

Research Paper
----------------

# Investigating The Power Conversion Efficiency of Perovskite Solar Cells with The Inorganic Active Layer RbGeBr<sub>3</sub> and Various Electron and Hole Collecting Layers<sup>1</sup>

Shima Valizadeh<sup>\* 2</sup>, Aliasghar Shokri<sup>3</sup> and Amirabbas Sabouri Dodaran<sup>4</sup>

Received: 2023.04.13

Revised: 2023.07.10

Accepted: 2023.09.10

## Abstract

Perovskite solar cells (PSCs) are advancing swiftly due to their remarkable increase in power conversion efficiency (PCE) compared to traditional photovoltaic technologies. The main purpose of this study is to investigate the efficiency of two distinct PSCS structures that use RbGeBr<sub>3</sub> as an inorganic perovskite active layer. The calculations are based on the optoelectronic model of the solar cell and the use of the finite element method to solve the continuity equations for current and charge density. Therefore, the layer thicknesses of different materials (as ETL and Active layer) are modified to find the better power conversion efficiency of these solar cells. The obtained results of simulation calculations illustrate that the first structure FTO/ITO/RbGeBr<sub>3</sub> /PEDOT: PSS/Au exhibits a maximum power conversion efficiency of 11.37%, with a short circuit current of 14.47 (mA/cm<sup>2</sup>) and an open circuit voltage of 0.96 (V) and while the FTO/TiO<sub>2</sub>/RbGeBr<sub>3</sub>/Spiro-OMETAD/Au structure shows a maximum power conversion efficiency of 10.57%. The greatest power conversion efficiency for the aforementioned designs is 80 nm for the electron transporting layer is 80 nm and 200 nm for the inorganic active layer, respectively. The results of this article can be useful in the design of new-generation solar cells based on inorganic perovskite layers.

**Keywords:** *Perovskite Solar Cell, Photovoltaic, Absorption Coefficient, Power Conversion Efficiency, Mineral Material.*

<sup>1</sup>DOI: 10.22051/ijap.2023.43433.1318

<sup>2</sup> PhD Student, Department of Physics, Payam-e Noor University, Tehran, Iran (corresponding author)  
Email: shvalizadeh@student.pnu.ac.ir

<sup>3</sup> Professor, Department of Theoretical Physics and Nano, Faculty of physics, Alzahra University, Tehran, Iran. Email: aashokri@alzahra.ac.ir

<sup>4</sup> Associate Professor, Department of Physics, Payam-e Noor University, Tehran, Iran. Email: Sabouri@pnu.ac.ir



# بررسی بهره‌وری سلول خورشیدی پروسکایتی با لایه‌ی فعال معدنی $RbGeBr_3$ و لایه‌های متفاوت جمع‌کننده الکترون و حفره<sup>۱</sup>

شیمای ولی‌زاده<sup>۲\*</sup>، علی‌اصغر شکری<sup>۳</sup> و امیرعباس صبوری دودران<sup>۴</sup>

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۱/۲۴

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۴/۱۹

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۶/۱۹

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲

صص ۱۴۴ - ۱۶۱

## چکیده:

امروزه سلول‌های خورشیدی پروسکایتی (PSCs)، در مقایسه با فناوری‌های فتوولتائیک موجود با سرعت قابل توجهی در حال پیشرفت است. در کار حاضر، تمرکز اصلی بر بررسی بهره‌وری دو ساختار متفاوت PSCs با لایه فعال پروسکایتی معدنی  $RbGeBr_3$  است. محاسبات مبتنی بر الگوی اپتوالکترونیک سلول خورشیدی و حل معادلات پیوستگی چگالی بار و جریان با روش عددی المان محدود است. به منظور بهینه‌سازی بهره‌وری، ضخامت‌های لایه انتقال‌دهنده الکترون (ETL) و لایه فعال معدنی  $RbGeBr_3$  تغییر داده شده است. نتایج محاسبات شبیه‌سازی شده برای سلول خورشیدی با ساختار اول  $FTO/ITO/RbGeBr_3/PEDOT:PSS$ ، بالاترین بازدهی ۱۱/۳۷٪، با جریان مدار کوتاه  $14/47 (mA/cm^2)$  و ولتاژ مدار باز ۰/۹۶ ولت و برای سلول خورشیدی با ساختار دوم  $FTO/TiO_2/RbGeBr_3/Spiro-OMETAD/Au$ ، بهره‌وری ۱۰/۵۷٪ را نشان می‌دهد. در هر دو ساختار بیان شده، بالاترین بهره‌وری با در نظر گرفتن ضخامت‌ها برای لایه انتقال‌دهنده الکترون ۸۰ نانومتر و لایه فعال معدنی ۲۰۰ نانومتر است. نتایج این مقاله می‌تواند در طراحی سلول‌های خورشیدی نسل جدید مبتنی بر لایه‌های پروسکایتی معدنی مفید باشد.

**واژگان کلیدی:** سلول‌های خورشیدی پروسکایت، فتوولتائیک، ضریب جذب، بهره‌وری، ماده معدنی.

<sup>۱</sup> DOI: 10.22051/ijap.2023.43433.1318

<sup>۲</sup> دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران (نویسنده مسئول). Email: shvalizadeh@student.pnu.ac.ir

<sup>۳</sup> استاد، گروه فیزیک نظری و نانو، دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران. Email: aashokri@alzahra.ac.ir

<sup>۴</sup> دانشیار، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران. Email: Sabouri@pnu.ac.ir

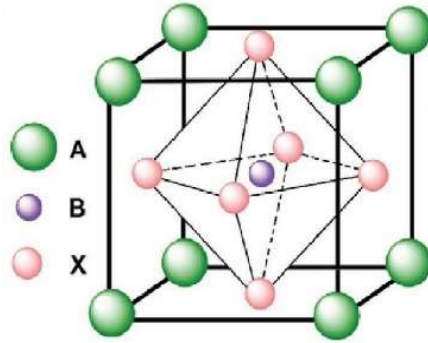


## ۱. مقدمه

امروزه نیاز به داشتن انرژی‌های پاک برای مصارف خانگی و صنعت چالشی بسیار مهم در علم و فناوری به شمار می‌رود. چرا که میزان مصرف انرژی جهان، در آینده‌ای نه چندان دور، بسیار بالا خواهد رفت، منابع شناخته شده انرژی چون نفت و زغال سنگ دیگر جوابگوی نیازهای بشر نخواهند بود و همزمان مسائل و مشکلات زیست محیطی نیز وجود خواهند داشت. از این رو، برای تأمین انرژی باید رویکردها را به سمت انرژی‌های پاک موجود در جهان هستی، تغییر دهیم. از جمله این انرژی‌ها، استفاده از انرژی گرمایی و نوری خورشیدی است، که به صورت رایگان، در اختیار ما قرار داده شده است (یک ساعت تابش خورشیدی، انرژی معادل  $8/3 \times 10^{13}$  کیلووات تولید می‌کند) [۱]. در پی این رویکرد جدید، دانشمندان توانستند اولین بار در سال ۱۹۵۳ با استفاده از ماده سیلیکون تبدیل انرژی خورشیدی به انرژی الکتریکی را محقق سازند که اولین نسل سلول خورشیدی بوجود آمد [۲]. اگرچه استفاده از ماده سیلیکون خالص در صنعت هزینه‌بر است. این موضوع سبب شد که پژوهشگران در پی پیشرفت فناوری فتوولتائیک، در جهت استفاده هر چه بیشتر از انرژی خورشیدی، به همراه کاهش هزینه تولید و ساخت، حرکت نمایند. پیشرفت سریع نسل‌های بعدی این سلول‌ها که پا به عرصه فناوری فتوولتائیک گذاشتند، با وجود مزیت‌هایی که دارند، معایبی هم از خود نشان داده‌اند [۳-۹]. از سال ۲۰۱۴ سلول‌های خورشیدی پروسکایتی<sup>۱</sup> PSCs به دلیل سرعتی که در بالارفتن بازدهی در یک دهه اخیر از  $3/8\%$  تا  $25/5\%$ ، در مقایسه با دیگر نسل‌های فتوولتائیک قبلی به نمایش گذاشتند، مورد توجه بیشتر جوامع علمی قرار گرفتند [۶ و ۱۰]. این مواد دارای چندین مزیت چشمگیر هستند، که می‌توان به چند مورد از آن‌ها چون فراوانی بسیار در طبیعت، شکاف نواری مستقیم و مناسب، انرژی قیدی پایین اکسایتون، طبیعت بلوری با چگالی نقص پایین، تعادل انتقال الکترون-حفره با تحرک پذیری بالای بارها، ارزانی در تولید و ساخت و همچنین بازدهی بالای این سلول‌ها اشاره کرد [۱۱-۱۶]. اگرچه همچنان دارای معایبی چون ناپایداری در مقابل رطوبت و دما هستند [۱۷ و ۱۸]. پروسکایت‌ها در ترکیب‌های مختلف دارای ساختار مشابه هستند. شکل ۱، ساختار یک سلول واحد پروسکایت مکعبی با ترکیب  $ABX_3$  (مانند  $MAPbI_3$ ،  $CsSnI_3$ ،  $FAPbI_3$ ) را نشان می‌دهد که امروزه به عنوان یکی از بهترین مواد شناخته شده برای سلول‌های خورشیدی پروسکایتی است [۱۹ و ۲۰].

<sup>1</sup> Perovskite solar cells (PSCs)





شکل ۱ ساختار مکعبی یک پروسکایت با ترکیب  $ABX_3$  [۱۹].

بیشترین سلول‌های خورشیدی پروسکایت ثبت شده در مقالات، سلول‌های آلنی- معدنی چون  $MAPbI_3$  هستند که هنوز معایبی چون بی‌ثباتی ذاتی، ناپایداری دمایی و فوتوشیمیایی مؤلفه‌های آلنی را همراه دارند [۲۱-۲۵]. این معایب سبب شد توجه به سمت کاتیون‌های معدنی از قبیل  $K$ ،  $Rb$  و  $Cs$  به جای کاتیون‌های آلنی در یک سلول واحد پروسکایت در نظر گرفته شوند تا به توان یک سلول خورشیدی پروسکایتی کاملاً معدنی طراحی کرد که ویژگی‌های اپتوالکترونیک عالی‌تر و پایداری بهتری را از خود نشان دهند [۲۶]. در همین راستا با جایگزینی مواد معدنی چون سزیم بازدهی سلول‌های خورشیدی پروسکایت معدنی از ۲/۹٪ تا ۲۰/۸٪ در شش سال اخیر پیشرفت داشته است [۲۷ و ۲۸]. همچنین، آنالیزهای گرماسنجی حرارتی نشان می‌دهند که، پروسکایت‌هایی که شامل یک کاتیون آلنی می‌باشند، در دمای زیر ۱۲۵ سانتی‌گراد تجزیه می‌شوند، در حالی که تجزیه شدن پروسکایت معدنی در دمای بالای ۵۰۰ درجه سانتی‌گراد رخ می‌دهد [۲۹ و ۳۰]. نتایج بدست آمده دیگر، بیانگر این است که بیشتر مواد معدنی پروسکایتی پایین‌ترین رطوبت‌سنجی و بالاترین حالت دمایی و پایداری نوری را نسبت به مواد آلنی پروسکایت دارند [۳۱-۳۳]. در نهایت، با در نظر گرفتن اینکه، می‌توان ساختارهای پروسکایتی بسیاری تولید نمود و آن‌ها را در سلول‌های خورشیدی برای رسیدن به ساختارهایی با بهترین عملکرد استفاده کرد، هنوز راه زیادی پیش‌رو است.

در کار حاضر، ماده معدنی  $RbGeBr_3$  به عنوان لایه فعال که جاذب نور است، در دو ساختار با لایه‌های متفاوت انتقال‌دهنده الکترون و انتقال‌دهنده حفره مورد بررسی قرار گرفته است. برای این ساختارها، با حل معادلات پیوستگی چگالی بار و جریان و با در نظر گرفتن ویژگی‌های اپتوالکترونیک مواد از راه شبیه‌سازی به روش عددی المان محدود با استفاده از نرم‌افزار کامسول،

چهار عامل مهم جریان مدار کوتاه<sup>۱</sup> ( $J_{sc}$ )، ولتاژ مدار باز<sup>۲</sup> ( $V_{oc}$ )، فاکتور پرشدگی<sup>۳</sup> (FF) و بازدهی ( $\eta_{max}$ ) محاسبه شده و در نهایت با بدست آوردن بازدهی در هر دو ساختار، با هم مقایسه شده‌اند.

در بخش دوم، ابتدا طراحی و عملکرد کلی ساختار الکترواستاتیکی یک سلول خورشیدی پروسکایتی نشان داده شده‌است. در ادامه هر دو نوع ساختار با لایه فعال معدنی ( $RbGeBr_3$ ) مطرح شده و سپس بر روش کار و محاسبات مروری انجام خواهد شد. در بخش سوم، روش انجام پژوهش و نتایج خروجی در هر دو ساختار و نمودارها آمده است. همچنین، در بخش چهارم به نتیجه‌گیری نهایی پرداخته می‌شود. نتایج این گزارش، برای مطالعه و ساخت سلول‌های خورشیدی پروسکایتی بر پایه مواد معدنی با ساختارهایی که بتوانند بازده بالاتری داشته باشند، داده‌های سودمندی را فراهم می‌سازد.

## ۲. طراحی ساختارهای متفاوت PSCs با لایه فعال معدنی $RbGeBr_3$

### ۲-۱ عملکرد کلی ساختار یک سلول خورشیدی پروسکایتی

شکل ۲، عملکرد ساختار الکترواستاتیکی یک سلول خورشیدی پروسکایتی را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، این ساختار از چندین لایه با مواد مختلف تشکیل شده است. لایه اول از یک ماده کاملاً شفاف (TCO) با شکاف نواری بزرگ (الکترو شفاف) تشکیل شده است [۳۴]. طیف نور خورشید پس از عبور از لایه شفاف، به لایه فعال می‌رسد، که خود متشکل از دو قسمت است: لایه انتقال‌دهنده الکترون<sup>۴</sup> (ETL) و لایه جاذب نور. لایه‌های فعال، از مواد نیم‌رسانا با شکاف‌های نواری مختلف تشکیل شده‌اند تا عبور و سپس جذب بیشترین دامنه طیفی نور خورشید در آن‌ها اتفاق بیافتد. نور با جذب شدن در لایه جاذب نور، حامل‌های بار آزاد را تولید می‌کند و سپس، حامل‌های بار آزاد تولید شده، به سمت لایه‌های انتقال‌دهنده الکترون حرکت می‌کنند. این الکترون‌ها از پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده<sup>۵</sup> (LUMO) لایه جاذب نور به پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده لایه ETL منتقل می‌شوند و حفره‌های تشکیل شده از بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده<sup>۶</sup> (HOMO) لایه جاذب نور به بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده

<sup>1</sup> Short circuit current ( $J_{sc}$ )

<sup>2</sup> Open circuit voltage ( $V_{oc}$ )

<sup>3</sup> Filling factor (FF)

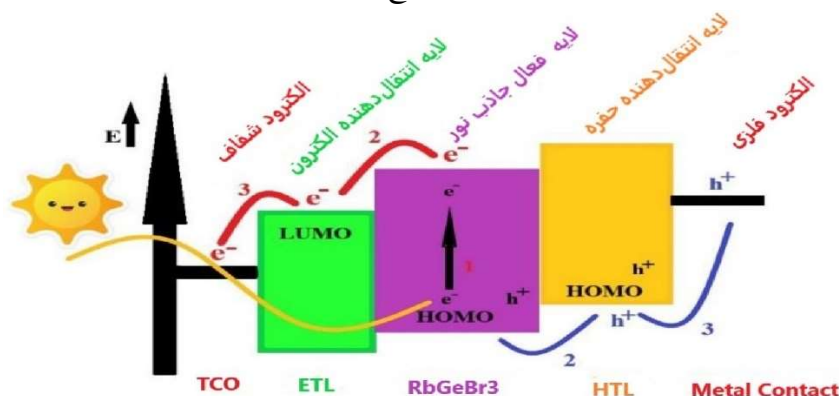
<sup>4</sup> Electron transfer layer (ETL)

<sup>5</sup> Lowest unoccupied molecular orbital (LUMO)

<sup>6</sup> Highest occupied molecular orbital (HOMO)



لایه انتقال‌دهنده حفره<sup>۱</sup> (HTL) گذار می‌کند و در نهایت توسط الکترودهای جمع‌کننده، که اغلب فلزاتی از قبیل طلا، نقره و یا گرافن هستند، جمع‌آوری می‌شوند.



شکل ۲ عملکرد کلی ساختار الکترواستاتیکی یک سلول خورشیدی پروسکایتی PSCs.

## ۲-۲ طراحی دو نوع ساختار سلول خورشیدی پروسکایتی

امروزه، با توجه به اینکه کارهای کمتری در رابطه با سلول‌های خورشیدی کاملاً معدنی صورت گرفته شده است، فرصت بی‌شماری برای پژوهش در رابطه با سلول‌های خورشیدی بر پایه‌ی مواد پروسکایتی وجود دارد. به تازگی کارهایی در رابطه با Cs در ترکیبات ساختاری پروسکایت در PSCs انجام شده است و بازدهی این سلول‌ها در ساختارهای متفاوت از ۲٪/۹ تا ۲۰٪/۸ گزارش شده است [۲۶-۲۸]. این پژوهش‌ها ما را بر این داشت تا Rb را در ترکیب ساختاری یک سلول واحد مکعبی پروسکایت،  $RbGeBr_3$ ، در ساختار سلول‌های خورشیدی پروسکایتی بررسی کنیم، تا ببینیم میزان تولید چگالی جریان و بازدهی نهایی آن به چه مقدار خواهد بود. در کار پیش‌رو، هدف بررسی ماده معدنی  $RbGeBr_3$  به عنوان لایه جذب نور، در دو ساختار متفاوت در یک سلول خورشیدی است. همچنین، مشخصات اولیه الکترونی و اپتیکی ترکیب  $RbGeBr_3$  که در شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفته، از محاسبات نظریه تابعی چگالی<sup>۲</sup> (DFT) استخراج شده است [۳۵]. نظریه تابعی چگالی، نظریه‌ای در چارچوب مکانیک کوانتومی برای بررسی ساختار الکترونی مواد در سیستم‌های بس‌ذره‌ای است. همچنین در این نظریه با معرفی توابع انرژی و وردش‌گیری از آن‌ها، ویژگی‌های ساختاری، ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی ماده از قبیل، چگالی الکترون، ساختار و شکاف نواری ماده مورد نظر محاسبه می‌شود. در این پژوهش، دو ساختار مختلف با داشتن لایه

<sup>۱</sup> Hole transfer layer (HTL)

<sup>۲</sup> Density functional theory (DFT)

جاذب نور ثابت  $RbGeBr_3$  در نظر گرفته شده است؛ که هر دو نوع ساختار PSCs مورد نظر، دارای ساختاری مشابه با شکل (۲) هستند. به صورتی که، در ساختار اول ETL ماده نیم رسانا ITO و HTL ماده آلی PEDOT:PSS و در ساختار دوم، ETL دارای ماده نیم رسانا  $TiO_2$  و HTL شامل ماده آلی Spiro\_MeOTAD است [۳۶].

چند لایه‌ای‌های مورد نظر به ترتیب در ساختار اول و ساختار دوم عبارتند از: FTO/  $TiO_2$ /  $RbGeBr_3$ / Spiro- و FTO/ ITO/  $RbGeBr_3$ / PEDOT:PSS/ Au OMETAD/ Au. لایه جاذب نور، ماده پروسکایت معدنی،  $RbGeBr_3$ ، دارای شکاف نواری مستقیم ۱/۴۹ الکترون ولت است. به صورتی که، می‌تواند ویژگی‌های اپتیکی خوبی را در گستره‌ی طیف نور مرئی نشان دهد. این ماده در صفحه بلوری (۱۰۰)، جرم مؤثر الکترونی ۱/۳۱ و جرم مؤثر حفره ۰/۱۸ را نسبت به جرم الکترون ساکن دارد [۳۵]. جرم‌های مؤثر، تأثیر مستقیمی بر روی تحرک پذیری الکترون‌ها و حفره‌ها دارند [۳۷]. کمیت‌های فیزیکی اولیه این مواد که به عنوان لایه‌های مختلف برای انجام این پژوهش مورد نیاز هستند در جدول (۱) آمده است: [۳۸]  $TiO_2$  [۳۹]، [۴۰-۴۲] Spiro\_MeOTAD، [۴۳-۴۵] PEDOT:PSS [۳۸] و [۴۶]. همچنین، در جدول (۱)، الکترون‌خواهی  $\chi$ ، انرژی شکاف نواری  $E_g$ ، ثابت دی‌الکتریک  $\epsilon_r$ ، چگالی نوار رسانش  $N_c$ ، چگالی نوار ظرفیت  $N_v$ ، چگالی دهنده الکترون  $N_a$  و چگالی پذیرنده الکترون  $N_d$  آمده است. همچنین  $\mu_h$  و  $\mu_e$  تحرک پذیری الکترون و حفره، و  $\tau_h$ ،  $\tau_e$  طول عمر الکترون‌ها و حفره‌ها هستند.

جدول ۱ مشخصات فیزیکی مواد لایه‌ها در ساختار سلول‌های خورشیدی پروسکایتی (PSCs).

	ETL	ETL	HTL	HTL
پارامترها	$TiO_2$	ITO	Spiro_MeOTAD	PEDOT: PSS
ضخامت لایه‌ها (nm)	۱۰۰	۱۰۰	۳۰۰	۳۰۰
$\chi$ (eV)	۴	۴/۸	۲/۴۵	۲/۹
$E_g$ (eV)	۳/۲	۳/۶۵	۳	۲/۲۰
$\epsilon_r$	۹	۸/۹	۳	۳
$N_c$ ( $cm^{-3}$ )	$10^{19}$	$10^{18}$	$10^{20}$	$2/2 \times 10^{15}$
$N_v$ ( $cm^{-3}$ )	$10^{19}$	$10^{18}$	$10^{20}$	$1/8 \times 10^{18}$



	ETL	ETL	HTL	HTL
$N_a (cm^{-3})$	-	-	$3 \times 10^{18}$	$3.7 \times 10^{14}$
$N_d (cm^{-3})$	$5 \times 10^{19}$	$10^{20}$	-	-
$\mu_e \left( \frac{cm^2}{V.s} \right)$	۰/۰۲	۱۰	۲	$2 \times 10^{-2}$
$\mu_h \left( \frac{cm^2}{V.s} \right)$	۲	۱۰	۰/۰۱	$2 \times 10^{-4}$
$N_t (cm^{-3})$	$10^{15}$	$10^{19}$	$10^{15}$	$10^{15}$
$\tau_e, \tau_h (ns)$	۵،۲	۵،۲	۰/۱، ۰/۱	۰/۱، ۰/۱

### ۳-۲ روش محاسبات

با استفاده از الگوی اپتوالکترونیک در نیم‌رساناها و روش عددی المان محدود مبتنی بر شبیه‌سازی نرم افزار کامسول، نتایج مربوط به دو نوع ساختار PSCs را در اینجا بیان می‌کنیم. در الگوی اپتوالکترونیک رفتار ماده مورد نظر در برابر تابش نور فرودی از راه معادلات زیر بدست می‌آیند. در ابتدا باید ضریب جذب  $\alpha(\omega)$  ماده که نشان‌دهنده جذب ماده در طول موج‌های مختلف طیف نور خورشید است را بدست آورد. ضریب جذب از رابطه زیر تعیین می‌شود [۴۷]:

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi\omega\sqrt{-\text{Re}(\omega) + |\varepsilon|}}{c\sqrt{2}} \quad (1)$$

در این رابطه،  $\omega$  فرکانس طیف نور تابشی،  $|\varepsilon|$  اندازه ثابت گذردهی محیط مادی و  $c$  سرعت نور را نشان می‌دهد. ضریب جذب طیف خورشید مواد پروسکایتی اغلب از مرتبه‌ی  $[cm^{-1}] 10^5$  هستند. توجه به ضریب جذب مواد، برای بدست آوردن عمق نفوذ بسیار حائز اهمیت است؛ چرا که عمق نفوذ برابر با معکوس ضریب جذب می‌باشد. با بدست آوردن عمق نفوذ ماده مورد نظر، می‌توان کمینه ضخامت لازم را، برای جذب بیشترین طیف نوری محاسبه کرد. معادله (۲)، ضریب شکست کلی ماده را نشان می‌دهد که متشکل از ضریب شکست حقیقی  $n(\omega)$ ، که بیانگر انعکاس نور از ماده است و قسمت موهومی  $k(\omega)$  که عامل بسیار مهمی در شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی است و نقش جذب طیف نور خورشید در ماده را بر عهده دارد [۴۷]:

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (2)$$

ضریب انعکاس  $R(\omega)$  که مقدار انعکاس نور از سلول را مشخص می‌نماید [۴۷]:





$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (۳)$$

و در نهایت هدایت اپتیکی  $\sigma(\omega)$  ماده نمایش داده می شود [۴۷]:

$$\sigma(\omega) = -\frac{i\omega}{4\pi} \varepsilon(\omega) \quad (۴)$$

با حل معادلات پیوستگی پواسون در مطالعه نیم رساناها و با در نظر گرفتن آمار فرمی-دیراک می توان خروجی های مورد نظر در رابطه با PSCs را محاسبه کرد. معادله (۵) معادله پیوستگی چگالی بار آزاد را بیان می کند [۳۸ و ۴۸]:

$$\nabla \cdot (-\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r \cdot \nabla V) = \rho \quad (۵)$$

که  $\varepsilon_r$  ضریب دی الکتریک ماده و  $\varepsilon_0$  ثابت گذردهی خلا و پتانسیل الکترواستاتیکی را نشان می دهد. چگالی بار عبوری از یک سلول خورشیدی را می توان با استفاده از معادله (۶) محاسبه کرد [۳۸ و ۴۸]:

$$\rho_+ = q(p - n + N_d^+ - N_a^-) \quad (۶)$$

که در آن،  $q$  بار الکتریکی،  $p$  چگالی حفره ها،  $n$  چگالی الکترون ها،  $N_d^+$  چگالی ناخالصی الکترون های یونیزه شده در سیستم توسط ماده دهنده الکترون ETL و  $N_a^-$  چگالی ناخالصی الکترون های یونیزه شده در سیستم به کمک ماده پذیرنده الکترون که در نقش ماده جاذب نور و HTL هستند را، نشان می دهد. چگالی حفره ها و الکترون ها را با استفاده از معادله (۷) می توان

$$n = N_c e^{\frac{-E_c - E_F}{k_B T}}, p = N_v e^{\frac{E_v - E_F}{k_B T}} \quad (۷)$$

محاسبه کرد. به صورتی که،  $k_B$  ثابت بولتزمن و  $T$  دمای سلول خورشیدی است، که اغلب ۳۰۰ کلوین در نظر گرفته می شود.  $E_F$  انرژی فرمی ماده مورد نظر و  $E_c$  و  $E_v$  انرژی های نوار رسانش و نوار ظرفیت هستند. افزون بر آن، چگالی حالات مؤثر نوار رسانش و نوار ظرفیت به ترتیب از عبارت های  $N_p = 2 \left( \frac{2\pi m_p^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$  و  $N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_n^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$  محاسبه می شود. با استفاده از روابط پیوستگی در حالت ایستا، چگالی جریان الکترون و حفره به ترتیب با  $\nabla \cdot \vec{J}_p = 0$  و  $\nabla \cdot \vec{J}_n = 0$  مشخص می شوند. با توجه به اثرات میدان الکتریکی، غلظت حامل ها و گرادیان دما می توان این چگالی ها را در یک سلول خورشیدی به صورت زیر محاسبه کرد [۴۸]:

$$\vec{J}_n = qn\mu_n \nabla E_c + qD_n \nabla n - qnD_n \nabla \ln(N_c) + qnD_{n,th} \nabla \ln(T) \quad (۸)$$

در عبارت اول،  $\mu_n$  تحرک پذیری الکترون،  $\nabla E_c$  گرادیان انرژی نوار رسانش ماده نیم رسانا،  $D_n$  ضریب رانشی الکترون و بیانگر جریان رانشی در سلول خورشیدی است. مجموع جملات دوم و سوم بیانگر جریان بدست آمده به دلیل گرادیان جمعیت الکترونی است و جمله آخر نیز جریان



پخششی به دلیل تغییرات دما، در سلول را نشان می‌دهند. همچنین، رابطه مشابهی برای چگالی جریان حفره بر اساس معادله (۸) وجود دارد، با این تفاوت که در آن چگالی حفره  $p$  و تحرک‌پذیری حفره  $\mu_p$  است [۴۸].

$$\vec{J}_p = qp \cdot \mu_p \cdot \nabla E_v + qD_p \nabla p - qpD_p \nabla \ln(Nv) + qpD_{p,th} \nabla \ln(T) \quad (۹)$$

در رابطه (۷)،  $E_c = -(V + \chi_0)$  بیانگر انرژی نوار رسانش است؛ که به اندازه‌ی انرژی الکترون خواهی  $\chi_0$  از ولتاژ خلاء پایین‌تر است.  $E_v = -(V + \chi_0 + E_{g,0})$  نیز انرژی نوار ظرفیت است؛ که با اندازه‌ی انرژی شکاف نوری ماده از انرژی نوار رسانش بالاتر است [۳۹ و ۴۸]. با در نظر گرفتن تمام معادلات بیان شده و حل معادلات پیوستگی در یک نیم‌رسانا و در نظر گرفتن ویژگی‌های اپتیکی مواد مورد استفاده در PSCs، معادلات زیر برای بدست آوردن نتایج نهایی شبیه‌سازی سلول خورشیدی پروسکایتی محاسبه می‌شوند [۴۹]:

$$I = I_{ph} - I_D = I_{ph} - I_0 \left[ \exp \left[ \frac{eV}{k_B T_c} \right] - 1 \right] \quad (۱۰)$$

که در آن،  $I$  بیانگر جریان خالص، از تفاوت بین جریان فوتونی و جریان ایده‌آل دیود  $I_D$ ، نتیجه می‌شود.  $I_0$ ، جریان اشباع تاریکی است که بسیار به دما وابسته است. جریان تولید شده در یک سلول خورشیدی، بسیار به ولتاژ خارجی به کار رفته و مقدار جذب نور در سلول بستگی دارد. زمانی که در سلول ولتاژ صفر است؛ یعنی سلول معادل یک مدار کوتاه است، و چگالی جریان در بیشترین مقدار خود قرار دارد، که به آن چگالی جریان مدار کوتاه ( $J_{sc}$ ) می‌گویند. زمانی که جریان عبوری در سلول خورشیدی صفر است، سلول معادل یک مدار باز است؛ یعنی ولتاژ در بیشترین مقدار خود قرار دارد که به آن، ولتاژ مدار باز می‌گویند. که ولتاژ مدار باز با استفاده از معادله (۱۱) بدست می‌آید [۴۹]:

$$V_{oc} = \left( \frac{k_B T}{q} \right) \ln \left( \frac{J_{sc}}{J_0} \right) \quad (۱۱)$$

$J_0$  برابر است با، اختلاف چگالی جریانی که به ولتاژ اعمال شده به سیستم وابسته است و چگالی جریانی که به این ولتاژ اعمالی وابسته نیست. در همین راستا، توان خروجی سلول خورشیدی، از حاصل ضرب بیشینه جریان و بیشینه ولتاژ تولید شده در سلول  $P_{max} = I_{max} V_{max}$  و بیشینه جریان الکتریکی از رابطه  $I_{max} = \frac{eV_{max}}{k_B T_c + eV_{max}} (I_{sc} + I_D)$  محاسبه می‌شوند. با این ملاحظاتی، بازدهی سلول را می‌توان از رابطه:

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{I_{max} V_{max}}{P_{in}} \quad (۱۲)$$

تعیین کرد. که  $P_{in}$  توان ورودی نور به سلول خورشیدی است و در هر PSCs به ازاء یک سانتی‌متر مربع مقداری برابر ۱۰۰ میلی‌وات دارد [۴۹].



### ۳. روش کار و نتایج

در این مقاله هدف بدست آوردن بهینه‌ترین ساختار ممکن طراحی شده، برای رسیدن به بالاترین بازدهی از میان دو ساختار زیر است:

۱)  $FTO/ITO/RbGeBr_3/PEDOT:PSS/Au$

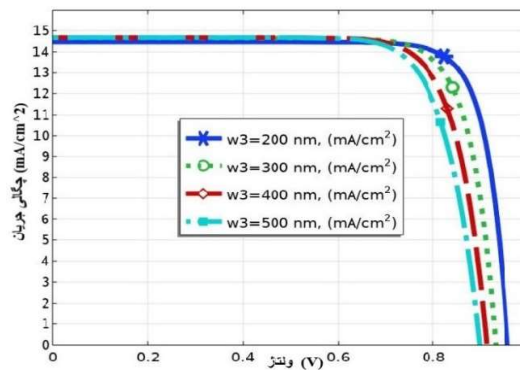
۲)  $FTO/TiO_2/RbGeBr_3/Spiro-OMeTAD/Au$

برای بهینه کردن هر دو ساختار PSCs بیان شده، ضخامت لایه انتقال‌دهنده حفره روی ۳۰۰ نانومتر ثابت در نظر گرفته شده است. ضخامت لایه‌ی انتقال‌دهنده الکترون از ۸۰ تا ۱۱۰ نانومتر و ضخامت لایه فعال معدنی جاذب نور  $RbGeBr_3$  از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر تغییر کرده است. همچنین، چهار عامل اصلی پارامترهای سلول‌های خورشیدی  $J_{SC}$ ،  $V_{OC}$ ، FF و PCE برای هر دو ساختار محاسبه شده‌اند. با استفاده از نتایج این چهار عامل اصلی می‌توان بازدهی نهایی هر دو ساختار را بدست آورده و در نهایت آن‌ها را با هم مقایسه کرد. نتایج محاسبات، در جدول‌های (۲) و (۳)، برای هر دو ساختار نشان داده شده است. در این مطالعه طول نفوذ الکترون‌ها و حفره‌ها مقدار ۱۰۰ نانومتر در نظر گرفته شده است [۳۶].

### ۳-۱ نتایج محاسبه شده برای هر ساختار

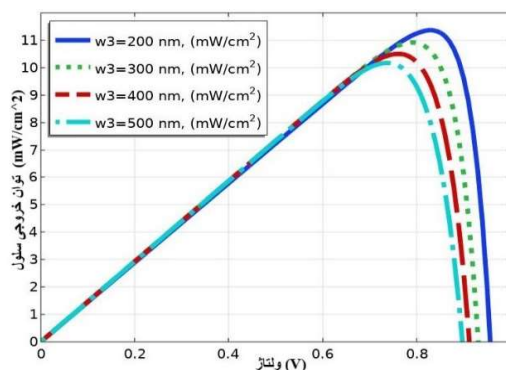
#### ساختار اول: $FTO/ITO/RbGeBr_3/PEDOT:PSS/Au$

در ساختار اول، ITO به عنوان لایه ETL و PEDOT:PSS نقش لایه HTL را دارند. در شبیه‌سازی، ضخامت لایه ETL از ۸۰ تا ۱۱۰ نانومتر و ضخامت لایه فعال جاذب نور از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر افزایش داده شده است. نتایج بدست آمده، در شکل (۳) و شکل (۴)، به صورت نمودارهای چگالی جریان\_ولتاژ و توان\_ولتاژ به ترتیب رسم شده‌اند.



شکل ۳ نمودار جریان - ولتاژ.





شکل ۴ نمودار توان-ولتاژ.

در شکل (۳) و شکل (۴)، ضخامت ۸۰ نانومتر برای لایه انتقال‌دهنده الکترون ITO ثابت نگه داشته شده و ضخامت لایه جاذب نور نیز از ۲۰۰ به ۵۰۰ نانومتر تغییر داشته است. در این شرایط، زمانی که ضخامت لایه جاذب نور ۲۰۰ نانومتر است: در شکل (۳)، سلول خورشیدی، چگالی جریان مدار کوتاه با مقدار  $14/47 \left(\frac{mA}{cm^2}\right)$  را تولید کرده است، که بسیار به تابش نور و میزان جذب آن به کمک لایه جاذب نور وابسته است. این در شرایطی است که سلول معادل یک مدار کوتاه در نظر گرفته می‌شود که بیشترین مقدار جریان را تولید می‌کند. زمانی که مدار سلول باز است، هیچ جریانی در سلول تولید نمی‌شود و ولتاژ در بیشترین مقدار خود قرار می‌گیرد که در این شرایط، ولتاژ مدار باز در حدود  $0/96 (V)$  است. زمانی که سلول مدار کوتاه و یا مدار باز است، توان تولیدی سلول خورشیدی (جریان در ولتاژ) صفر است. در حالی که وقتی سلول خورشیدی را معادل یک قطعه نوری که شامل مقاومت‌های سری و موازی و یک ولتاژ مثبت اعمال شده در آن را در نظر بگیریم، سلول دارای یک پیشینه توان است که برابر حاصل پیشینه جریان در پیشینه ولتاژ است.

با توجه به شکل (۴)، مشاهده می‌شود که بیشترین توان در حدود  $11/3 \left(\frac{mW}{cm^2}\right)$  قرار دارد. در نتیجه، با در نظر گرفتن توان ورودی نور خورشید در هر سانتی‌متر مربع از یک سلول خورشیدی، بازدهی نهایی  $11/37\%$  محاسبه شده است. در بقیه موارد با ثابت ماندن ضخامت لایه ETL در ۸۰ نانومتر و بیشتر شدن ضخامت لایه جاذب نور از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر، جریان مدار کوتاه، در حدود  $\left(\frac{mA}{cm^2}\right)$   $0/2$  افزایش یافته و ولتاژ مدار باز کاهش بسیار کمی داشته است. در شکل (۴)، توان الکتریکی تولیدی سلول، کاهشی در بازه‌ی  $1 \left(\frac{mW}{cm^2}\right)$  تا  $2 \left(\frac{mW}{cm^2}\right)$  را نشان می‌دهد. همچنین، در حالتی که لایه ETL، ۸۰ نانومتر و لایه فعال جاذب نور ۵۰۰ نانومتر است، بازدهی نهایی به  $10/17\%$  کاهش

می‌یابد. در ادامه محاسبات با افزایش ضخامت لایه ETL به ۹۰، ۱۰۰ و ۱۱۰ نانومتر، جریان مدار کوتاه کاهشی در بازه  $(\frac{mA}{cm^2})$  ۲/۷ تا  $(\frac{mA}{cm^2})$  ۲ را نشان می‌دهد، در حالی که کاهش ناچیزی در مقدار ولتاژ مدار باز مشاهده می‌شود (جدول (۲)). این کاهش جریان الکتریکی در سلول، به این دلیل است که با بیشتر شدن ضخامت لایه ETL، باز ترکیب بیشتری در فوتوالکترون‌های تولید شده در سطح مشترک بین لایه ETL و لایه معدنی جاذب نور رخ می‌دهد. با بالا رفتن ضخامت لایه ETL به ۱۱۰ نانومتر و لایه جاذب نور به ۵۰۰ نانومتر برای بهره‌وری، کاهشی در حدود ۵/۵ واحد محاسبه شده است.

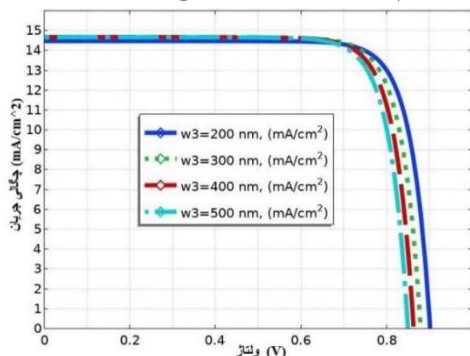
**جدول ۲** عوامل قراردادی در PSCs محاسبه شده برای ساختار اول با ثابت نگه داشتن ضخامت لایه ETL در هر مرحله و تغییرات در ضخامت لایه HTL (از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر).

ضخامت لایه انتقال دهنده الکترون (نانومتر)	ضخامت لایه جاذب نور (نانومتر)	$J_{sc} (\frac{mA}{cm^2})$	$V_{oc} (V)$	FF	PCE (%)
۸۰	۲۰۰	۱۴/۴۷	۰/۹۶	۰/۸۱	۱۱/۳۷
۸۰	۳۰۰	۱۴/۶۶	۰/۹۳	۰/۸۰	۱۰/۹۲
۸۰	۴۰۰	۱۴/۶۷	۰/۹۱	۰/۷۸	۱۰/۵۰
۸۰	۵۰۰	۱۴/۶۷	۰/۸۹	۰/۷۷	۱۰/۱۷
۹۰	۲۰۰	۱۱/۶۸	۰/۹۶	۰/۸۱	۹/۱۶
۹۰	۳۰۰	۱۱/۸۳	۰/۹۲	۰/۸۰	۸/۸۱
۹۰	۴۰۰	۱۱/۸۴	۰/۹۰	۰/۷۹	۸/۴۸
۹۰	۵۰۰	۱۱/۸۴	۰/۸۹	۰/۷۷	۸/۲۱
۱۰۰	۲۰۰	۹/۴۳	۰/۹۵	۰/۸۲	۷/۳۷
۱۰۰	۳۰۰	۹/۵۴	۰/۹۲	۰/۸۰	۷/۱۰
۱۰۰	۴۰۰	۹/۵۵	۰/۹۰	۰/۷۹	۶/۸۴
۱۰۰	۵۰۰	۹/۵۶	۰/۸۹	۰/۷۷	۶/۶۳
۱۱۰	۲۰۰	۷/۶۱	۰/۹۵	۰/۸۲	۵/۹۴
۱۱۰	۳۰۰	۷/۷۰	۰/۹۱	۰/۸۱	۵/۷۲
۱۱۰	۴۰۰	۷/۷۱	۰/۸۹	۰/۸۰	۵/۵۱
۱۱۰	۵۰۰	۷/۷۲	۰/۸۹	۰/۷۷	۵/۳۵

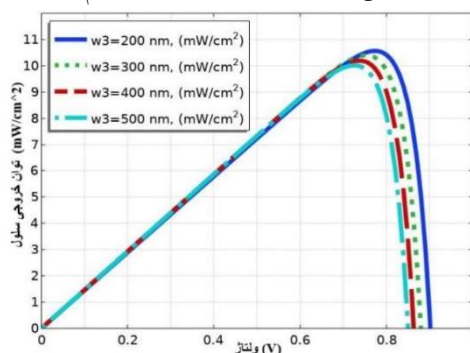
با توجه به نتایج بدست آمده (جدول (۲))، با ثابت ماندن ضخامت لایه ETL و افزایش ضخامت لایه جاذب نور، ولتاژ مدار باز و بازدهی نهایی کاهش می‌یابد، اگرچه جریان مدار کوتاه افزایش کمی را تجربه می‌نماید. این نتیجه، در تمام شبیه‌سازی‌های انجام شده در ساختار اول مشاهده می‌شود. از این رو، می‌توان این‌گونه نتیجه گرفت که، بیشترین بهره‌وری در شرایطی است که ETL دارای ضخامت ۸۰ نانومتر و لایه جاذب نور دارای ضخامت ۲۰۰ نانومتر است.

### ساختار دوم: FTO/ TiO<sub>2</sub>/ RbGeBr<sub>3</sub>/ Spiro-OMeTAD/ Au

در ساختار دوم، لایه انتقال‌دهنده الکترون به TiO<sub>2</sub> و لایه انتقال‌دهنده حفره به Spiro\_MeOTAD تغییر کرده‌اند. و در ادامه، دقیقاً مشابه با شبیه‌سازی ساختار اول، ضخامت لایه‌ی انتقال‌دهنده الکترون را از ۸۰ تا ۱۱۰ نانومتر و لایه فعال را از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر افزایش داده و محاسبات انجام شده است. نمودارهای خروجی چگالی جریان-ولتاژ (J-V) و ولتاژ-توان (P-) در شکل‌های (۵) و (۶) رسم شده‌اند. در نهایت، نتایج در جدول (۳)، گزارش شده‌اند.



شکل ۵ نمودار جریان-ولتاژ ساختار دوم.



شکل ۶ نمودار توان-ولتاژ ساختار دوم.



در ساختار دوم، شاهد کاهش چشمگیری در مقدار جریان مدار کوتاه نسبت به ساختار اول نبودیم. در حالی که، بیشینه بازدهی نهایی در این ساختار، ۱۰/۵۷٪ محاسبه شده است. در نمودارهای (۵) و (۶)، شبیه‌سازی با ضخامت ۸۰ نانومتر ثابت برای ETL و تغییر ضخامت لایه جاذب نور انجام شده است. در شرایطی که ضخامت لایه جاذب معدنی ۲۰۰ نانومتر است، مشاهده می‌شود که چگالی جریان مدار کوتاه برابر  $(\frac{mA}{cm^2})$  ۱۴/۴۵ و ولتاژ مدار باز در بیشینه مقدار خود، حدود ۰/۹۰ ولت است. در همین راستا، در شکل (۶)، نمودار توان الکتریکی تولید شده توسط سلول را نشان می‌دهد که بیشینه توان در حدود  $(\frac{mW}{cm^2})$  ۱۰/۵ و حاصل بیشینه جریان در بیشینه ولتاژ است. در بقیه موارد، با افزایش ضخامت لایه جاذب نور از ۲۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر، جریان مدار کوتاه در حدود  $(\frac{mA}{cm^2})$  ۰/۱ افزایش داشته، اگرچه ولتاژ مدار باز تغییر بسیار ناچیزی داشته است. همچنین، در شکل ۶، توان الکتریکی تولیدی سلول، کاهشی در حدود  $(\frac{mW}{cm^2})$  ۱/۲ را نشان می‌دهد. در نهایت بازدهی در شرایطی که ضخامت لایه ETL، ۸۰ نانومتر و ضخامت لایه فعال جاذب نور ۵۰۰ نانومتر است، به ۱۰/۰۱٪ کاهش یافته است. در جدول (۳)، تنها نتایج محاسبه شده برای بالاترین بازدهی ارائه شده است.

با توجه به نتایجی که در ساختار دوم محاسبه شد، در این ساختار هم با افزایش ضخامت لایه انتقال‌دهنده الکترون از ۸۰ نانومتر تا ۱۱۰ نانومتر و ضخامت لایه جاذب نور از ۲۰۰ نانومتر تا ۵۰۰ نانومتر، بازدهی نهایی کاهش یافته است. در نتیجه در این ساختار هم، بیشترین بازدهی مربوط به ضخامت ۸۰ نانومتر برای لایه ETL و ۲۰۰ نانومتر برای لایه جاذب نور است که، مقدار ۱۰/۵۷٪ محاسبه شد.

**جدول ۳** نتایج محاسبه شده برای چهار عامل قراردادی در ساختار دوم با توجه به اینکه لایه ETL در ۸۰ نانومتر ثابت و ضخامت لایه جاذب نور از ۲۰۰ نانومتر تا ۵۰۰ نانومتر افزایش می‌یابد.

ضخامت لایه انتقال‌دهنده الکترون (نانومتر)	ضخامت لایه جاذب نور (نانومتر)	$J_{sc}(\frac{mA}{cm^2})$	$V_{oc}(V)$	FF	PCE (%)
۸۰	۲۰۰	۱۴/۴۵	۰/۹۰	۰/۸۱	۱۰/۵۷
۸۰	۳۰۰	۱۴/۵۴	۰/۸۸	۰/۸۱	۱۰/۴۰
۸۰	۴۰۰	۱۴/۵۷	۰/۸۷	۰/۸۰	۱۰/۱۹
۸۰	۵۰۰	۱۴/۵۷	۰/۸۶	۰/۷۹	۱۰/۰۱

#### ۴. نتیجه‌گیری

هدف این پژوهش، بررسی ماده معدنی  $RbGeBr_3$ ، به عنوان لایه فعال معدنی جاذب نور در یک سلول خورشیدی پروسکایتی بود تا با محاسبه چهار عامل جریان مدار کوتاه ( $J_{SC}$ )، ولتاژ مدار باز ( $V_{OC}$ )، فاکتور پرشدگی (FF) و بازدهی ( $\eta_{max}$ ) در هر دو ساختار، عملکرد این سلول‌ها را بررسی و با هم مقایسه شوند. با مشاهده و مقایسه نتایج بدست آمده در هر دو ساختار بیان شده، نشان داده شد که ساختار اول با لایه‌های انتخابی  $FTO/ITO/RbGeBr_3/PEDOT:PSS/Au$  دارای بیشینه بازدهی ۱۱/۳۷٪، جریان مدار کوتاه  $14/47 \left(\frac{mA}{cm^2}\right)$  و ولتاژ مدار باز در حدود ۰/۹۶ ولت است. همچنین، ساختار دوم با جایگزینی مواد نیم‌رسانا متفاوت در نقش  $ETL$  و  $HTL$  طراحی شد،  $FTO/ITO/RbGeBr_3/PEDOT:PSS/Au$ ، بازدهی در حدود ۱۰/۵۷٪ و جریان مدار کوتاه  $14/45 \left(\frac{mA}{cm^2}\right)$  را نتیجه داد. این بیشینه بهره‌وری برای هر دو ساختار، در شرایطی که ضخامت ۸۰ نانومتر برای لایه  $ETL$ ، ۲۰۰ نانومتر برای لایه معدنی جاذب نور و ۳۰۰ نانومتر برای لایه  $HTL$  در نظر گرفته شدند، محاسبه شدند. همچنین، بازدهی نهایی هر دو ساختار بر پایه  $RbGeBr_3$ ، در مقایسه با سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با پایه  $CS$ ، چون  $CsSnBr_3$ ، بازدهی در حدود ۱۰/۴۶٪، جریان مدار کوتاه  $21/12 \left(\frac{mA}{cm^2}\right)$  و ولتاژ مدار باز ۰/۸۵ ولت را به صورت تجربی گزارش داده‌اند، قابل مقایسه می‌باشند [۲۸]. در نهایت می‌توان نتیجه گرفت که ساختار اول با ماده معدنی  $RbGeBr_3$  به عنوان لایه جاذب نور نسبت به ساختار دوم مناسب‌تر است. این گزارش می‌تواند برای مطالعه بیشتر این ماده در سلول‌های پیچیده‌تر و بهینه‌تر برای افزایش بهره‌وری نهایی اینگونه سلول‌ها راهنما باشد.

#### منابع

- [1] Sum, T. C., Mathews, N., "Advancements in perovskite solar cells: photophysics behind the photovoltaics", *Energy & Environmental Science*, 7(8), 2518-2534, 2014.
- [2] Elangovan, N. K., & Arumugam, S., "Chayaver: Indian-traditional dye to modern dye-sensitized solar cells", *Materials Research Express*, 6(6), 066206, 2019.
- [3] Al-Ashouri, A., Köhnen, E., Li, B., et al., "Monolithic perovskite/silicon tandem solar cell with > 29% efficiency by enhanced hole extraction", *Science.Org*, 370(6522), 1300-1309, 2020. <https://doi.org/10.1126/science.abd4016>
- [4] Chung, J., Shin, S., et al., "Record-efficiency flexible perovskite solar cell and module enabled by a porous-planar structure as an electron transport layer", *Energy & Environmental Science*, 13(12), 4854-4861, 2020.
- [5] Lee, J., Jin, I., & Jung, J.W., "Binary-mixed organic electron transport layers for planar heterojunction perovskite solar cells with high efficiency and thermal reliability", *Chemical Engineering Journal*, 420, 129678, 2021.





- [6] Yao, H., Zhao, J., et al., "Research and progress of black metastable phase CsPbI<sub>3</sub> solar cells", *Materials Chemistry Frontiers*, 5(3), 1221-1235, 2021.
- [7] Chen, S., Xiao, X., Gu, H., et al., "Iodine reduction for reproducible and high-performance perovskite solar cells and modules", *Science Advances*, 7(10), eabe8130, 2021. <https://doi.org/10.1126/SCIADV.ABE8130>
- [8] Chen, Z., Cheng, Y., et al., "In-situ atmospheric-pressure dielectric barrier discharge plasma treated CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> for perovskite solar cells in regular architecture", *Applied Surface Science*, 437, 468-475, 2019.
- [9] Li, Z., Gao, Y., et al., "cPCN-Regulated SnO<sub>2</sub> composites enables perovskite solar cell with efficiency beyond 23%", *Springer, Nano-micro letters*, 13, 1-16, 2021.
- [10] Wang, H., Dong, Z., Liu, et al., "Roles of Organic Molecules in Inorganic CsPbX<sub>3</sub> Perovskite Solar Cells", *Advanced Energy Materials*, 11(1), 2002940, 2021. <https://doi.org/10.1002/AENM.202002940>
- [11] Pham, H. D., Chien, T., et al., "Development of dopant-free organic hole transporting materials for perovskite solar cells", *Advanced Energy Materials*, 10(13), 1903326, 2020. <https://doi.org/10.1002/aenm.201903326>
- [12] Pham, H. D., Om, Wu, Z., et al., "Low-Cost Alternative High-Performance Hole-Transport Material for Perovskite Solar Cells and Its Comparative Study with Conventional SPIRO-OMeTAD", *Advanced Electronic Materials*, 3(8), 1700139, 2017. <https://doi.org/10.1002/aelm.201700139>
- [13] Manser, J., & Kamat, P. V., "Band filling with free charge carriers in organometal halide perovskites", *Nature Photonics*, 8(9), 737-743, 2014. <https://doi.org/10.1039/C4TA04994B>
- [14] De Wolf, S., Holovsky, J., et al., "Organometallic halide perovskites: sharp optical absorption edge and its relation to photovoltaic performance", *The journal of physical chemistry letters*, 5(6), 1035-1039, 2014.
- [15] Stranks, S. D., Eperon, G. E., et al., "Electron-hole diffusion lengths exceeding 1 micrometer in an organometal trihalide perovskite absorber", *Science*, 342(6156), 341-344, 2013. <https://doi.org/10.1126/SCIENCE.1243982>
- [16] D'innocenzo, V., Grancini, G., et al., "Excitons versus free charges in organo-lead trihalide perovskites", *Nature communication*, 5(1), 3586, 2014.
- [17] Sahare, S., Pham, H. D., et al., "Emerging Perovskite Solar Cell Technology: Remedial Actions for the Foremost Challenges", *Advanced Energy Materials*, 11(42), 2101085, 2021. <https://doi.org/10.1002/AENM.202101085>
- [18] Aharon, S., Dymshits, A., et al., "Temperature dependence of hole conductor free formamidinium lead iodide perovskite based solar cells", *Journal of Materials Chemistry A*, 3(17), 9171-9178, 2015.
- [19] Green, M. A., Ho-Baillie, A., & Snaith, H. J., "The emergence of perovskite solar cells", *Nature Photonics*, 8(7), 506-514, 2014. <https://doi.org/10.1038/NPHOTON.2014.134>
- [20] Egger, D. A., & Kronik, L., "Role of dispersive interactions in determining structural properties of organic-inorganic halide perovskites: Insights from first-principles calculations", *Journal of Physical Chemistry Letters*, 5(15), 2728-2733, 2014. <https://doi.org/10.1021/JZ5012934>
- [21] Choi, J., & Billinge, S. J., "Perovskites at the nanoscale: from fundamentals to applications", *Nanoscale*, 8(12), 6206-6208, 2016.
- [22] Seo, J., Noh, J. H., & Seok, S. I., "Rational Strategies for Efficient Perovskite Solar Cells", *Accounts of Chemical Research*, 49(3), 562-572, 2016. <https://doi.org/10.1021/ACS.ACCOUNTS.5B00444>
- [23] Green, M., Dunlop, E., & Yoshita, M., "Solar cell efficiency tables", *Progress in photovoltaics: research and applications*, 29(1), 3-15, 2014. <https://doi.org/10.1038/NPHOTON.2014.134>
- [24] Stranks, S. D., & Snaith, H. J., "Metal-halide perovskites for photovoltaic and light-emitting devices", *Nature Nanotechnology*, 10(5), 391-402, 2015.



- [25] Zhang, Y., Chen, S., et al., "Intrinsic instability of the hybrid halide perovskite semiconductor  $CH_3NH_3PbI_3$ ", *Chinese Physics Letters*, 35(3), 036104, , 2018.
- [26] Luo, Y., Xie, F., Chen, J., et al., "Uniform stepped interfacial energy level structure boosts efficiency and stability of  $CsPbI_2Br$  solar cells", *Advanced Functional Materials*, 31(34), 2103316, 2021.
- [27] Ye, T., Wang, X., et al., "Localized electron density engineering for stabilized B- $\gamma$   $CsSnI_3$ -based perovskite solar cells with efficiencies > 10%", *ACS Energy Letters*, 6(4), 1480-1489, 2021.
- [28] Chen, L., Lee, C., et al., "Synthesis and optical properties of lead-free cesium tin halide perovskite quantum rods with high-performance solar cell application", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 7(24), 5028-5035, 2016.
- [29] Kulbak, M., Gupta, S., et al., "Cesium enhances long-term stability of lead bromide perovskite-based solar cells", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 7(1), 167-172, 2023.
- [30] Wang, R., Mujahid, M., et al., "A review of perovskites solar cell stability", *Advanced Functional Materials*, 29(47), 1808843, 2019. <https://doi.org/10.1002/adfm.201808843>.
- [31] Akbulatov, A., Luchkin, S., et al., "Probing the intrinsic thermal and photochemical stability of hybrid and inorganic lead halide perovskites", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 8(6), 1211-1218, 2017.
- [32] Eperon, G., Paternò, G., et al., "Inorganic caesium lead iodide perovskite solar cells", *Journal of Materials Chemistry A*, 3(39), 19688-19695, 2015.
- [33] Zeng, Q., Zhang, X., et al., "Inorganic  $CsPbI_2Br$  Perovskite Solar Cells: The Progress and Perspective", *Solar RRL*, 3(1), 1800239, 2019. <https://doi.org/10.1002/SOLR.201800239>
- [34] Chang, C. ; Fang, X. , et al., "Printable  $CsPbI_3$  perovskite solar cells with PCE of 19% via an additive strategy", *Wiley Online Library*, 32(40), 2020. <https://doi.org/10.1002/adma.202001243>
- [35] Yu, Z., Ma, Q., Liu, B., et al., "Oriented tuning the photovoltaic properties of  $\gamma$ - $RbGeX_3$  by strain-induced electron effective mass mutation", *Journal of Physics D: Applied Physics*, 50(46), 465101, 2017.
- [36] Elangovan, N. K., & Sivaprakasam, A., "Investigation of parameters affecting the performance of Perovskite solar cells", *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 710(1), 66-73, 2020. <https://doi.org/10.1080/15421406.2020.1829425>
- [37] Siddiqui, H., "Lead-free perovskite quantum structures towards the efficient solar cell", *Materials Letters*, 249, 99-103, 2019. <https://doi.org/10.1016/J.MATLET.2019.04.051>
- [38] Azri, F., Meftah, A., Sengouga, N., "Electron and hole transport layers optimization by numerical simulation of a perovskite solar cell", *Solar Energy*, 181, 372-378, 2019.
- [39] Pandey, R., "Microstructures, Numerical simulations: Toward the design of 27.6% efficient four-terminal semi-transparent perovskite/ $SiC$  passivated rear contact silicon tandem solar cell", *Superlattices and Microstructures*, 100, 656-666, 2016.
- [40] Minemoto, T., "Device modeling of perovskite solar cells based on structural similarity with thin film inorganic semiconductor solar cells", *Journal of Applied Physics*, 116(5), 2014.
- [41] Kavan, L., & Gratzel, M., "Highly efficient semiconducting  $TiO_2$  photoelectrodes prepared by aerosol pyrolysis", *Electrochemical Acta*, 40(5), 643-652, 1995.
- [42] Agarwal, S., Seetharaman, M., et al., "On the uniqueness of ideality factor and voltage exponent of perovskite-based solar cells", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 5(23), 4115-4121, 2014. <https://doi.org/10.1021/jz5021636>
- [43] Kim, H. S., & Park, N. G., "Parameters affecting I-V hysteresis of  $CH_3NH_3PbI_3$  perovskite solar cells: Effects of perovskite crystal size and mesoporous  $TiO_2$  layer",



- Journal of Physical Chemistry Letters*, 5(17), 2927–2934, 2014. <https://doi.org/10.1021/JZ501392M>
- [44] Snaith, H. J., & Grätzel, M., "Electron and hole transport through mesoporous TiO<sub>2</sub> infiltrated with spiro-MeOTAD", *Advanced Materials*, 19(21), 3643–3647, 2007. <https://doi.org/10.1002/ADMA.200602085>
- [45] Poplavskyy, D., & Nelson, J., "Nondispersive hole transport in amorphous films of methoxy-spirofluorene-arylamine organic compound", *Journal of Applied Physics*, 93(1), 341–346, 2003. <https://doi.org/10.1063/1.1525866>
- [46] Minemoto, T., & Murata, M., "Impact of work function of back contact of perovskite solar cells without hole transport material analyzed by device simulation", *Current Applied Physics*, 14(11), 1428–1433, 2014.
- [47] Houari, M., Bouadjemi, B., et al., "Semiconductor behavior of halide perovskites AGeX<sub>3</sub> (A = K, Rb and Cs; X = F, Cl and Br): first-principles calculations", *Indian Journal of Physics*, 94(4), 455–467, 2020. <https://doi.org/10.1007/S12648-019-01480-0>
- [48] Zandi, S., "Finite element simulation of perovskite solar cell: A study on efficiency improvement based on structural and material modification", *Solar Energy*, 179, 298–306, 2019.
- [49] Kalogirou S. A., "Solar Energy Engineering: Processes and Systems" - Elsevier, Google Books. *Process, Syst, 1st ed. Biritish Library*, 1-755, 2009. Retrieved September 3, 2023.



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

