

УДК: 535.37

ВЛИЯНИЕ ГАЛОГЕНИДНОГО СОСТАВА НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЕРОВСКИТОВ И ЭФФЕКТИВНОСТЬ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Соколова А. Я.¹

Научный руководитель – к. ф.-м. н., PhD Фурасова А. Д.

¹Университет ИТМО

aysokolova@mail.ru

Введение

Повышенный интерес к перовскитам в последнее десятилетие затронул множество различных областей исследований. Солнечные элементы на основе данных материалов показывают результаты, сравнимые с кремниевыми образцами по значениям эффективности преобразования энергии (27,3% и 27,6% соответственно [1]). Преимуществом мультикатионных свинцово-галогенидных перовскитов является возможность варьирования ширины запрещенной зоны путем изменения соотношения галогенидов [2]. Это способствует оптимизации материала под различные цели, а также увеличивает вероятность получения высокой эффективности элементов на выходе. Однако изменение соотношения бромида и йодида может приводить к фазовой сегрегации (разделение пиков фотолюминисценции на йод- и бром-обогащенные области) под воздействием света, что критично для стабильности и эффективности устройств. На данный момент взаимосвязь между галогенидным составом и оптическими и фотоэмиссионными свойствами, а также конечными фотоэлектрическими параметрами в подобных системах остается малоизученной, что и определяет актуальность данного исследования.

Основная часть

В первой части исследования было синтезировано 6 материалов типа «перовскит» с общей формулой $\text{CsMAFAPb}(\text{I}_x\text{Br}_{1-x})_3$. Составы менялись в зависимости от соотношений бромида и йодида. В результате были получены образцы: $\text{CsMAFAPb}(\text{I}_{0.9}\text{Br}_{0.1})_3$ (Standard), $\text{CsMAFAPb}(\text{Br})_3$ (соотношение I/Br соответственно 0/100), $\text{CsMAFAPb}(\text{I}_{0.5}\text{Br}_{0.5})_3$ (50/50), $\text{CsMAFAPb}(\text{I}_{0.6}\text{Br}_{0.4})_3$ (60/40), $\text{CsMAFAPb}(\text{I}_{0.7}\text{Br}_{0.3})_3$ (70/30), $\text{CsMAFAPb}(\text{I}_{0.75}\text{Br}_{0.25})_3$ (75/25). Катионный состав и процесс синтеза были зафиксированы. Характеризация пленок заключалась в изучении морфологии и фотолюминисцентных свойств методом оптической микроскопии, исследовании времени жизни фотолюминисценции с использованием модели Шокли-Рида-Холла (ШРХ), измерении спектров поглощения и пропускания с последующим расчётом ширины запрещённой зоны методом Тауца [3]. Была выявлена обратно пропорциональная зависимость концентрации бромида и увеличения ширины запрещенной зоны в каждом составе [4]. Изучение пиков фотолюминисценции образцов привело к выводу, что практически все значения находятся в инфракрасном диапазоне (700 - 780 нм), а единственный образец, обладающий фазовой сегрегацией - 0/100. Согласно полученным параметрам времени радиационной рекомбинации, времени жизни носителей заряда и коэффициента бимолекулярной рекомбинации из модели Шокли-Рида-Холла на основе данных эксперимента TRPL (Time-Resolved Photoluminescence) образец 60/40 имеет низкую плотность дефектов и отсутствие фазовой сегрегации [5].

Наиболее подходящими для дальнейшего создания солнечных элементов с точки зрения ширины запрещенной зоны оказались образцы 75/25 и 60/40 со значениями 1,61 эВ и 1,6 эВ соответственно. Далее были созданы несколько партий солнечных

элементов на основе изученных составов. Использовалась следующая последовательность слоев: стекло/ITO/NiOx/PTAA/перовскит/C60/BCP/Ag. Композитный слой NiOx/PTAA выполнял функцию дырочно-транспортного слоя, а C60/BCP - электрон-транспортного слоя. Измерение вольт-амперных характеристик показало, что наибольшую эффективность продемонстрировал образец 75/25 - 16,7 %.

Выводы

Исследование выявило, что при помощи варьирования галогенидного состава перовскита возможно получить образцы с подходящей для indoor-фотовольтаики шириной запрещенной зоны и отсутствием фазовой сегрегации. Пленки 60/40 и 75/25 продемонстрировали оптимальные структурные и оптические свойства для последующего создания солнечных элементов. На практике лучшим оказался перовскит 75/25, при помощи которого был создан элемент с высокой эффективностью преобразования солнечной энергии.

Литература

1. Best Research-Cell Efficiencies [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://www.nrel.gov/media/docs/libraries/pv/cell-pv-eff.pdf?sfvrsn=26e2254e_16 (Дата обращения: 10.02.2026).
2. Liu X.-K., Xu W., Bai S., Jin Y., Wang J., Friend R.H., Gao F. Metal halide perovskites for light-emitting diodes // *Nature Materials*. 2021. Vol. 20, no. 1. P. 10–21. <https://doi.org/10.1038/s41563-020-0784-7>.
3. Makuła P., Pacia M., Macyk W. How to correctly determine the band gap energy of modified semiconductor photocatalysts based on UV–Vis spectra // *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2018. Vol. 9, no. 23. P. 6814–6817. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.8b02892>.
4. Kojima A., Teshima K., Shirai Y., Miyasaka T. Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells // *Journal of the American Chemical Society*. 2009. Vol. 131, no. 17. P. 6050–6051. <https://doi.org/10.1021/ja809598r>.
5. Wehrenfennig C., Eperon G.E., Johnston M.B., Snaith H.J., Herz L.M. High charge carrier mobilities and lifetimes in organolead trihalide perovskites // *Advanced Materials*. 2014. Vol. 26, no. 10. P. 1584–1589. <https://doi.org/10.1002/adma.201305172>.