

УДК 621.383.51

PACS: 84.60.Jt

Моделирование структуры бессвинцового перовскитного солнечного элемента

А. В. Саенко, С. П. Малюков, А. А. Рожко

Рассмотрено численное моделирование бессвинцового перовскитного солнечного элемента в программе SCAPS-1D для оптимизации его структуры и улучшения эффективности преобразования энергии. Проведено исследование влияния толщины, концентраций дефектов и акцепторов в слое бессвинцового перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, а также работы выхода из материала тыльного контакта на фотоэлектрические параметры солнечного элемента. Получено, что оптимальная толщина слоя $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ составляет 500 нм, концентрация дефектов должна составлять порядка 10^{14} – 10^{15} см^{-3} , а оптимальная концентрация акцепторов должна составлять 10^{16} см^{-3} . Показано, что работа выхода материала тыльного контакта должна быть не менее 4,9–5 эВ для создания высокоэффективных солнечных элементов. Получена максимальная эффективность 23,13 % для перовскитного солнечного элемента со структурой FTO/ TiO_2 / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ / Cu_2O /C (ток короткого замыкания 31,94 мА/см^2 , напряжение холостого хода 0,95 В, фактор заполнения 76,07 %). Результаты могут быть использованы при разработке и изготовлении нетоксичных, высокоэффективных и недорогих перовскитных солнечных элементов.

Ключевые слова: солнечный элемент, численное моделирование, бессвинцовый перовскит, концентрация дефектов, толщина слоя, концентрация акцепторов, тыльный контакт.

DOI: 10.51368/1996-0948-2022-1-19-27

Введение

В настоящее время существенно возрастает интерес к возобновляемым источникам энергии, поскольку она является экологически чистой и не оказывает негативного воздействия на окружающую среду. Тонкопленочные солнечные элементы, включающие в качестве фотоактивного материала металло-

органические соединения со структурой перовскита ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{MX}_3$, М–Pb, Sn, X–I, Cl, Br), показывают эффективность преобразования энергии более 20 %. Высокая эффективность данных солнечных элементов является следствием таких свойств перовскитов, как высокий коэффициент поглощения, высокая подвижность и большая диффузионная длина носителей заряда. Технология изготовления перовскитных солнечных элементов не требует энергоемких и сложных технологических процессов, что делает возможность создавать легкие, недорогие и гибкие пленочные устройства [1–3].

Несмотря на впечатляющий прогресс перовскитных солнечных элементов, их коммерциализация по-прежнему требует решения нескольких проблем, включая стабильность при воздействии света, влажности и высокой температуры, а также усовершенствование процессов изготовления и оптимизация струк-

Саенко Александр Викторович, к.т.н., доцент.

E-mail: avsaenko@sfedu.ru

Малюков Сергей Павлович, д.т.н., профессор,

чл.-корр. РАН.

E-mail: spmalyukov@sfedu.ru

Рожко Андрей Алексеевич, аспирант.

E-mail: rozhko@sfedu.ru

Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения Южного федерального университета.

Россия, 347922, г. Таганрог, ул. Шевченко, 2.

Статья поступила в редакцию 27 декабря 2021 г.

© Саенко А. В., Малюков С. П., Рожко А. А., 2022

туры. Кроме того, высокоэффективные перовскитные солнечные элементы содержат свинец (Pb), который не является экологичным материалом и может оказывать негативное воздействие на окружающую среду. Проблема стабильности может решаться за счет оптимизации структуры устройства и герметизации. Использование бессвинцовых перовскитов в структуре солнечного элемента имеет существенное значение для их дальнейшего развития и коммерциализации. Для решения данной проблемы наиболее перспективным является бессвинцовый перовскит $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, который обладает подходящей шириной запрещенной зоны (1,3 эВ) для поглощения солнечного излучения в видимой области спектра [4–6].

Исследуемая планарная структура перовскитного солнечного элемента на стеклянной подложке включает электронный проводящий слой (TiO_2), фотоактивный слой ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$) и дырочный проводящий слой (Cu_2O). Полупроводник *n*-типа TiO_2 является перспективным материалом из-за положения энергетического уровня дна зоны проводимости для инжекции электронов, относительно высокой подвижности электронов (до $20 \text{ см}^2/\text{Вс}$), химической стабильности, низкой стоимости и экологичности [7]. Полупроводник *p*-типа Cu_2O является перспективным материалом для замены дорогостоящего органического соединения Spiro-OMeTAD, поскольку обладает подходящим расположением энергетических зон, высокой подвижностью носителей заряда (до $110 \text{ см}^2/\text{Вс}$), а также не токсичностью и невысокой стоимостью [8]. В качестве фронтального и тыльного контактов в структуре солнечного элемента широко используются FTO или ITO и золото (Au). Замена дорогостоящего Au тыльного контакта (работа выхода 5,1 эВ) также является важной задачей. Среди материалов тыльного контакта (Me) многообещающими являются углерод (C), медь (Cu), серебро (Ag) и алюминий (Al) [4, 9].

В настоящей работе создана модель бессвинцового перовскитного солнечного элемента со структурой FTO/ TiO_2 / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ / Cu_2O /Me в программе численного моделирования SCAPS-1D. Проведено исследование влияния толщины, кон-

центраций дефектов и акцепторов в слое бессвинцового перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, а также работы выхода из материала тыльного контакта на фотоэлектрические параметры солнечного элемента.

Структура устройства и параметры моделирования

Численное моделирование структуры солнечных элементов является эффективным способом повышения их фотоэлектрических характеристик за счет оптимизации различных физических параметров. Существует несколько программ численного моделирования, позволяющих разрабатывать и исследовать структуры солнечных элементов, среди которых AMPS-1D, SCAPS-1D, PC1D, AFORS-HET и другие [10, 11].

SCAPS-1D является программой одномерного численного моделирования структур солнечных элементов и широко используется для прогнозирования плотности тока короткого замыкания ($J_{\text{кз}}$), напряжения холостого хода ($V_{\text{хх}}$), фактора заполнения (FF) и эффективности (η) перовскитных солнечных элементов. В основу SCAPS-1D положена нестационарная диффузионно-дрейфовая система уравнений полупроводника, в которую входят уравнения непрерывности и уравнение Пуассона [11–14]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_n \left(-n \frac{\partial \phi}{\partial x} + \varphi_t \frac{\partial n}{\partial x} \right) \right] + G - R = \frac{\partial n}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_p \left(p \frac{\partial \phi}{\partial x} + \varphi_t \frac{\partial p}{\partial x} \right) \right] + G - R = \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = \frac{q}{\varepsilon_0} (n - p - N_D + N_A - p_t + n_t), \quad (3)$$

где n , p – концентрация электронов и дырок; μ_n , μ_p – подвижности электронов и дырок; ϕ – электрический потенциал; φ_t – температурный потенциал; q – элементарный заряд; ε – относительная диэлектрическая проницаемость; ε_0 – диэлектрическая постоянная; G – скорость оптической генерации электронно-дырочных пар; R – скорость рекомбинации

электронно-дырочных пар; N_D , N_A – концентрация донорной и акцепторной легирующей примеси; n_i , p_i – плотность ловушек для электронов и дырок.

При моделировании рассматривался перовскитный солнечный элемент со структурой (рис. 1), состоящей из трех слоев и двух контактов: фронтальный контакт (FTO), электронный проводящий слой (TiO_2), фотоактивный слой ($CH_3CN_3PbI_3/CH_3NH_3SnI_3$), дырочный проводящий слой (Cu_2O) и тыльный контакт ($Au/Ag/C/Cu/Al$). Основные физические параметры материалов, используемые при моделировании структуры солнечного элемента, приведены в табл. 1 [4, 5, 14–18]. Для всех слоев эффективное сечение захвата электронов и дырок дефектом принималось равным $2 \times 10^{-14} \text{ см}^2$, а тепловая скорость носителей заряда 10^7 см/с . Коэффициент поглощения для каждого слоя составлял 10^5 см^{-1} при стандартном спектре плотности потока фотонов AM1.5G. Тип дефектов кристаллической решетки (центров рекомбинации) задавался нейтральным, а их локальный энергетический уровень устанавливался в

центре запрещенной зоны, поэтому механизм рекомбинации описывался согласно теории Шокли-Рида-Холла [15]. Работа выхода из фронтального контакта (FTO) составляла 4,4 эВ. Величина последовательного сопротивления составляла 1 (Ом см^2), а шунтирующего 10^6 (Ом см^2) [4, 14]. Напряжение на контактах варьировалось от 0 В до 1,2 В.

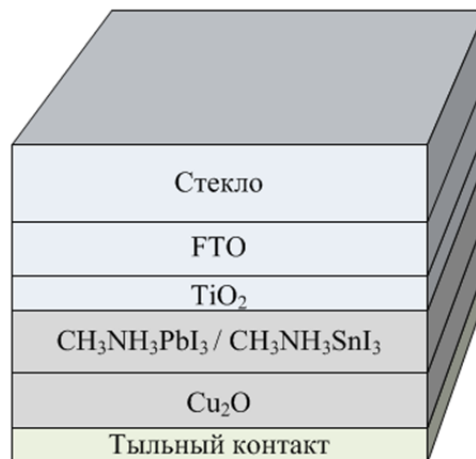


Рис. 1. Схематическое изображение моделируемой структуры перовскитного солнечного элемента

Таблица 1

Физические параметры материалов структуры солнечного элемента

Параметры	TiO_2	$CH_3CN_3PbI_3$	$CH_3CN_3SnI_3$	Cu_2O
Толщина, нм	50	400	400	250
$N_A, \text{см}^{-3}$	–	–	–	10^{18}
$N_D, \text{см}^{-3}$	10^{17}	–	–	–
$E_g, \text{эВ}$	3,2	1,55	1,3	2,17
$\chi, \text{эВ}$	4,0	3,9	4,17	3,2
ϵ	9	6,5	8,2	7,11
$N_C/N_V (\text{см}^{-3})$	$2,2 \times 10^{18}/1,8 \times 10^{19}$	$2,2 \times 10^{18}/1,8 \times 10^{19}$	$1 \times 10^{18}/1 \times 10^{18}$	$2,2 \times 10^{18}/1,8 \times 10^{19}$
$\mu_n/\mu_p, \text{см}^2/(\text{В с})$	20/10	2/2	1,6/1,6	80/80
$N_t, \text{см}^{-3}$	10^{15}	$2,5 \times 10^{13}$	1×10^{15}	10^{15}

Результаты моделирования

Для подтверждения адекватности и точности результатов моделирования была создана модель солнечного элемента в программе SCAPS-1D со структурой FTO/ TiO_2 (50 нм)/ $CH_3NH_3PbI_3$ (400 нм)/Spiro-OMeTAD (250 нм)/Au [14] и проведено сравнение результатов моделирования её фотоэлектрических параметров с экспериментальными дан-

ными, представленными в работе [19]. Результаты моделирования показывают близкое совпадение с экспериментальными данными. При этом солнечный элемент с дырочным проводящим слоем Cu_2O обладает лучшими параметрами по сравнению со слоем Spiro-OMeTAD и имеет эффективность равную 20,47 % для фотоактивного слоя $CH_3NH_3PbI_3$ и 16,1 % для фотоактивного слоя $CH_3NH_3SnI_3$ (табл. 2).

Таблица 2

Теоретические и экспериментальные параметры солнечных элементов

	$J_{кз}$, мА/см ²	$V_{кк}$, В	FF, %	η , %
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /Spiro-OMeTAD/Au (эксп. [19])	22,75	1,13	75,01	19,30
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /Spiro-OMeTAD/Au (теор.)	22,39	1,12	76,21	19,19
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /Cu ₂ O/Au (теор. [14])	22,53	1,12	80,79	20,47
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ SnI ₃ /Cu ₂ O/Au (теор.)	30,07	0,82	65,25	16,10

Важным фактором, влияющим на фотоэлектрические параметры перовскитного солнечного элемента, является концентрация дефектов в кристаллической решетке перовскита, поскольку большая концентрация дефектов приводит к более высокой скорости рекомбинации и быстрой деградации слоя перовскита. В пленках металлоорганических перовскитов дефекты присутствуют в виде точечных дефектов, таких как вакансии (дефекты по Шоттки), междоузельные атомы, дефекты по Френкелю, линейных дефектов (дислокации) и границы зерен [20]. Кроме того, вследствие процесса самолегирования в перовските CH₃NH₃SnI₃, т. е. создания р-типа проводимости, могут возникать примесные дефекты замещения и внедрения [21, 22]. Рекомбинация Шокли-Рида-Холла через локальные уровни, создаваемые дефектами кристаллической решетки, является основным механизмом в перовскитных солнечных элементах, поскольку слой перовскита обычно имеет высокую концентрацию дефектов. Скорость рекомбинации (R) Шокли-Рида-Холла определяется по формулам [5, 13–15]:

$$R = \frac{n \times p - n_i^2}{\tau_n \left(n + N_c e^{\frac{-E_c + E_f}{kT}} \right) + \tau_p \left(p + N_v e^{\frac{-E_f + E_v}{kT}} \right)}, \quad (4)$$

$$\tau_{n,p} = \frac{1}{\sigma_{n,p} v_{n,p} N_t}, \quad (5)$$

где τ_n , τ_p – времена жизни электронов и дырок; $\sigma_{n,p}$ – эффективное сечение захвата электронов и дырок дефектом; E_c , E_v – энергетические уровни дна зоны проводимости и потолка валентной зоны; E_f – локальный энергетический уровень, создаваемый дефектами; $v_{n,p}$ – тепловая скорость электронов и дырок; N_t – концентрация дефектов.

Диффузионная длина ($L_{n,p}$) электронов и дырок в перовските определяется с помощью уравнения [5, 15–18]:

$$L_{n,p} = \sqrt{D_{n,p} \tau_{n,p}}, \quad (6)$$

$$D_{n,p} = \frac{kT}{q} \mu_{n,p}, \quad (7)$$

где $D_{n,p}$ – коэффициент диффузии электронов и дырок.

Для исследования влияния концентрации дефектов в бессвинцовом перовските CH₃NH₃SnI₃ на фотоэлектрические параметры солнечного элемента проведено моделирование при изменении концентрации дефектов в диапазоне от 10¹³ см⁻³ до 10¹⁷ см⁻³ и остальных параметрах, приведенных в табл. 1 [5].

В табл. 3 приведены значения диффузионной длины и времени жизни электронов и дырок, полученные с помощью уравнений 6 и 7, от концентрации дефектов в перовските и используемые при моделировании. Показано, что с увеличением концентрации дефектов в перовските время жизни носителей заряда уменьшается, а скорость рекомбинации увеличивается.

Таблица 3

Значения диффузионной длины и времени жизни носителей заряда от концентрации дефектов в перовските

N_t , см ⁻³	10 ¹³	10 ¹⁴	10 ¹⁵	10 ¹⁶	10 ¹⁷
$L_{n,p}$, мкм	1,431	0,456	0,143	0,045	0,014
$\tau_{n,p}$, нс	500	50	5	0,5	0,05

Из рис. 2 видно, что при изменении концентрации дефектов в перовските от 10^{13} см^{-3} до 10^{17} см^{-3} эффективность солнечного элемента снижается с 25,12 % до 0,81 %, при этом плотность тока короткого замыкания уменьшается с $31,18 \text{ мА/см}^2$ до $5,29 \text{ мА/см}^2$, а напряжение холостого хода с 1,03 В до 0,55 В. Таким образом, фотоэлектрические параметры солнечного элемента значительно

снижаются при увеличении концентрации дефектов в перовските $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$. Практическое получение значений концентрации дефектов ниже 10^{14} см^{-3} очень сложно, поэтому для получения высокой эффективности концентрация дефектов должна составлять порядка $10^{14}\text{--}10^{15} \text{ см}^{-3}$ за счет улучшения кристаллической структуры, т. е. оптимизации технологии формирования слоя перовскита.

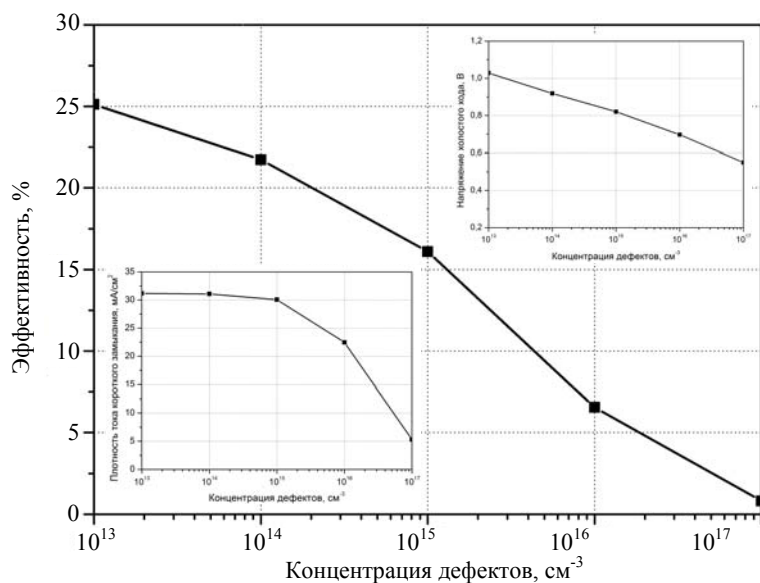


Рис. 2. Зависимости эффективности, плотности тока короткого замыкания и напряжения холостого хода от концентрации дефектов в слое перовскита

Основным фактором, влияющим на фотоэлектрические параметры перовскитных солнечных элементов, является толщина слоя перовскита, поскольку она осуществляет поглощение солнечного излучения и генерацию электронно-дырочных пар [14]. Для исследования влияния толщины слоя перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ на параметры солнечного элемента проведено моделирование при изменении толщины в диапазоне от 100 нм до 1000 нм, концентрации дефектов 10^{14} см^{-3} и остальных параметрах, приведенных в табл. 1.

Из рис. 3 видно, что эффективность солнечного элемента сначала возрастает с 13,89 % до 21,96 % при увеличении толщины слоя перовскита до 500 нм, а затем снижается до 1000 нм (эффективность 19,86 %). Увеличение толщины слоя перовскита приводит к поглощению большего количества фотонов и генерации большего количества избыточных носителей заряда, что способствует возрастанию плотности тока короткого замыкания с $18,01 \text{ мА/см}^2$ до $34,11 \text{ мА/см}^2$ (рис. 3). Увеличение толщины слоя перовскита также приводит к небольшому уменьшению напряжения

холостого хода на 0,11 В (с 0,98 В до 0,87 В), что связано с увеличением плотности темнового тока насыщения (J_0) за счет возрастания вероятности рекомбинации носителей заряда. Это можно объяснить зависимостью напряжения холостого хода (V_{xx}) от плотности темнового тока насыщения и фотогенерируемой плотности тока короткого замыкания ($J_{\text{кз}}$) [16, 18]:

$$V_{\text{xx}} = \frac{AkT}{q} \ln \left(\frac{J_{\text{кз}}}{J_0} + 1 \right), \quad (8)$$

где A – коэффициент идеальности диода; kT/q – температурный потенциал. Напряжение холостого хода ограничивается величиной плотности темнового тока насыщения, которая возрастает при увеличении толщины слоя перовскита. Таким образом, толщина слоя перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ равная 500 нм является оптимальной, при которой эффективность достигает максимального значения 21,96 % (плотности тока короткого замыкания $32,35 \text{ мА/см}^2$, напряжения холостого хода 0,91 В).

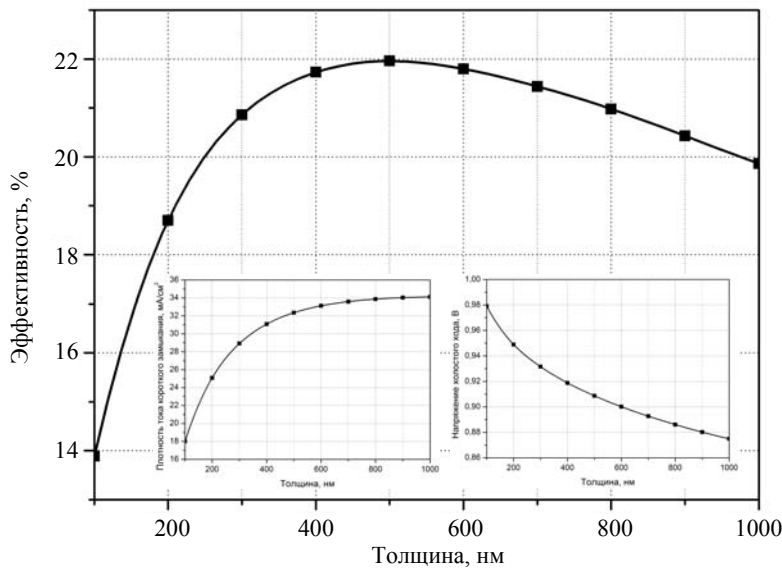


Рис. 3. Зависимости эффективности, плотности тока короткого замыкания и напряжения холостого хода от толщины слоя перовскита

Кроме концентрации дефектов и толщины перовскита на фотоэлектрические параметры солнечных элементов существенно влияет концентрация акцепторов в слое перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$. При воздействии окружающей среды в слое $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ происходит процесс самолегирования, который связан с окислением иона Sn^{2+} до более стабильного Sn^{4+} (легирующая примесь). Этот процесс приводит к созданию p -типа

проводимости в слое $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ с концентрацией акцепторов от 10^{14} см^{-3} до 10^{19} см^{-3} [5, 21, 22].

На рис. 4 показано, что увеличение концентрации акцепторов в слое перовскита от 10^{14} см^{-3} до 10^{16} см^{-3} приводит к увеличению эффективности солнечного элемента с 22,01 % до 23,13 %, а дальнейшее увеличение концентрации акцепторов до 10^{19} см^{-3} приводит к снижению эффективности до 22,12 %.

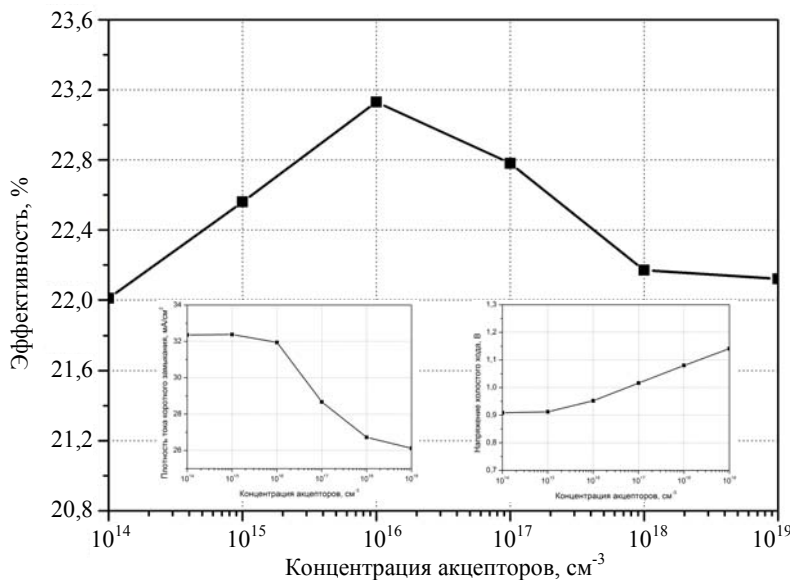


Рис. 4. Зависимости эффективности, плотности тока короткого замыкания и напряжения холостого хода от концентрации акцепторов в слое перовскита

Увеличение эффективности солнечного элемента до 10^{16} см^{-3} связано с тем, что концентрация генерируемых носителей заряда практически не изменяется (плотность тока короткого замыкания незначительно уменьшается с $32,35 \text{ mA/cm}^2$ до $26,11 \text{ mA/cm}^2$), а энергетический уровень Ферми в перовските

снижается и приводит к возрастанию напряжения холостого хода с $0,91 \text{ В}$ до $0,95 \text{ В}$. Дальнейшее возрастание концентрации акцепторов приводит к резкому уменьшению плотности тока короткого замыкания до $26,11 \text{ mA/cm}^2$, что может быть связано с увеличением скорости рекомбинации носителей

заряда в слое перовскита, и снижению эффективности. Таким образом, оптимальная концентрация акцепторов должна составлять 10^{16} см^{-3} , что позволяет получить максимальную эффективность 23,13 % (плотности тока короткого замыкания $31,94 \text{ мА/см}^2$, напряжения холостого хода 0,95 В, фактор заполнения 76,08 %).

Для снижения стоимости бессвинцового перовскитного солнечного элемента также важной задачей является замена дорогостоящего Au (5,1 эВ) тыльного контакта. В качестве данного контакта необходимо использовать материал с определенной работой выхода для получения омического контакта со слоем Cu_2O . На рис. 5 показана зависимость эффективности солнечного элемента от работы вы-

хода из материала тыльного контакта. В качестве материала тыльного контакта (Me) при моделировании солнечного элемента со структурой $\text{FTO/TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O/Me}$ использовались Au (5,1), C (5 эВ), Ag (4,7), Cu (4,9) и Al (4,3 эВ) [9]. Получено, что возрастание работы выхода приводит к значительному увеличению напряжения холостого хода с 0,53 В до 0,95 В. Ток короткого замыкания при этом практически не изменяется ($31,43\text{--}31,94 \text{ мА/см}^2$). Эффективность солнечного элемента увеличивается примерно до работы выхода 5 эВ (рис. 5) из-за уменьшения потенциального барьера Шоттки на межфазной границе $\text{Cu}_2\text{O/Me}$, что способствует более эффективному переносу дырок в Cu_2O к тыльному контакту.

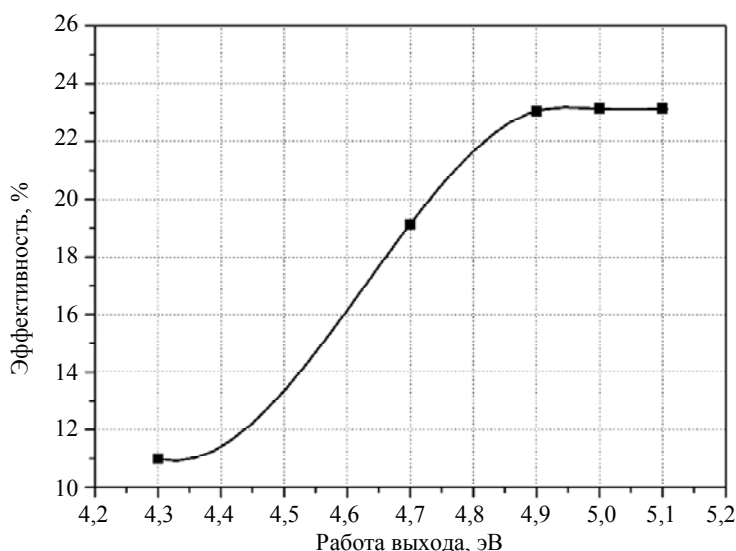


Рис. 5. Зависимость эффективности солнечного элемента от работы выхода из материала тыльного контакта

Таким образом, работа выхода тыльного контакта должна быть не менее 4,9–5 эВ, что необходимо для получения высоких фотоэлектрических параметров солнечного элемента. Наиболее подходящим материалом в качестве тыльного контакта для структуры $\text{FTO/TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O/Me}$ являются C и Cu. При этом максимальная эффективность 23,13 % получена для солнечного элемента со структурой $\text{FTO/TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O/C}$ (ток короткого замыкания $31,94 \text{ мА/см}^2$, напряжение холостого хода 0,95 В, фактор заполнения 76,07 %).

Заключение

В работе создана модель бессвинцового перовскитного солнечного элемента со струк-

турой $\text{FTO/TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O/C}$ в программе SCAPS-1D. Проведено исследование влияния толщины, концентраций дефектов и акцепторов в слое перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, а также работы выхода из материала тыльного контакта на фотоэлектрические параметры солнечного элемента. Получено, что оптимальная толщина слоя перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ составляет 500 нм, концентрация дефектов в перовските должна составлять порядка $10^{14}\text{--}10^{15} \text{ см}^{-3}$, а оптимальная концентрация акцепторов должна составлять 10^{16} см^{-3} .

Показано, что работа выхода материала тыльного контакта должна быть не менее 4,9–5 эВ для создания высокоэффективных солнечных элементов. Получена максимальная эффективность 23,13 % для бессвинцового пе-

ровскитного солнечного элемента со структурой FTO/TiO₂/CH₃NH₃SnI₃/Cu₂O/C, что на 1,58 % выше, чем теоретическая эффективность для структуры FTO/TiO₂/CH₃NH₃PbI₃/Cu₂O/Au [14]. Результаты могут быть использованы при разработке и изготовлении нетоксичных, высокоэффективных и недорогих перовскитных солнечных элементов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-29-03041 МК

ЛИТЕРАТУРА

1. Linfeng Cai, Furong Zhu // Nano Select. 2021. Vol. 2. P. 1417.
2. N. Suresh Kumar, K. Chandra Babu Naidu // Journal of Materiomics. 2021. Vol. 7. P. 940.
3. Weifu Sun, Kwang-Leong Choy, Mingqing Wang // Molecules. 2019. Vol. 24. P. 3466.
4. Mottakin M., Sobayel K., Dilip Sarkar, Hend Alkhamash, Sami Alharthi, Kuaanan Techato, Md. Shahiduzzaman, Nowshad Amin, Kamaruzzaman Sopian, Md. Akhtaruzzaman // Energies. 2021. Vol. 14. P. 7200.
5. Hui-Jing Du, Wei-Chao Wang, Jian-Zhuo Zhu // Chin. Phys. B. 2016. Vol. 25. P. 108803.
6. Saqib Ahmed, Jalen Harris, Jon Shaffer, Mohan Devgun, Shaestagir Chowdhury, Aboubakr Abdullah, Sankha Banerjee // Journal of Materials Research. 2019. Vol. 34. P. 2789.
7. Mingzhen Liu, Michael B. Johnston, Henry J. Snaith // Nature. 2013. Vol. 501. P. 393.
8. Kudryashov D. A., Gudovskikh A. S., Babichev A. V., Filimonov A. V., Mozharov A. M., Agekyan V. F., Borisov E. V., Serov A. Yu., Filosofov N. G. // Semiconductors. 2017. Vol. 51. P. 11.
9. Behrouznejad F., Shahbazi S., Taghavinia N., Hui-Ping Wud, Eric Wei-Guang Diao // J. Mater. Chem. A. 2016. Vol. 4. P. 13488.
10. Burgelman M., Nollet P., Degrave S. // Thin Solid Films. 2000. Vol. 361–362. P. 527.
11. Minemoto T., Murata M. // J. of Appl. Phys. 2014. Vol. 116. P. 054505.
12. Himanshu Dixit, Deepak Punetha, Saurabh Kumar Pandey // International Journal for Light and Electron Optics. 2019. Vol. 179. P. 969.
13. Malyukov S. P., Sayenko A. V., Ivanova A. V. // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2016. Vol. 151. P. 012033.
14. Sayenko A. V., Malyukov S. P., Palii A. V., Goncharov E. V. // Applied Physics. 2021. № 2. P. 45.
15. Takashi Minemoto, Yu Kawano, Takahito Nishimura, Jakapan Chantana // Optical Materials. 2019. Vol. 92. P. 60.
16. Abdelaziz S., Zekry A., Shaker A., Abouelata M. // Optical Materials. 2020. Vol. 101. P. 109738.
17. Neelima Singh, Alpana Agarwal, Mohit Agarwal // Solar Energy. 2020. Vol. 208. P. 399.
18. Kawano Yu., Jakapan Chantana, Takahito Nishimura, Takashi Minemoto // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2020. Vol. 205. P. 110252.
19. Huanping Zhou, Qi Chen, Gang Li, Song Luo, Tze-bing Song, Hsin-Sheng Duan, Ziruo Hong, Jingbi You, Yongsheng Liu, Yang Yang // Science. 2014. Vol. 345. P. 542.
20. Tejas S. Sherkar, Cristina Momblona, Lidon Gil-Escrig, Jorge Avila, Michele Sessolo, Henk J. Bolink, L. Jan Anton Koster // ACS Energy Letters. 2017. Vol. 2. P. 1214.
21. Feng Hao, Constantinos C. Stoumpos, Peijun Guo, Nanjia Zhou, Tobin J. Marks, Robert P. H. Chang, Mercouri G. Kanatzidis // J. Am. Chem. Soc. 2015. Vol. 137. P. 11445.
22. Feng Hao, Constantinos C. Stoumpos, Duyen Hanh Cao, Robert P. H. Chang, Mercouri G. Kanatzidis // Nature Photonics. 2015. Vol. 137. P. 489.

PACS: 84.60.Jt

Modeling the structure of a lead-free perovskite solar cell

A. V. Saenko, S. P. Malyukov, and A. A. Rozhko

Institute of Nanotechnologies, Electronics and Equipment Engineering, Southern Federal University
2 Shevchenko st., Taganrog, 347922, Russia
E-mail: avsaenko@sfedu.ru

Received December 27, 2021

The article discusses the numerical simulation of a lead-free perovskite solar cell in the SCAPS-1D program to optimize its structure and improve the energy conversion efficiency.

The influence of the thickness, concentration of defects and acceptors in the layer of lead-free perovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, as well as the work function of the back contact material on the photovoltaic parameters of a solar cell has been studied. It was found that the optimal thickness of the $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ layer is 500 nm, the concentration of defects should be on the order of 10^{14} – 10^{15} cm^{-3} , and the optimal concentration of acceptors should be 10^{16} cm^{-3} . It is shown that the work function of the rear contact material must be at least 4.9–5 eV to create highly efficient solar cells. A maximum efficiency of 23.13 % was obtained for a perovskite solar cell with the FTO/TiO₂/CH₃NH₃SnI₃/Cu₂O/C structure (short circuit current 31.94 mA/cm², open circuit voltage 0.95 V, fill factor 76.07 %). The results can be used in the design and manufacture of non-toxic, high-performance and low-cost perovskite solar cells.

Keywords: solar cell, numerical simulation, lead-free perovskite, defect concentration, layer thickness, acceptor concentration, back contact.

DOI: 10.51368/1996-0948-2022-1-19-27

REFERENCES

1. Linfeng Cai and Furong Zhu, *Nano Select* **2**, 1417 (2021).
2. N. Suresh Kumar and K. Chandra Babu Naidu, *Journal of Materiomics* **7**, 940 (2021).
3. Weifu Sun, Kwang-Leong Choy, and Mingqing Wang, *Molecules* **24**, 3466 (2019).
4. M. Mottakin, K. Sobayel, Dilip Sarkar, Hend Alkhamash, Sami Alharthi, Kuaanan Techato, Md. Shahiduzzaman, Nowshad Amin, Kamaruzzaman Sopian, and Md. Akhtaruzzaman, *Energies* **14**, 7200 (2021).
5. Hui-Jing Du, Wei-Chao Wang, and Jian-Zhuo Zhu, *Chin. Phys. B* **25**, 108803 (2016).
6. Saqib Ahmed, Jalen Harris, Jon Shaffer, Mohan Devgun, Shaestagir Chowdhury, Aboubakr Abdullah, and Sankha Banerjee, *Journal of Materials Research* **34**, 2789 (2019).
7. Mingzhen Liu, Michael B. Johnston, and Henry J. Snaith, *Nature* **501**, 393 (2013).
8. D. A. Kudryashov, A. S. Gudovskikh, A. V. Babichev, A. V. Filimonov, A. M. Mozharov, V. F. Agekyan, E. V. Borisov, A. Yu. Serov, and N. G. Filosofov, *Semiconductors* **51**, 11 (2017).
9. F. Behrouznejad, S. Shahbazi, N. Taghavinia, Hui-Ping Wud, and Eric Wei-Guang Diao, *J. Mater. Chem. A* **4**, 13488 (2016).
10. M. Burgelman, P. Nollet, and S. Degraeve, *Thin Solid Films* **361–362**, 527 (2000).
11. T. Minemoto and M. Murata, *J. of Appl. Phys.* **116**, 054505 (2014).
12. Himanshu Dixit, Deepak Punetha, and Saurabh Kumar Pandey, *International Journal for Light and Electron Optics* **179**, 969 (2019).
13. S. P. Malyukov, A. V. Sayenko, and A. V. Ivanova, *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering* **151**, 012033 (2016).
14. A. V. Sayenko, S. P. Malyukov, A. V. Paliy, and E. V. Goncharov, *Applied Physics*, No. 2, 45 (2021).
15. Takashi Minemoto, Yu Kawano, Takahito Nishimura, and Jakapan Chantana, *Optical Materials* **92**, 60 (2019).
16. S. Abdelaziz, A. Zekry, A. Shaker, and M. Abouelatta, *Optical Materials* **101**, 109738 (2020).
17. Neelima Singh, Alpana Agarwal, and Mohit Agarwal, *Solar Energy* **208**, 399 (2020).
18. Yu Kawano, Jakapan Chantana, Takahito Nishimura, and Takashi Minemoto, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **205**, 110252 (2020).
19. Huanping Zhou, Qi Chen, Gang Li, Song Luo, Tze-bing Song, Hsin-Sheng Duan, Ziruo Hong, Jingbi You, Yongsheng Liu, and Yang Yang, *Science* **345**, 542 (2014).
20. Tejas S. Sherkar, Cristina Momblona, Lidon Gil-Escrig, Jorge Avila, Michele Sessolo, Henk J. Bolink, and L. Jan Anton Koster, *ACS Energy Letters* **2**, 1214 (2017).
21. Feng Hao, Constantinos C. Stoumpos, Peijun Guo, Nanjia Zhou, Tobin J. Marks, Robert P. H. Chang, and Mercouri G. Kanatzidis, *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 11445 (2015).
22. Feng Hao, Constantinos C. Stoumpos, Duyen Hanh Cao, Robert P. H. Chang, and Mercouri G. Kanatzidis, *Nature Photonics* **137**, 489 (2015).