

ORIGINAL ARTICLE

Numerical Simulation and Design of Lead-Free Perovskite Cs₂PtI₆ Solar Cell with CBTS as a Hole Transport Layer

Neda Ahmadi^{1*}

1 Assistant Professor, Department of Basic Sciences, Garmsar Branch, Islamic Azad University, Garmsar, Iran.

Correspondence

Neda Ahmadi

Email: n.ahmadi@srbiau.ac.ir

How to cite

Ahmadi, N. (2025). Numerical Simulation and Design of Lead-Free Perovskite Cs₂PtI₆ Solar Cell with CBTS as a Hole Transport Layer, Optoelectronic, 7(4), 57-64.

ABSTRACT

This study systematically analyzed a lead-free perovskite solar cell based on Cs₂PtI₆ (Cesium Platinum Iodide) using the Solar Cell Capacitance Simulator (SCAPS-1D). The investigation focused on the effects of perovskite layer thickness, temperature, and defect density on key photovoltaic parameters. The calculated parameters are open-circuit voltage, short-circuit current, fill factor, efficiency, and quantum efficiency of the solar cell. The model structure was utilized as a proposed n-i-p device architecture comprising ITO/TiO₂/Cs₂PtI₆/CBTS/Au.

The results indicate that optimizing the perovskite layer thickness, provided it does not exceed the charge carrier penetration depth, can increase the efficiency by up to 29.2%. Conversely, increasing the operating temperature by approximately 110 K results in a 10.7% efficiency reduction. Furthermore, a significant decline in efficiency (36.8%) observed due to defect-induced recombination within the perovskite layer. These findings highlight the importance of material optimization and operational stability in the design of efficient, lead-free perovskite solar cells.

KEY WORDS

Solar Cell, Lead-Free Perovskite, SCAPS- 1D, Quantum Efficiency.

فصلنامه علمی

اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

شبیه‌سازی عددی و طراحی سلول خورشیدی پروسکایت بدون سرب Cs₂PtI₆ با استفاده از CBTS به عنوان لایه هدایت‌کننده حفره

ندا احمدی^{*}

چکیده

در این مطالعه، سلول خورشیدی پروسکایت بدون سرب Cs₂PtI₆ (سزیوم پلاتینوم یدید) توسط نرم‌افزار SCAPS-1D بررسی و اثر ضخامت لایه پروسکایت، دما و دانسیته نقص‌ها بر پارامترهای فوتوولتاییک بررسی گردید. ساختار سلول خورشیدی پیشنهادی n-i-p بوده و معماری آن به صورت ITO/TiO₂/Cs₂PtI₆/CBTS/Au است. پارامترهای محاسبه شده، ولتاژ مدار باز، جریان اتصال کوتاه، ضریب پرشدگی، بازدهی و بازدهی کوانتومی سلول خورشیدی است.

نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که افزایش ضخامت لایه پروسکایت تا حدی که از طول نفوذ حامل‌های بار بیشتر نشود، راندمان سلول خورشیدی را ۲۹/۲٪ افزایش می‌دهد. همچنین مشخص شد که افزایش ۱۱۰ کلوین دما باعث کاهش راندمان ۱۰/۷٪ بازدهی سلول خورشیدی می‌شود. از سوی دیگر مشاهده شد که افزایش دانسیته نقص در لایه پروسکایت به شدت باعث کاهش بهره‌وری سلول خورشیدی به میزان ۳۶/۸٪ است. این یافته‌ها اهمیت بهینه‌سازی مواد و پایداری عملیاتی را در طراحی سلول‌های خورشیدی پروسکایت بدون سرب، کارآمد نشان می‌دهد.

واژه‌های کلیدی

سلول خورشیدی، پروسکایت بدون سرب، اسکپس یک بعدی، بازده کوانتومی.

۱ استادیار، گروه علوم پایه، واحد گرمسار، دانشگاه آزاد اسلامی، گرمسار، ایران.

نویسنده مسئول:

ندا احمدی

رایانامه: n.ahmadi@srbiau.ac.ir

استناد به این مقاله:

ندا احمدی (۱۴۰۴). شبیه‌سازی عددی و طراحی سلول خورشیدی پروسکایت بدون سرب Cs₂PtI₆ با استفاده از CBTS به عنوان لایه هدایت‌کننده حفره. فصلنامه علمی اپتوالکترونیک، ۷(۴)، ۵۷-۶۴.

<https://jphys.journals.pnu.ac.ir>

مقدمه

در سال‌های اخیر، سلول‌های خورشیدی هایبرید پروسکایت (HPSC) به دلیل خواص ذاتی قابل توجه؛ مثل قیمت تولید پایین، تحرک حامل‌های بار بالا، نوار ممنوعه قابل تنظیم، طول نفوذ بالای حامل‌های بار و ضریب جذب بالا توجه محققان را به خود جلب کرده است [۱-۴]. در یک دهه گذشته با مطالعات انجام شده بازدهی این سلول‌های خورشیدی از ۳/۳٪ به حدود ۲۵٪ افزایش یافته است و این در حالی است که این سلول‌های خورشیدی هنوز صنعتی نشده‌اند. مشکل عمده موجود بر سر راه صنعتی شدن سلول‌های خورشیدی HPSC علی‌رغم پیشرفت در بازدهی آنها دو مورد است: ۱. ناپایداری این سلول‌های خورشیدی؛ ۲. سمی بودن سرب موجود در بسیاری از مواد پروسکایت. به عنوان مثال یون‌های متیل آمونیوم (methyl ammonium) (MA^+) و فرمامیدینیوم (formamidinium) (FA^+) به کاررفته در پروسکایت در مقابل شرایط جوی ناپایدار هستند [۵-۱۰]. به همین دلیل برای افزایش طول عمر دستگاه‌ها و جلوگیری از آسیب جدی به محیط زیست بسیار سودمند است که به دنبال پروسکایتی پایدار و غیر سمی باشیم.

در این راستا موادی مانند CS_2AgBiI_6 ، $CS_2AgBiBr_6$ ، $CS_2Au_2I_6$ و $CS_2Ge_0.5Sn_0.5I_3$ ، $AgBiI_4$ ، CS_2TiBr_6 [۱۱-۱۷] بررسی شدند؛ اما کارایی این مواد در ساختار سلول‌های خورشیدی قابل توجه نبود.

در سال‌های اخیر مواد پروسکایت غیر سمی و دارای بازدهی بالا تحت عنوان مواد پروسکایت دوگانه با فرمول A_2BX_6 مورد توجه قرار گرفتند که در جایگاه A، Cs (سزیوم) در جایگاه B، (پلاتین) Pt، (قلع) Sn و (تلوریوم) Te و در جایگاه X ید (I) می‌نشینند. این مواد پروسکایت دوگانه بدون سرب که دارای نوار ممنوعه مناسب هستند، بسیار مورد توجه محققین قرار گرفته‌اند. یکی از این مواد که در دسته A_2BX_6 قرار دارد و بسیار مورد توجه قرار گرفته است، CS_2PtI_6 سزیوم پلاتینیوم یدید است. علت مورد توجه قرار گرفتن این ماده حرکت بار بالا، ضریب جذب نور بالا و نوار ممنوعه کم است [۱۸]. همچنین این ماده با ساختار مکعبی در شرایط سخت محیطی مثل دمای بالا، شدت اشعه UV و رطوبت زیاد پایدار است [۱۹]. استفاده از شبیه‌سازی در سلول‌های خورشیدی از جمله سلول‌های خورشیدی بر مبنای ماده پروسکایت CS_2PtI_6 به بهبود عملکرد سلول کمک بسیار می‌کند [۲۰-۲۳]. در این مطالعه با استفاده از نرم‌افزار SCAPS-1D نسخه ۳.۳.۱۰ یک سلول خورشیدی جدید n-i-p را با ساختار

ITO/TiO₂/Cs₂PtI₆/CBTS/Au بررسی می‌کنیم. لایه هدایت‌دهنده حفره در این سلول خورشیدی CBTS (Cu_2BaSnS_4) است. CBTS یک نیمه هادی نوظهور و دوست‌دار محیط زیست و غیر سمی است که دارای نوار ممنوعه مستقیم است. ما در این مطالعه از طریق تغییر ضخامت لایه پروسکایت، بررسی تاثیر چگالی نقص در لایه جاذب و همچنین تغییرات دما، عملکرد این سلول خورشیدی را بررسی و بهینه‌سازی خواهیم کرد.

جزئیات محاسبات

در این مطالعه از نرم‌افزار SCAPS-1D نسخه ۳.۳.۱۰ استفاده شده است. این نرم‌افزار در دانشگاه گنت کشور بلژیک طراحی و آماده شده است. SCAPS یک شبیه‌ساز یک بعدی است که قابلیت محاسبه پارامترهای مهمی از سلول‌های خورشیدی مثل ضریب پرتشدگی، جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، بازدهی کوانتومی و بسیاری دیگر از پارامترهای سلول‌های خورشیدی را دارد. این نرم‌افزار بر اساس معادلات پواسون برای الکترون - حفره طراحی شده است [۲۴].

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{e}{\epsilon_0\epsilon_r} [p(x) - n(x) + N_D - N_A + \rho_p - \rho_n] \quad (۱)$$

که در آن Ψ پتانسیل الکترواستاتیک، p ، n غلظت الکترون و حفره، ϵ گذردهی خلا، ϵ_r گذردهی نسبی، N_A و N_D چگالی دوپینگ دهنده و پذیرنده و ρ_p و ρ_n چگالی الکترون و حفره است.

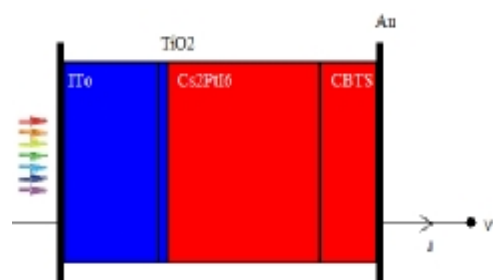
$$\frac{dJ_p}{dx} = \frac{dJ_n}{dx} = G - R, \quad (۲)$$

که G میزان تولید و R نرخ بازترکیب حامل‌های بار است. J_n و J_p به ترتیب چگالی جریان حفره و الکترون است. حرکت حامل‌های بار بر اساس معادلات رانش و انتشار رخ می‌دهد،

$$J_n = \mu_n n \frac{d\phi}{dx} + D_n \frac{dn}{dx} \quad (۳)$$

$$J_p = \mu_p p \frac{d\phi}{dx} + D_p \frac{dp}{dx} \quad (۴)$$

در شکل ۱ سلول خورشیدی پیشنهادی ما قابل مشاهده است.



شکل ۱. ساختار یک بعدی سلول خورشیدی پیشنهادی

در این شبیه‌سازی ما از نور استاندارد خورشید 1.5G AM استفاده کردیم. پارامترهای شبیه‌سازی در این مطالعه در جدول

۱ آمده است. این پارامترها با مطالعه دقیق یافته‌های آزمایشگاهی و تئوری قبلی به دست آمده است [۲۴-۲۶].

نتایج

اثر تغییر ضخامت لایه پروسکایت بر بازدهی سلول خورشیدی

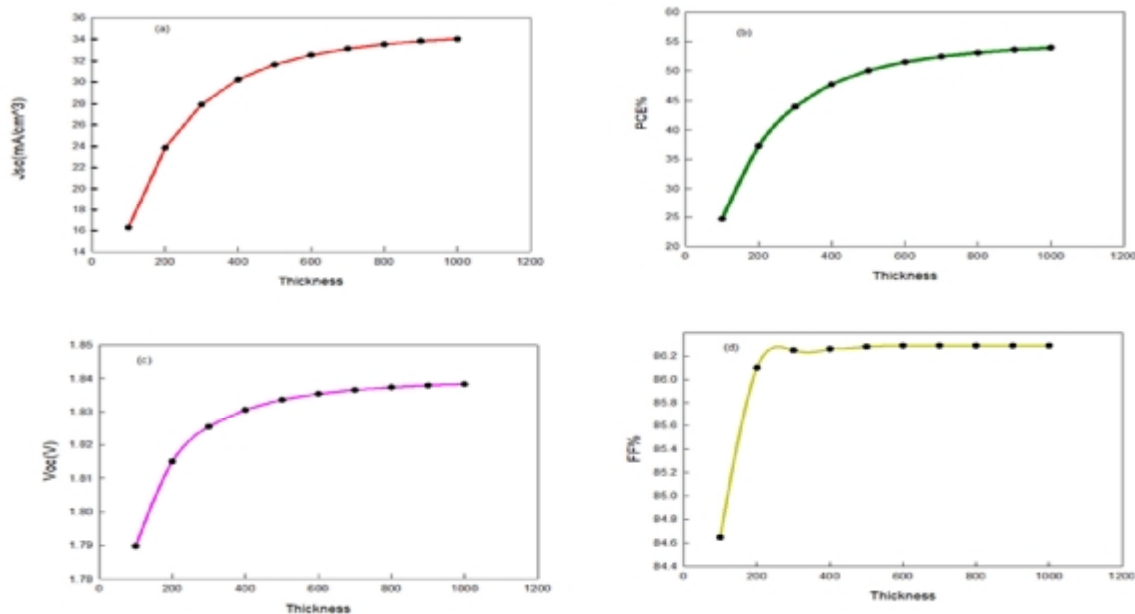
ضخامت لایه پروسکایت (لایه جاذب) نقش مهمی در کارایی سلول خورشیدی ایفا می‌کند؛ به این دلیل که ضخامت این لایه در جذب فوتون اثر دارد. در این مطالعه ضخامت این لایه از ۱۰۰ نانومتر تا ۱۰۰۰ نانومتر تغییر می‌کند. در طراحی سلول‌های خورشیدی ضخامت لایه پروسکایت اهمیت بسیاری دارد؛ زیرا زوج الکترون - حفره در لایه جاذب ایجاد می‌گردد و افزایش ضخامت لایه جاذب سبب افزایش برخورد نور به ماده و افزایش تولید زوج الکترون-حفره می‌گردد.

جدول ۱. پارامترهای مواد استفاده‌شده در شبیه‌سازی سلول خورشیدی

Parameters	ITO	TiO ₂	Cs ₂ PtI ₆	CBTS
Thickness(nm)	500	50	800	300
Bandgap(eV)	3.6	3.2	1.33	1.9
Electronaffinity(eV)	4.1	4.2	4.3	3.6
Dielectricpermittivity	10	10	4.8	5.4
Electronmobility(cm ² /Vs)	50	100	62	30
Holemobility(cm ² /Vs)	50	25	62	10
EffectivedensityofstatesatC B,Nc(cm-3)	10 ¹⁹	1.8×10 ¹⁸	3×10 ¹⁴	2.2×10 ¹⁸
EffectivedensityofstatesatC B,Nc(cm-3)	10 ¹⁹	2.2×10 ¹⁸	10 ¹⁷	1.8×10 ¹⁹

حامل‌های بار تجاوز کند زیرا در این صورت فرایند بازترکیب افزایش می‌یابد. به دلیل بالا بودن ضریب جذب Cs₂PtI₆ ($4 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$) افزایش ضخامت لایه پروسکایت باعث جذب نور و افزایش تولید زوج الکترون- حفره می‌شود. در شکل ۲a نمودار چگالی جریان اتصال کوتاه، J_{sc}، بر حسب ضخامت لایه پروسکایت قابل مشاهده است. همان گونه که مشخص است در ضخامت ۸۰۰ نانومتر چگالی جریان به مقدار ۳۳/۵ می‌رسد و در ضخامت‌های بالاتر تغییر شدت جریان قابل ملاحظه نیست.

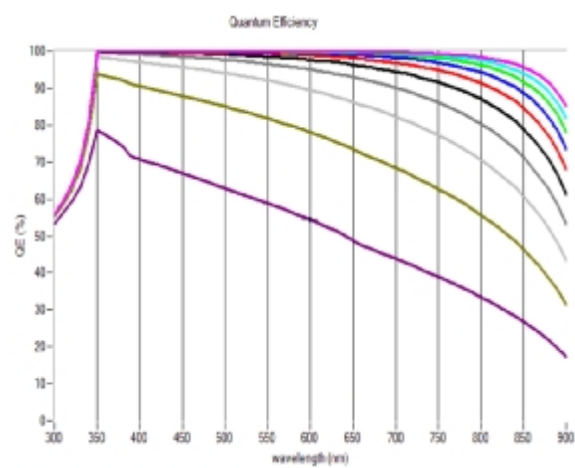
شکل ۲b نمودار راندمان تبدیل توان، PCE، را برحسب ضخامت لایه پروسکایت نشان می‌دهد. مشخص است که افزایش ضخامت باعث افزایش PCE می‌گردد و افزایش بازدهی تا ضخامت ۸۰۰ نانومتر با سرعت بیشتری اتفاق می‌افتد و از آن به بعد تقریباً ثابت می‌ماند. در ضخامت ۸۰۰ نانومتر مقدار PCE به ۵۳/۱۶٪ می‌رسد. دلیل افزایش PCE افزایش جذب نور در ضخامت‌های بالاتر و افزایش تولید حامل‌های بار است. با افزایش بیشتر ضخامت به دلیل افزایش میزان بازترکیب حامل‌های بار، PCE کاهش می‌یابد [۲۷]. بیشترین مقدار PCE به دست آمده در مطالعات قبلی برای سلول خورشیدی پروسکایت Cs₂PtI₆ حدود ۳۰٪ بوده است، در حالی که در این ساختار بیشترین مقدار PCE حدود ۵۳٪ است [۲۴]. یکی از دلایل این امر هم‌راستایی سطوح انرژی میان



شکل ۲. اثر ضخامت لایه پروسکایت بر پارامترهای فوتوولتاییک (a) تغییرات J_{sc} بر حسب ضخامت، (b) تغییرات PCE بر حسب ضخامت، (c) تغییرات Voc بر حسب ضخامت، (d) تغییرات FF بر حسب ضخامت

این افزایش سبب افزایش راندمان در سلول خورشیدی می‌شود. البته افزایش ضخامت لایه جاذب نباید از طول نفوذ

در شکل ۴ می‌توان راندمان کوانتومی $(QE)^2$ سلول خورشیدی را به ازای ضخامت‌های مختلف لایه پروسکایت و طول موج‌های ۳۰۰ تا ۹۰۰ نانومتر مشاهده کرد. راندمان کوانتومی بیانگر احتمال ایجاد یک الکترون در مدار خارجی سلول خورشیدی بر اثر برخورد فوتون است. در این شکل مشخص است که بیشترین راندمان کوانتومی در طول موج ۳۵۰ نانومتر رخ می‌دهد و با افزایش ضخامت از حدود ۷۸٪ به ۱۰۰٪ می‌رسد. بالا بودن راندمان کوانتومی لایه پروسکایت به دلیل بالا بودن ضریب جذب ماده Cs_2PtI_6 است. این نتایج نشان می‌دهد که این ماده از لحاظ اپتیکی فعال بوده و می‌تواند کاربردهای دیگری در فوتو ولتاییک داشته باشد.



شکل ۴. نمودار راندمان کوانتومی در ضخامت‌های مختلف لایه پروسکایت از ۱۰۰ نانومتر تا ۱۰۰۰ نانومتر.

تاثیر حرارت بر پارامترهای فوتوولتاییک و بازدهی سلول خورشیدی

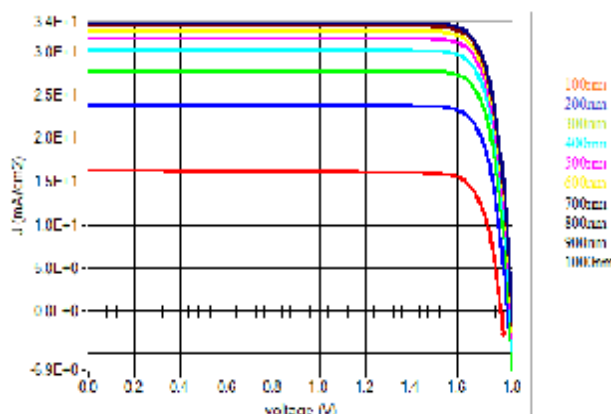
درجه حرارت تاثیر مستقیم بر حرکت الکترون‌ها و حفره‌ها و همچنین غلظت حامل‌های بار دارد و این عوامل اثر مستقیم بر بازدهی سلول‌های خورشیدی دارند [۲۸]. همچنین افزایش دما به دلیل کاهش میزان نوار ممنوعه و افزایش تولید الکترون-حفره سبب افزایش میزان J_{sc} خواهد شد. در این مطالعه اثر افزایش حرارت را از ۲۹۰ تا ۴۰۰ کلوین بررسی کردیم. تحقیقات نشان می‌دهد که بر اساس معادله (۵) افزایش حرارت باعث افزایش مقدار I_0 و کاهش مقدار V_{oc} به صورت نمایی می‌گردد [۲۸]. در شکل ۵ (a-d) تغییرات پارامترهای فوتوولتاییک با تغییرات دما مشخص است.

مواد به کار رفته در لایه‌های مختلف است. در سلول خورشیدی پروسکایت به طور همزمان حفره‌ها به سمت لایه CBTS حرکت می‌کنند و الکترون‌ها به لایه TiO_2 تزریق می‌شوند. پس از آن الکترون‌ها و حفره‌ها از طریق لایه طلا و ITO جذب می‌شوند. شکل ۲c میزان تغییرات ولتاژ مدار باز، V_{oc} را برحسب ضخامت لایه پروسکایت نشان می‌دهد. V_{oc} از مقدار ۱/۷۸ ولت در ضخامت ۱۰۰ نانومتر تا مقدار ۱/۸۳ برای ضخامت ۱۰۰۰ نانومتر تغییر می‌کند. V_{oc} بر اساس معادله زیر به دست می‌آید،

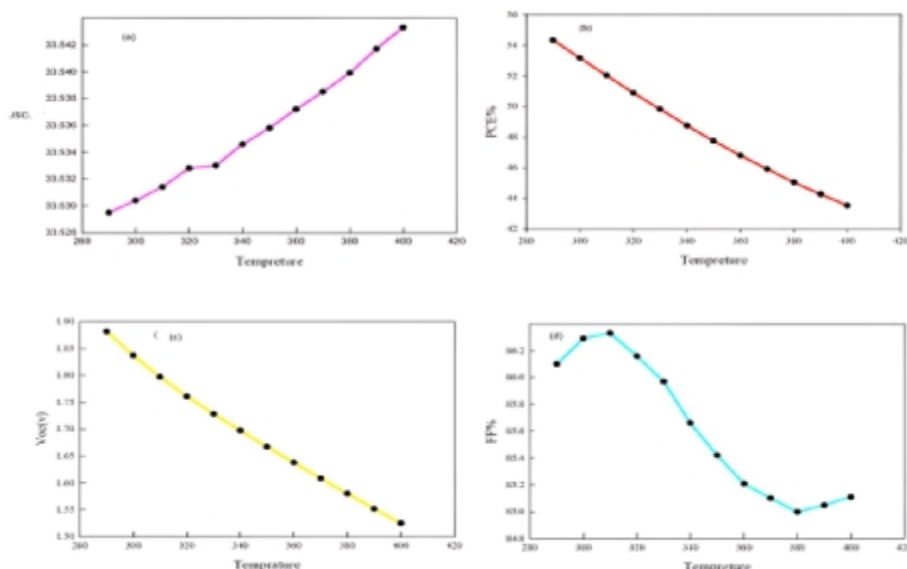
$$V_{oc} = \frac{K_B T}{q} \ln \left(\frac{I_L}{I_0} + 1 \right) \quad (5)$$

که K_B ثابت بولتزمن، q بار الکتریکی، I_0 جریان اشباع (تاریکی) و I_L جریان حاصل از روشنایی و T دما است. با افزایش ضخامت میزان جذب نور و در نتیجه تولید حامل‌های بار افزایش یافته و در نتیجه I_L افزایش یافته و سپس V_{oc} افزایش می‌یابد.

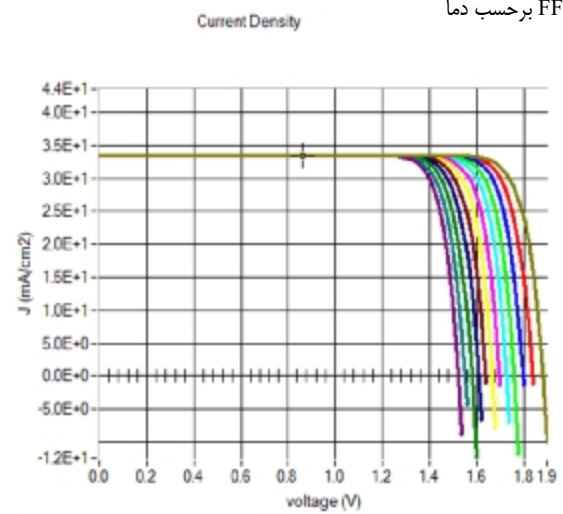
شکل ۲d نمودار ضریب پرشدگی FF^2 را برحسب ضخامت لایه پروسکایت نشان می‌دهد. FF به مقاومت مسیر بار مربوط می‌شود و کارایی انتقال حفره‌ها و الکترون‌ها در سلول را بدون کاهش نشان می‌دهد. در این نمودار مشخص است که FF تا ضخامت ۲۰۰ نانومتر افزایش یافته و پس از آن تغییر قابل ملاحظه‌ای ندارد. شکل ۳ نمودار $J-V$ را به ازای ضخامت‌های مختلف لایه پروسکایت نشان می‌دهد. همان گونه که قبلاً توضیح داده شد افزایش ضخامت باعث افزایش مقدار V_{oc} می‌گردد.



شکل ۳. نمودار $J-V$ در ضخامت‌های مختلف لایه پروسکایت. افزایش ضخامت باعث افزایش سطح زیر نمودار و افزایش راندمان می‌شود.



شکل ۵. تغییرات پارامترهای فوتوولتائیک با تغییرات دما: (a) تغییرات Jsc بر حسب دما، (b) تغییرات PCE بر حسب دما، (c) تغییرات Voc بر حسب دما، (d) تغییرات FF بر حسب دما



شکل ۶. نمودار J-V در دماهای مختلف. افزایش دما سبب کاهش سطح زیر نمودار و کاهش راندمان است.

جدول ۲. پارامترهای فوتوولتائیک بر اثر اعمال چگالی نقص در لایه

پروسکایت

Defect density/cm ³	Voc(v)	Jsc(mA/cm ²)	FF%	PCE%
10 ¹⁴	1.33	33.53	85.30	38.05
10 ¹⁵	1.22	33.52	85.84	35.13
10 ¹⁶	1.13	33.49	83.67	31.73
10 ¹⁷	1.05	33.22	77.19	27.05
10 ¹⁸	0.95	30.96	70.24	20.74
10 ¹⁹	0.83	20.77	55.58	9.60
10 ²⁰	0.67	4.77	38.52	1.25

ایجاد نقص‌ها در لایه‌های مختلف سلول‌های خورشیدی و همچنین در فصل مشترک لایه‌ها، به هنگام لایه نشانی رخ می‌دهد. وجود نقص در لایه‌های پروسکایت عامل بسیار مهمی

شکل a ۵ تغییرات Jsc را با تغییرات دما نشان می‌دهد که از ۳۳/۵۲ mA/cm² برای ۲۹۰ کلون تا ۳۳/۵۴ mA/cm² برای ۴۰۰ کلون است. در شکل ۵b میزان تغییرات PCE نشان داده شده است. همان گونه که مشخص است PCE با افزایش دما کاهش می‌یابد. شکل ۵c تغییرات Voc را بر حسب تغییرات دما نشان می‌دهد. این تغییرات از میزان ۱/۸۸ v برای دمای ۲۹۰ کلون تا ۱/۵۲ v برای دمای ۴۰۰ کلون است. در شکل ۵d کاهش FF با افزایش دما مشخص می‌شود. این کاهش از ۸۶/۱۱٪ برای ۲۹۰ کلون تا ۸۵/۱۱٪ برای ۴۰۰ کلون است.

در شکل ۶ نمودار J-V سلول خورشیدی را در دماهای مختلف می‌توان مشاهده کرد. کاهش میزان Voc با افزایش دما در این شکل مشخص است.

تاثیر چگالی نقص^۱ در پارامترهای فوتوولتائیک سلول خورشیدی

جدول ۲ میزان تغییرات Voc، Jsc، FF و PCE را به ازای مقادیر مختلف چگالی نقص نشان می‌دهد. کاهش شدید عملکرد سلول خورشیدی با افزایش چگالی نقص قابل مشاهده است. همان گونه که در قسمت‌های قبل توضیح داده شد، PCE سلول خورشیدی بدون در نظر گرفتن چگالی نقص حدود ۵۳٪ است که این مقدار با در نظر گرفتن چگالی نقص از حدود ۳۸٪ تا ۱/۲۵٪ طبق جدول ۲ کاهش می‌یابد که کاهش بسیار شدیدی است.

1 Defect Density

لایه جاذب تا حدی که از طول نفوذ حامل‌های بار تجاوز نکند می‌تواند سبب افزایش راندمان سلول خورشیدی بشود. این ضخامت برای سلول خورشیدی طراحی شده ۱۰۰۰ نانومتر است. از سوی دیگر مشخص شد که افزایش دما از ۲۹۰ تا ۴۰۰ کلین، کاهش راندمان سلول خورشیدی به میزان ۱۹/۸۸٪ را به همراه دارد. علاوه بر این اثر چگالی نقص در لایه پروسکایت به عنوان لایه جاذب بررسی شد و مشخص گردید افزایش چگالی نقص از $10^{14}/\text{cm}^3$ تا $10^{20}/\text{cm}^3$ به دلیل بالا بردن فرایند بازترکیب حامل‌های بار به شدت و به میزان ۹۶/۷٪ در کاهش راندمان سلول‌های خورشیدی پروسکایت اثر دارد. نتایج به دست آمده در این تحقیق در مقایسه با مطالعات انجام شده روی سلول‌های خورشیدی پروسکایت Cs_2PtI_6 راندمان بالاتری را نشان می‌دهد. این مطالعه می‌تواند در فرایند تولید سلول‌های خورشیدی بدون سرب موثر باشد.

در افزایش میزان بازترکیب و کاهش کارایی سلول خورشیدی پروسکایت است. در این بخش با در نظر گرفتن میزان چگالی نقص در لایه پروسکایت از $10^{14}/\text{cm}^3$ تا $10^{20}/\text{cm}^3$ ، تغییرات در پارامترهای فوتوولتاییک سلول خورشیدی را بررسی کرده‌ایم که نتایج آن در جدول ۲ قابل مشاهده است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش یک مدل سلول خورشیدی پروسکایت بدون سرب n-i-p بررسی شد و از یک نیمه هادی نوظهور به عنوان لایه انتقال‌دهنده حفره استفاده شد. اثر تغییر ضخامت لایه جاذب نور، تغییر دما و تغییر چگالی نقص‌های لایه پروسکایت بر پارامترهای فوتوولتاییک بررسی گردید. پارامترهای محاسبه شده در این پژوهش V_{oc} ، J_{sc} ، FF ، PCE و QE است. این پژوهش با استفاده از نرم‌افزار SCAPS-1D نسخه ۳.۳.۱۰ انجام گردید. نتایج این تحقیق نشان داد که افزایش ضخامت

References

- [1] Chen H. Y. F., Tang W. T., He J. J., Yin M. S., Wang M., Xie F. X., Bi E. B., Yang X. D., and Gratzel M. (2017) A solvent- and vacuum-free route to large-area perovskite films for efficient solar modules. *Nature*, 550, 92–95.
- [2] Wang Z., Lin Q., Chmiel F.P., Sakai N., Herz L.M. and Snaith H.J. (2017) Efficient ambient-air-stable solar cells with 2D–3D heterostructured butylammonium-caesiumformamidinium lead halide perovskites. *Nat. Energy*, 2(9) 1-10.
- [3] Eperon G.E., Stranks S.D., Menelaou C., Johnston M.B., Herz L.M., and Snaith H.J. (2014) Formamidinium lead trihalide: a broadly tunable perovskite for efficient planar heterojunction solar cells. *Energy Environ. Sci.*, 7(3) 982–988.
- [4] Shi Z., Li S., Li Y., Ji H., Li X. Wu D., Xu T., Chen Y., Tian Y., Zhang Y., Shan C., and Du G. (2018) Strategy of solution-processed all-inorganic heterostructure for humidity/temperature-stable perovskite quantum dot light-emitting diodes. *ACS Nano*, 12(2) 1462–1472.
- [5] Jeong M., et al., (2022) Large-area perovskite solar cells employing spiro-Naph hole transport material. *Nat. Photonics*, 16(2) 119–125.
- [6] Lin R., et al., (2022) All-perovskite tandem solar cells with improved grain surface passivation. *Nature*, 603 (7899) 73–78.
- [7] Xiao K., et al., (2022) All-perovskite tandem solar cells with 24.2% certified efficiency and area over 1 cm² using surface anchoring zwitterionic antioxidant, *Nat. Energy*, 5(11) 870–880.
- [8] Stranks S.D., and Snaith H. J. (2015) Metal-halide perovskites for photovoltaic and light-emitting devices, *Nat. Nanotechnol.*, 10(5) 391–402.
- [9] Hörantner M. T. , and Snaith H. J. (2017) Predicting and optimizing the energy yield of perovskite-on-silicon tandem solar cells under real

منابع

- world conditions. *Energy Environ. Sci.*, 10(9) 1983–1993.
- [10] Berhe et al.,(2016) Organometal halide perovskite solar cells: degradation and stability, *Energy Environ. Sci.*, 9(2), 323–356.
- [11] Ahmadi N. (2024) The Effect of Au Nanocomposites Periodic Array on the Efficiency of Lead-Free Double Perovskite Solar Cells, *Optoelectronic*, 6(3),47-54.
- [12] Chen M., et al. (2018) Cesium titanium (IV) bromide thin films based stable lead-free perovskite solar cells, *Joule*, 2(3), 558–570.
- [13] Weber S., et al., (2018) Influence of the iodide to bromide ratio on crystallographic and optoelectronic properties of rubidium antimony halide perovskites, *ACS Appl. Energy Mater.*, 2(1), 539–547.
- [14] Umar F., et al., (2019) Dimensionality controlling of $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{I}_9$ for efficient all inorganic planar thin film solar cells by HCl-assisted solution method, *Adv. Opt. Mater.*, 7(5),1801368.
- [15] Dai W., et al., (2019) Lead-free, stable, and effective double $\text{FA}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{Cl}_{1.2}$ perovskite for photovoltaic applications, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 192, 140–146.
- [16] Kulkarni A., et al., (2019) Performance enhancement of AgBi_2I_7 solar cells by modulating a solvent-mediated adduct and tuning remnant BiI_3 in one-step crystallization, *Chem. Commun.*, 55(28), 4031–4034.
- [17] Ahmad K., et al., (2019) A $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_3\text{Bi}_2\text{I}_9$ Perovskite Based on a Two-Step Deposition Method: Lead-Free, Highly Stable, and with Enhanced Photovoltaic Performance, *Chem Electro Chem*, 6(4), 1192–1198.
- [18] Ahmad S., et al. (2019) Triple-Cation-Based Perovskite Photocathodes with AZO Protective

- Layer for Hydrogen Production Applications, *ACS Appl. Mater. & Interfaces*, 9b04963.
- [19] Crespo-Quesada M., Pazos-Outón L. M., Warnan J., Kuehnel M. F. Friend R.H., and Reisner, E. (2016) *Nat. Commun.* 7, 6–12.
- [20] Schwartz D., et al., (2020) Air Stable, High-Efficiency, Pt-Based Halide Perovskite Solar Cells with Long Carrier Lifetimes, *Phys. Status Solidi – Rapid Res. Lett.*, 14(8), 2000182.
- [21] Shamna M., and Sudheer K. (2022) Device modeling of CS₂PtI₆-based perovskite solar cell with diverse transport materials and contact metal electrodes: a comprehensive simulation study using solar cell capacitance simulator, *J. Photonics Energy*, 12(3), 032211.
- [22] AbdelAziz H.H. et al., (2022) Evaluating the performance of Cs₂PtI₆-xBr_x for photovoltaic and photocatalytic applications using first-principles Cs₂PtI₆-xBr_x for photovoltaic and photocatalytic applications using first-principles study and SCAPS-1D simulation, *Heliyon*, 8(10), e10808.
- [23] Yang S., et al., (2020) Novel lead-free material Cs₂PtI₆ with narrow bandgap and ultra-stability for its photovoltaic application, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 12(40), 44700–44709.
- [24] Amjad A., et al. (2023) Numerical simulation of lead-free vacancy ordered Cs₂PtI₆ based perovskite solar cell using SCAPS-1D, *RSC Adv.*, 13, 23211–23222.
- [25] Hossain, M. K., Rubel, M. H. K., Toki, G. F. I., Alam, I., Rahman, M. F., and Bencherif, H. (2022) Effect of Various Electron and Hole Transport layers on performance of CsPbI₃-Based Perovskite Solar Cells: A Numerical Investigation in DFT, SCAPS-1D, and WxAMPS Frameworks. *ACS Omega*, 7, 43210–43230.
- [26] Srivastava, S., Singh, A. K., Kumar, P., and Pradhan, B. (2022) Comparative Performance Analysis of Lead-Free Perovskites Solar Cells by Numerical Simulation, *J. Appl. Phys.*, 131, 175001.
- [27] Tan T. et al. (2016) Controllable design of solid-state perovskite solar cells by SCAPS device simulation, *Solid-State Electron.*, 126, 75–80.
- [28] Hossain S. et al. (2011) A numerical study on the prospects of high efficiency ultra thin Zn_x Cd_{1-x} S/Cd te solar cell, *Chalcogenide Lett.*, 8(4), 263–272.