

## Оптимизация толщины гетероструктуры перовскитовых солнечных элементов с помощью численного моделирования

*С.П. Малюков, А.В. Саенко, Ю.В. Клунникова, А.В. Палий*

*Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения  
Южный федеральный университет*

**Аннотация:** Проведено численное физико-топологическое моделирование для оптимизации толщины перовскитовых солнечных элементов на основе гетероструктуры  $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{CN}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x/\text{Spiro-OMeTAD}$ . Результаты проведенных исследований показали, что оптимальные значения толщин пленок  $\text{TiO}_2$  и  $\text{CH}_3\text{CN}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$  гетероструктуры, позволяющие получить высокий коэффициент полезного действия солнечного элемента, лежат в относительно узких пределах. Проведенные исследования показали возможность эффективного использования численного физико-топологического моделирования для разработки перовскитовых солнечных элементов с учетом особенностей фотогенерации, рекомбинации и переноса носителей заряда в реальных гетероструктурах.

**Ключевые слова:** солнечный элемент, перовскит, диоксид титана, гетероструктура, численное моделирование.

### Введение

Солнечные элементы на основе перовскитов являются наиболее перспективными и широко исследуемыми благодаря простой технологии изготовления и высокому коэффициенту полезного действия (КПД) порядка 15-20 % [1]. Несмотря на значительный прогресс данных солнечных элементов, многие проблемы, связанные с увеличением параметров (КПД, фактор заполнения) и стабильностью их во времени остаются мало исследованными.

В качестве существенного фактора, влияющего на параметры перовскитовых солнечных элементов, является толщина металлоорганического перовскита ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ ), поскольку она влияет на поглощение солнечного излучения и перенос носителей заряда. Толщина прозрачной пленки диоксида титана ( $\text{TiO}_2$ ) также оказывает существенное влияние на параметры солнечного элемента, поскольку с увеличением толщины пленки  $\text{TiO}_2$  возрастает сопротивление переносу носителей заряда и снижается её коэффициент пропускания [1, 2].

В рамках настоящей работы проводилось численное физико-топологическое моделирование для оптимизации параметров перовскитовых солнечных элементов на основе гетероструктуры  $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{CN}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x/\text{Spiro-OMeTAD}$ .

### Описание модели

При моделировании рассматривалась конструкция перовскитового солнечного элемента с планарной p-i-n гетероструктурой (рис. 1), где в качестве поглощающего материала использовался широко исследованный перовскит  $\text{CH}_3\text{CN}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$  в сочетании с электронным ( $\text{TiO}_2$ ) и дырочным (Spiro-OMeTAD) транспортными слоями [2, 3].

Физико-топологическая модель перовскитового солнечного элемента основана на стационарной диффузионно-дрейфовой системе уравнений полупроводника, в которую входят уравнения непрерывности для определения концентраций носителей зарядов (электронов и дырок), отражающие закон сохранения числа частиц в гетероструктуре, и уравнение Пуассона для установления связи между параметрами электрического поля и концентрациями электронов, дырок и ионизированной примеси [3-6]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_n \left( -n \frac{\partial(\varphi + \varphi_n)}{\partial x} + \varphi_t \frac{\partial n}{\partial x} \right) \right] + G - R = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_p \left( p \frac{\partial(\varphi - \varphi_p)}{\partial x} + \varphi_t \frac{\partial p}{\partial x} \right) \right] + G - R = 0, \quad (2)$$

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

где  $n, p$  – концентрация электронов и дырок;  $\mu_n, \mu_p$  – подвижности электронов и дырок;  $\varphi$  – электростатический потенциал;  $\varphi_t$  – температурный потенциал;  $\varphi_n, \varphi_p$  – гетероструктурные потенциалы в зоне проводимости и в валентной зоне;  $q$  – элементарный заряд;  $\varepsilon$  – относительная диэлектрическая проницаемость;  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая постоянная;  $G$  – скорость оптической

генерации электронно-дырочных пар;  $R$  – скорость рекомбинации электронно-дырочных пар;  $N_D$  – концентрация донорной легирующей примеси;  $N_A$  – концентрация акцепторной легирующей примеси.

Для повышения адекватности результатов моделирования учитывались процессы генерации и рекомбинации носителей заряда в гетероструктуре солнечного элемента с использованием аналитических моделей. Модель генерации носителей заряда в спектральном диапазоне поглощения перовскита основана на физическом законе Бугера-Ламберта-Бера и аппроксимации солнечного спектра AM1.5 спектром теплового излучения абсолютно черного тела при температуре 5780 К (использовалась стандартная величина интенсивности спектра AM1,5 равная 100 мВт/см<sup>2</sup> в диапазоне длин волн 100-2000 нм) [3, 5]. Модель рекомбинации носителей заряда во всех материалах гетероструктуры описывалась в рамках теории Шокли-Рида-Холла (рекомбинация через ловушки) [7, 8].

Решение диффузионно-дрейфовой системы уравнений модели солнечного элемента осуществлялось численно в системе Matlab итерационным методом Гуммеля, в котором на каждой итерации сначала решались уравнения непрерывности, а затем вычисленные значения концентраций носителей заряда подставлялись в уравнение Пуассона для расчета электрического потенциала.

### **Результаты моделирования**

В результате численного моделирования получены вольт-амперные характеристики перовскитовых солнечных элементов при толщине пленки перовскита от 100 до 1000 нм (толщина пленки TiO<sub>2</sub> составляла 50 нм) и при толщине пленки TiO<sub>2</sub> от 0 до 300 нм (толщина пленки перовскита составляла 300 нм), а также построены зависимости КПД от толщины пленок (рис. 1).

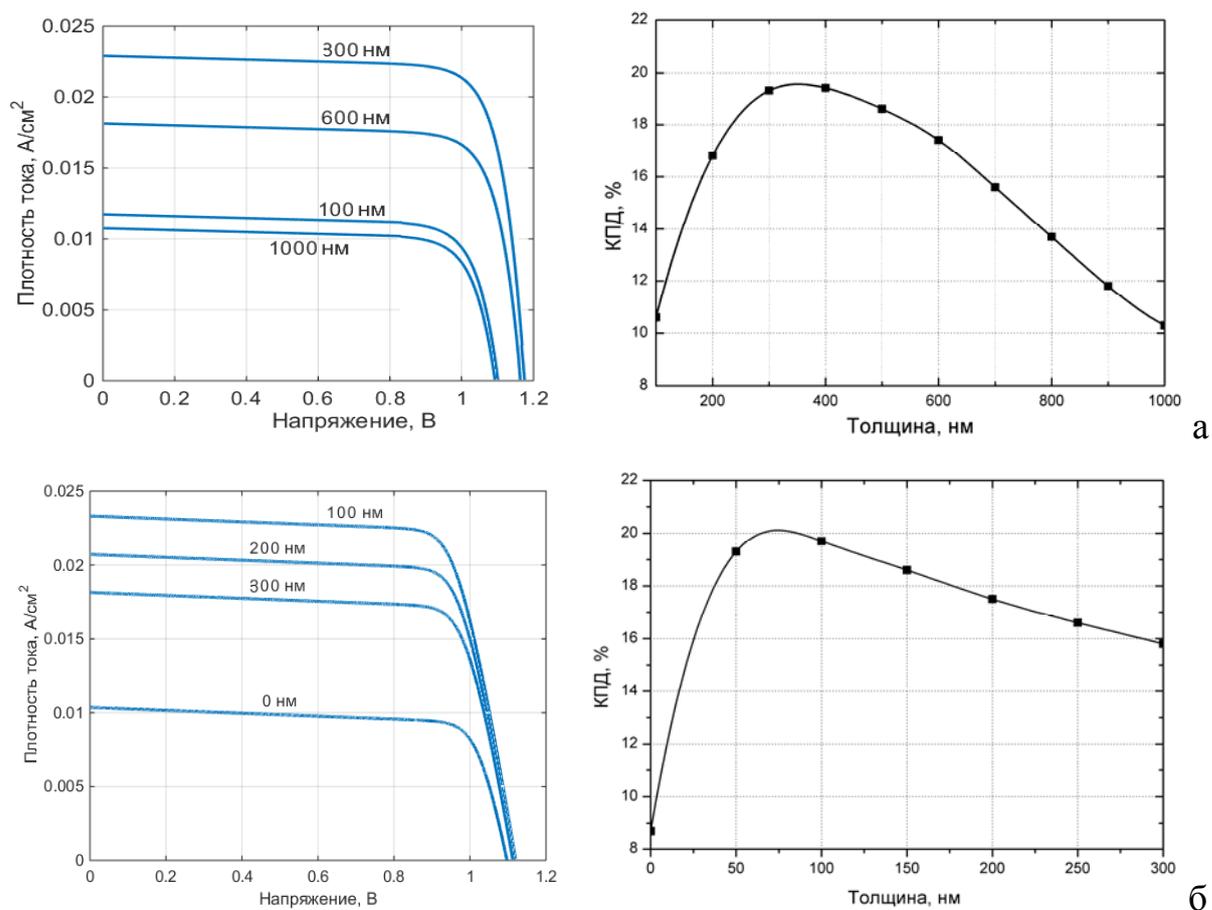


Рис. 1 – Вольт-амперные характеристики и зависимости КПД от толщин пленки перовскита (а) и пленки TiO<sub>2</sub> (б)

Из рис. 1(а) следует, что оптимальная толщина пленки перовскита составляет 300-400 нм. Наличие максимума связано с тем, что при увеличении толщины пленки возрастает фототок солнечного элемента, который выходит на насыщение, в то время как фотонапряжение с ростом толщины уменьшается вследствие возрастания скорости рекомбинации [8].

Из рис. 1(б) следует, что оптимальная толщина пленки TiO<sub>2</sub> составляет 50-100 нм. Фототок и фотонапряжение солнечных элементов постепенно снижается с увеличением толщины пленки TiO<sub>2</sub> вследствие поглощения части падающего излучения пленкой TiO<sub>2</sub>, возрастающей объемной рекомбинации, а также увеличением последовательного сопротивления в солнечном элементе [9, 10].

## Вывод

В результате проведенного численного моделирования показано, что наблюдается сильная зависимость КПД солнечного элемента от толщины пленок  $\text{CH}_3\text{CN}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$  и  $\text{TiO}_2$ . Диапазон толщин пленок гетероструктуры  $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{CN}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x/\text{Spiro-OMeTAD}$ , позволяющий создавать высокоэффективные солнечные элементы, достаточно узок. Разработанная физико-топологическая модель позволила достичь хорошего соответствия между теоретическими расчетами и экспериментальными данными [1]. Таким образом, результаты проведенных исследований позволяют сделать вывод о возможности эффективного использования численного физико-топологического моделирования перовскитовых солнечных элементов для оптимизации толщины их гетероструктуры.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-38-00204 мол\_а.

## Литература

1. Hobeom Kim, Kyung-Geum Lim, Tae-Woo Lee. Planar heterojunction organometal halide perovskite solar cells: roles of interfacial layers // *Energy Environ. Sci.*, 2016. Vol. 9. PP. 12-30.
2. Hyun Suk Jung, Nam-Gyu Park. Perovskite Solar Cells: From Materials to Devices // *Small*, 2015. Vol. 11. № 1. PP. 10-25.
3. S.P. Malyukov, A.V. Sayenko, E.A. Ryndin, Y.V. Klunnikova. The drift-diffusion simulation of p-i-n heterojunction perovskite solar cells // *Proceedings of the 2016 International Conference on «Physics, Mechanics of New Materials and Their Applications»*. Nova Science Publishers, 2017. Chapter 67. PP. 419-425.
4. Yecheng Zhou, Angus Gray-Weale. A numerical model for charge transport and energy conversion of perovskite solar cells // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016. Vol. 18. pp.4476-4486.

5. Malyukov S.P., Sayenko A.V., Ivanova A.V. Numerical modeling of perovskite solar cells with a planar structure // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2016. Vol. 151. PP. 120-123.

6. Bernabe Mari Soucase, Inmaculada Guaita Pradas, Krishna R. Adhikari. Numerical Simulations on Perovskite Photovoltaic Devices // InTech, 2016. Chapter 15. PP. 445-488.

7. Малюков С.П., Саенко А.В. Разработка модели сенсibilизированного красителем солнечного элемента // Известия ЮФУ. Технические науки, 2014. № 1. С. 120-126.

8. Hui-Jing Du, Wei-Chao Wang, Yi-Fan Gu. Simulation design of P-I-N-type all-perovskite solar cells with high efficiency // Chi. Phys. B, 2017. Vol. 26, № 2. PP. 1-7.

9. Малюков С.П., Саенко А.В., Бондарчук Д.А. Исследование влияния толщины пленки  $TiO_2$  на фотоэлектрические характеристики перовскитовых солнечных элементов // Инженерный вестник Дона. 2016. № 4. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2016/3866](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2016/3866).

10. Малюков С.П., Саенко А.В., Палий А.В., Бондарчук Д.А., Бесполудин В.В. Исследование распределения температуры в пленке  $TiO_2$  при импульсном лазерном нагреве // Инженерный вестник Дона. 2017. № 3. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/N3y2017/4306](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/N3y2017/4306).

### References

1. Hobeom Kim, Kyung-Geum Lim, Tae-Woo Lee. Energy Environ. Sci., 2016. Vol. 9. pp. 12-30.

2. Hyun Suk Jung, Nam-Gyu Park. Small, 2015. Vol. 11. № 1. pp. 10-25.

3. S.P. Malyukov, A.V. Sayenko, E.A. Ryndin, Y.V. Klunnikova. Proceedings of the 2016 International Conference on «Physics, Mechanics of New Materials and Their Applications». Nova Science Publishers, 2017. Chapter 67. pp. 419-425.



4. Yecheng Zhou, Angus Gray-Weale. Phys. Chem. Chem. Phys., 2016. Vol. 18. pp. 4476-4486.
5. Malyukov S.P., Sayenko A.V., Ivanova A.V. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2016. Vol. 151. pp. 120-123.
6. Bernabe Mari Soucase, Inmaculada Guaita Pradas, Krishna R. InTech, 2016. Chapter 15. pp. 445-488.
7. Maljukov S.P., Saenko A.V. Izvestiya SFedU. Tehnicheskie nauki, 2014. № 1. pp. 120-126.
8. Hui-Jing Du, Wei-Chao Wang, Yi-Fan Gu. Chi. Phys. B, 2017. Vol. 26, № 2. pp. 1-7.
9. Maljukov S.P., Saenko A.V., Klunnikova Ju.V. Inženernyj vestnik Dona (Rus). 2016. № 4. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2016/3866](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2016/3866).
10. Maljukov S.P., Saenko A.V., Paliy A.V., Bondarchuk D.A., Bespoludin V.V. Inženernyj vestnik Dona (Rus). 2017. № 3. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/N3y2017/4306](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/N3y2017/4306).