performance of perovskite solar cells," *Chem. Eng. J.*, vol. 431, p. 133371, Mar. 2022, doi: 10.1016/j.cej.2021.133371.
6. A. M. N. ABENA, A. T. NGOUPO, F. X. A. ABEGA, and J. M. B. NDJAKA, "Numerical investigation of solar cells based on hybrid organic cation perovskite with inorganic HTL via SCAPS-1D," *Chinese J. Phys.*, vol. 76, pp. 94–109, Mar. 2022, doi: 10.1016/j.cjph.2021.12.024.
7. P. K. Patel, "Device simulation of highly efficient eco-friendly CH₃NH₃SnI₃ perovskite solar cell," *Sci. Rep.*, vol. 11, no. 1, p. 3082, Dec. 2021, doi: 10.1038/s41598-021-82817-w.

8. H. Yao and L. Liu, "Design and Optimize the Performance of Self-Powered Photodetector Based on PbS/TiS₃ Heterostructure by SCAPS-1D," *Nanomaterials*, vol. 12, no. 3, p. 325, Jan. 2022, doi: 10.3390/nano12030325.
9. S. A. Moiz, "Optimization of Hole and Electron Transport Layer for Highly Efficient Lead-Free Cs₂TiBr₆-Based Perovskite Solar Cell," *Photonics*, vol. 9, no. 1, p. 23, Dec. 2021, doi: 10.3390/photonics9010023.
10. M. Burgelman, K. Decock, S. Khelifi, and A. Abass, "Advanced electrical simulation of thin film solar cells," *Thin Solid Films*, vol. 535, pp. 296–301, May 2013, doi: 10.1016/j.tsf.2012.10.032.
11. J. Verschraegen and M. Burgelman, "Numerical modeling of intra-band tunneling for heterojunction solar cells in scaps," *Thin Solid Films*, vol. 515, no. 15, pp. 6276–6279, May 2007, doi: 10.1016/j.tsf.2006.12.049.
12. L. Hao *et al.*, "Tin-based perovskite solar cells: Further improve the performance of the electron transport layer-free structure by device simulation," *Sol. Energy*, vol. 230, pp. 345–354, Dec. 2021, doi: 10.1016/j.solener.2021.09.091.
13. M. D. Stamate, "On the dielectric properties of dc magnetron TiO₂ thin films," *Appl. Surf. Sci.*, vol. 218, no. 1–4, pp. 318–323, Sep. 2003, doi: 10.1016/S0169-4332(03)00624-X.
14. A.-A. Kanoun, M. B. Kanoun, A. E. Merad, and S. Goumri-Said, "Toward development of high-performance perovskite solar cells based on CH₃NH₃GeI₃ using computational approach," *Sol. Energy*, vol. 182, pp. 237–244, Apr. 2019, doi: 10.1016/j.solener.2019.02.041.
15. T. Minemoto *et al.*, "Theoretical analysis of band alignment at back junction in Sn–Ge perovskite solar cells with inverted p-i-n structure," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 206, p. 110268, Mar. 2020, doi: 10.1016/j.solmat.2019.110268.
16. T. Oku, T. Yamada, K. Fujimoto, and T. Akiyama, "Microstructures and Photovoltaic Properties of Zn(Al)O/Cu₂O-Based Solar Cells Prepared by Spin-Coating and Electrodeposition," *Coatings*, vol. 4, no. 2, pp. 203–213, Mar. 2014, doi: 10.3390/coatings4020203.
17. Q. Jiang *et al.*, "Surface passivation of perovskite film for efficient solar cells," *Nat. Photonics*, vol. 13, no. 7, pp. 460–466, Jul. 2019, doi: 10.1038/s41566-019-0398-2.
18. J. J. Yoo *et al.*, "An interface stabilized perovskite solar cell with high stabilized efficiency and low voltage loss," *Energy Environ. Sci.*, vol. 12, no. 7, pp. 2192–2199, 2019, doi: 10.1039/C9EE00751B.
19. X. Zheng *et al.*, "Defect passivation in hybrid perovskite solar cells using quaternary ammonium halide anions and cations," *Nat. Energy*, vol. 2, no. 7, p. 17102, Jul. 2017, doi: 10.1038/nenergy.2017.102.
20. C. M. Wolff, P. Caprioglio, M. Stollerfoht, and D. Neher, "Nonradiative Recombination in Perovskite Solar Cells: The Role of Interfaces," *Adv. Mater.*, vol. 31, no. 52, p. 1902762, Dec. 2019, doi: 10.1002/adma.201902762.