

ORIGINAL ARTICLE**Numerical Simulation And Design Of Lead-Free Perovskite Cs₂PtI₆ Solar Cell With CBTS As A Hole Transport Layer****Correspondence**

Email:

How to cite**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, operating temperature, and defect density on key photovoltaic parameters, including the short-circuit current density, open-circuit voltage, fill factor, power conversion efficiency, and quantum efficiency. 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%) was 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.

KEYWORDS

Solar cell, lead-free perovskite, SCAPS- 1D, Quantum efficiency.

فصلنامه علمی

اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

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

1

چکیده

در این مطالعه، سلول خورشیدی پروسکایت بدون سرب Cs₂PtI₆ (سزیوم پلاتینوم دیدید) توسط نرم‌افزار SCAPS-1D بررسی شد و اثر ضخامت لایه پروسکایت، دما، ودانسیتته نقص‌ها بر پارامترهای فوتوولتاییک بررسی گردید. ساختار سلول خورشیدی پیشنهادی n-i-p بوده و معماری آن به صورت IT_o/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 افزایش ضخامت لایه پروسکایت تا حدی که از طول نفوذ حامل‌های بار بیشتر نشود راندمان سلول خورشیدی را 29/2% افزایش می‌دهد. همچنین مشخص شد که افزایش 110 کلومین دما باعث کاهش راندمان 10/7% 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 36/8% 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.

نویسنده مسئول:

رایانامه:

استناد به این مقاله:

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 محققین را به خود جلب کرده است [1-4]. در یک دهه گذشته با مطالعات انجام شده بازدهی این سلول‌های خورشیدی از 3/3% به حدود 25% 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: 1- ناپایداری این سلول‌های خورشیدی 2- سمی بودن سرب موجود در بسیاری از مواد پروسکایت. به عنوان مثال یون‌های متیل آمونیوم (MA⁺) (methyl ammonium) و فرمامیدینیوم (FA⁺) (formamidinium) به کار رفته در پروسکایت در مقابل شرایط جوی ناپایدار هستند [5-10]. 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 Cs₂AgBiI₆، Cs₂AgBiBr₆، Cs₂Au₂I₆ و CsGe_{0.5}Sn_{0.5}I₃، AgBiI₄، Cs₂TiBr₆ [11-17] 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 A₂BX₆ 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) می‌نشیند. این مواد پروسکایت دو گانه بدون سرب که دارای نوار ممنوعه مناسب هستند بسیار مورد توجه محققین قرار گرفته‌اند. یکی از این مواد که در دسته A₂BX₆ قرار دارد و بسیار مورد توجه قرار گرفته است Cs₂PtI₆ سزیوم پلاتینیوم یدید است. علت مورد توجه قرار گرفتن این ماده حرکت بار بالا، ضریب جذب نور بالا و نوار ممنوعه کم است [18]. همچنین این ماده با ساختار مکعبی در شرایط سخت محیطی مثل دمای بالا، شدت اشعه UV و رطوبت زیاد پایدار است [19]. استفاده از شبیه‌سازی در سلول‌های خورشیدی از جمله سلول‌های خورشیدی بر مبنای ماده پروسکایت Cs₂PtI₆ به بهبود عملکرد سلول کمک بسیار می‌کند [20-23]. در این مطالعه با استفاده از نرم‌افزار SCAPS-1D نسخه 3.3.10 یک سلول خورشیدی جدید n-i-p را با ساختار ITO/TiO₂/Cs₂PtI₆/CBTS/Au بررسی می‌کنیم. لایه

هدایت دهنده حفره در این سلول خورشیدی CBTS (Cu₂BaSnS₄) 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 3.3.10 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 پرشدگی، جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز، بازدهی کوانتومی و بسیار دیگر از پارامترهای سلول‌های خورشیدی را دارد. این نرم‌افزار بر اساس معادلات پواسون برای الکترون - حفره طراحی شده است [24].

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{e}{\epsilon_0\epsilon_r} [p(x) - n(x) + N_D - N_A + \rho_p - \rho_n] \quad (1)$$

که در آن Ψ پتانسیل الکترواستاتیک، n ، p غلظت الکترون و حفره، ϵ_0 گذردهی خلا، ϵ_r گذردهی نسبی، N_D و N_A چگالی دوپینگ دهنده و پذیرنده و ρ_p و ρ_n چگالی الکترون و حفره است

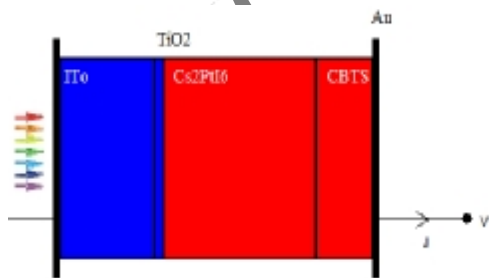
$$\frac{dJ_p}{dx} = \frac{dJ_n}{dx} = G - R \quad (2)$$

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.

$$J_n = \mu_n n \frac{d\phi}{dx} + D_n \frac{dn}{dx} \quad (3)$$

$$J_p = \mu_p p \frac{d\phi}{dx} + D_p \frac{dp}{dx} \quad (4)$$

در شکل 1 سلول خورشیدی پیشنهادی ما قابل مشاهده است.



شکل 1. 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 1 آمده است. این پارامترها با مطالعه دقیق یافته‌های

آزمایشگاهی و تئوری قبلی به دست آمده است [24-26].

جدول 1. پارامترهای مواد استفاده شده در شبیه سازی سلول خورشیدی

Parameters	ITO	TiO ₂	Cs ₂ PtI ₆	CBTS
Thickness(nm)	500	50	800	300
Band gap (eV)	3/6	3/2	1/33	1/9
Electron affinity (eV)	4/1	4/2	4/3	3/6
Dielectric permittivity ϵ_r	10	10	4/8	5/4
Electron mobility(cm ² /Vs)	50	100	62	30
Hole mobility(cm ² /Vs)	50	25	62	10
Effective density of states at CB, Nc (cm ⁻³)	10 ¹⁹	1.8 × 10 ¹⁸	3 × 10 ¹⁴	2.2 × 10 ¹⁸
Effective density of states at VB, Nv (cm ⁻³)	10 ¹⁹	2.2 × 10 ¹⁸	10 ¹⁷	1.8 × 10 ¹⁹

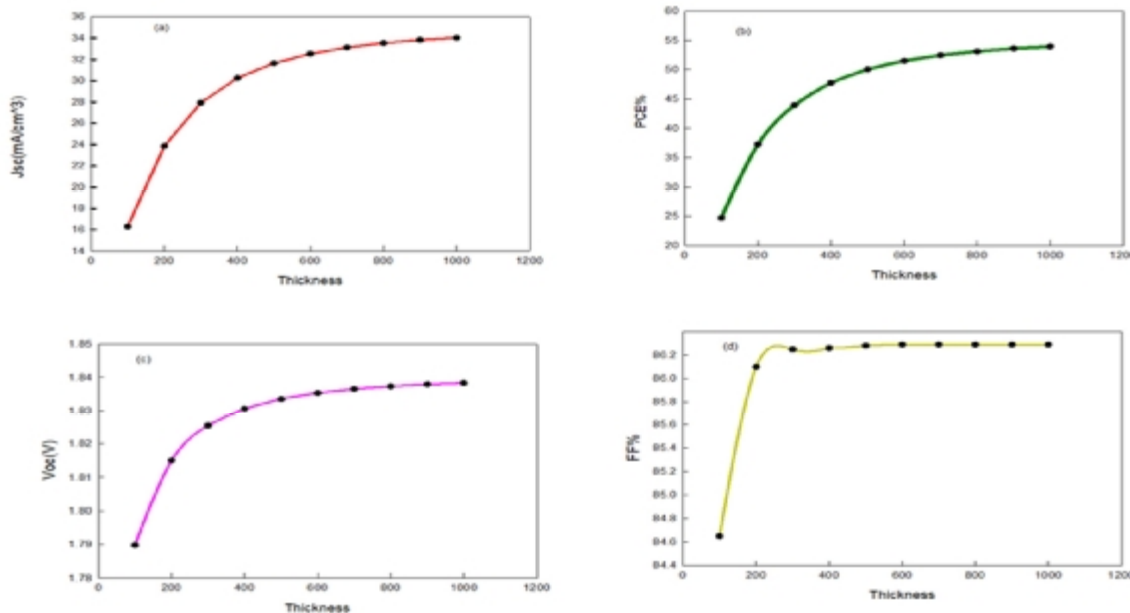
نتایج

اثر تغییر ضخامت لایه پروسکایت بر بازدهی سلول خورشیدی

ضخامت لایه پروسکایت (لایه جاذب) نقش مهمی را در کارایی

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. این افزایش سبب افزایش راندمان در سلول خورشیدی می‌شود. البته افزایش ضخامت لایه جاذب نباید از طول نفوذ 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 2a نمودار چگالی جریان اتصال کوتاه¹، J_{sc}، بر حسب ضخامت لایه پروسکایت قابل مشاهده است. همان گونه که مشخص است در ضخامت 800 نانومتر چگالی جریان به مقدار 33/5 می‌رسد و در ضخامت‌های بالاتر تغییر شدت جریان قابل ملاحظه نیست.

شکل 2b نمودار راندمان تبدیل توان²، PCE را بر حسب ضخامت لایه پروسکایت نشان می‌دهد. مشخص است که افزایش ضخامت باعث افزایش PCE می‌گردد و افزایش بازدهی تا ضخامت 800 نانومتر با سرعت بیشتری اتفاق می‌افتد و از آن به بعد تقریباً ثابت می‌ماند. در ضخامت 800 نانومتر مقدار PCE به 53/16 % می‌رسد. دلیل افزایش PCE



شکل 2. اثر ضخامت لایه پروسکایت بر پارامترهای فوتوولتاییک (a) تغییرات Jsc بر حسب ضخامت، (b) تغییرات PCE بر حسب ضخامت، (c) تغییرات Voc بر حسب ضخامت، (d) تغییرات FF بر حسب ضخامت

افزایش جذب نور در ضخامت‌های بالاتر و افزایش تولید حامل‌های بار است. با افزایش بیشتر ضخامت به دلیل افزایش

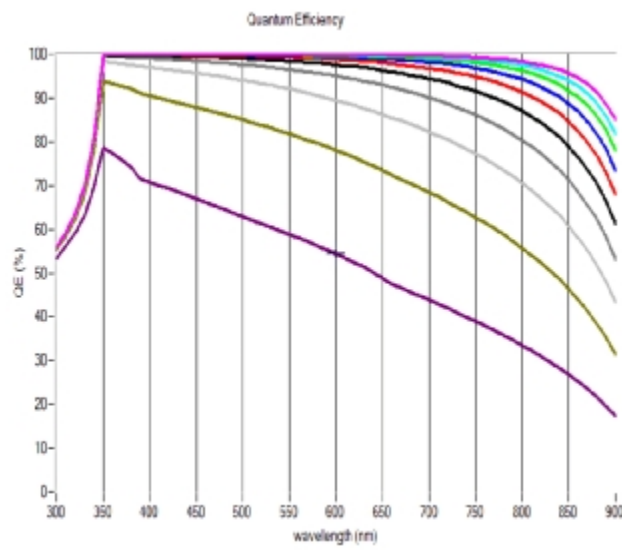
سلول خورشیدی ایفا می‌کند به این دلیل که ضخامت این لایه در جذب فوتون اثر دارد. در این مطالعه ضخامت این لایه از 100 نانومتر تا 1000 نانومتر تغییر می‌کند. در طراحی سلول‌های خورشیدی ضخامت لایه پروسکایت اهمیت بسیاری دارد

1 Short-Circuit Current Density

2 Power Conversion Efficiency

ملاحظه‌ای ندارد. شکل 3 نمودار J-V را به ازای ضخامت‌های مختلف لایه پروسکایت نشان می‌دهد همان گونه که قبلاً توضیح داده شد افزایش ضخامت باعث افزایش مقدار Voc می‌گردد.

در شکل 4 می‌توان راندمان کوانتومی³ (QE) سلول خورشیدی را به ازای ضخامت‌های مختلف لایه پروسکایت و طول موج‌های 300 تا 900 نانو متر 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 350 نانومتر رخ می‌دهد و با افزایش ضخامت از حدود 78% به 100% میرسد. بالا بودن راندمان کوانتومی لایه پروسکایت به دلیل بالا بودن ضریب جذب ماده Cs₂PtI₆ است. این نتایج نشان می‌دهد که این ماده از لحاظ اپتیکی فعال بوده و می‌تواند کاربردهای دیگری در فوتو ولتاییک داشته باشد.



شکل 4. نمودار راندمان کوانتومی در ضخامت‌های مختلف لایه پروسکایت از 100 نانومتر تا 1000 نانومتر.

تاثیر حرارت بر پارامترهای فوتوولتاییک و بازدهی سلول خورشیدی

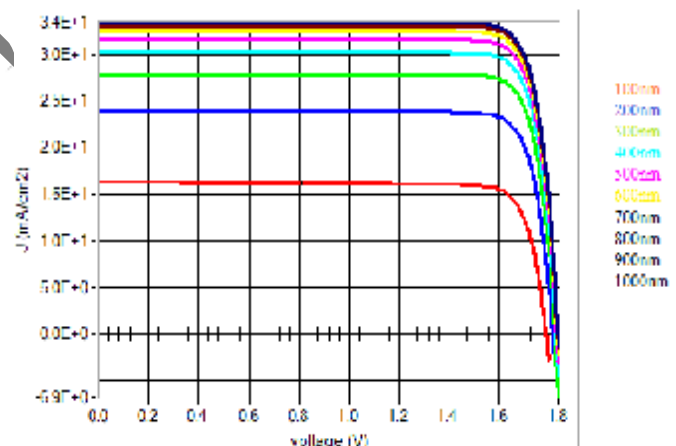
درجه حرارت تاثیر مستقیم بر حرکت الکترون‌ها و حفره‌ها و همچنین غلظت حامل‌های بار دارد و این عوامل اثر مستقیم بر بازدهی سلول‌های خورشیدی دارند [28]. همچنین افزایش دما به دلیل کاهش میزان نوار ممنوعه و افزایش تولید الکترون-حفره سبب افزایش میزان Jsc خواهد شد. در این مطالعه اثر

میزان باز ترکیب حامل‌های بار، PCE کاهش می‌یابد [27]. بیشترین مقدار PCE به دست آمده در مطالعات قبلی برای سلول خورشیدی پروسکایت Cs₂PtI₆ حدود 30% بوده است در حالی که در این ساختار بیشترین مقدار PCE حدود 53% است [24]. یکی از دلایل این امر هم‌راستایی سطوح انرژی میان 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 TiO₂ تزریق می‌شوند. پس از آن الکترون‌ها و حفره‌ها از طریق لایه طلا و ITO جذب می‌شوند. شکل 2c میزان تغییرات ولتاژمدار باز، Voc را بر حسب ضخامت لایه پروسکایت نشان می‌دهد. Voc از مقدار 1/78 ولت در ضخامت 100 نانومتر تا مقدار 1/83 برای ضخامت 1000 نانومتر تغییر می‌کند. Voc 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، I₀ 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 Voc افزایش می‌یابد.

شکل 2d نمودار ضریب پرشدگی FF² را بر حسب ضخامت



شکل 3. نمودار J-V در ضخامت‌های مختلف لایه پروسکایت. افزایش ضخامت باعث افزایش سطح زیر نمودار و افزایش راندمان می‌شود.

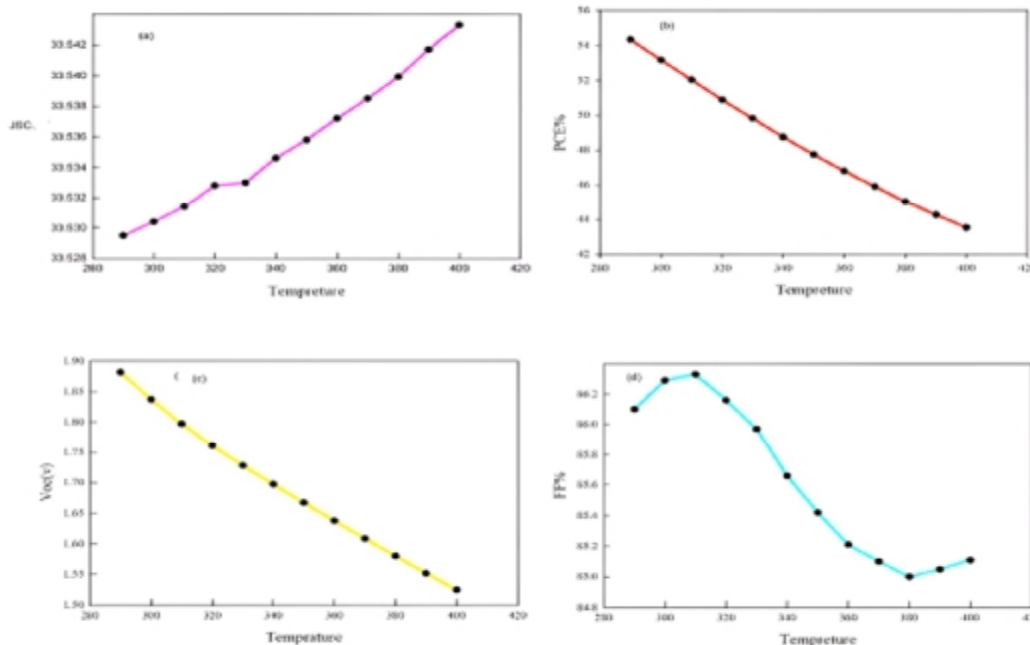
لایه پروسکایت نشان می‌دهد. FF به مقاومت مسیر بار مربوط میشود و کارایی انتقال حفره‌ها و الکترون‌ها در سلول را بدون کاهش نشان می‌دهد. در این نمودار مشخص است که FF تا ضخامت 200 نانومتر افزایش یافته و پس از آن تغییر قابل

3 Quantum Efficiency

1 Open-Circuit Voltage
2 Fill Factor

مقادیر مختلف چگالی نقص نشان می‌دهد. کاهش شدید عملکرد سلول خورشیدی با افزایش چگالی نقص قابل مشاهده

افزایش حرارت را از 290 تا 400 کلوین مورد بررسی قرار دادیم. تحقیقات نشان می‌دهد بر اساس معادله (5) افزایش

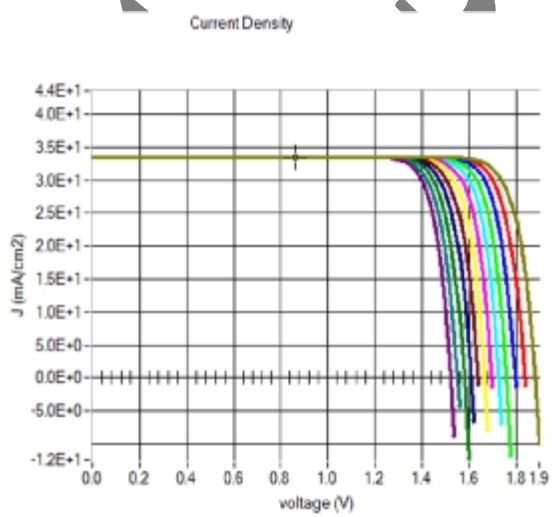


است. همان گونه که در قسمت‌های قبل توضیح داده شد، PCE سلول خورشیدی بدون در نظر گرفتن چگالی نقص حدود 53% است که این مقدار با در نظر گرفتن چگالی نقص از حدود 38% تا 1/25% طبق جدول 2 کاهش می‌یابد که کاهش بسیار شدیدی است.

حرارت باعث افزایش مقدار I_0 و کاهش مقدار V_{oc} به صورت نمایی می‌گردد [28]. در شکل 5 (a-d) تغییرات پارامترهای فوتوولتاییک با تغییرات دما مشخص است.

شکل 5a تغییرات J_{sc} را با تغییرات دما نشان می‌دهد که از $33/52 \text{ mA/cm}^2$ برای 290 کلوین تا $33/54 \text{ mA/cm}^2$ برای دمای 400 کلوین است. در شکل 5b میزان تغییرات PCE نشان داده شده است. همان گونه که مشخص است PCE با افزایش دما کاهش می‌یابد. شکل 5c تغییرات V_{oc} را بر حسب تغییرات دما نشان می‌دهد. این تغییرات از میزان $1/88$ برای دمای 290 کلوین تا $1/52$ برای دمای 400 کلوین است. در شکل 5d کاهش FF با افزایش دما مشخص می‌شود. این کاهش از $86/1\%$ برای 290 کلوین تا $85/11\%$ برای 400 کلوین است.

در شکل 6 نمودار J-V سلول خورشیدی را در دماهای مختلف می‌توان مشاهده کرد. کاهش میزان V_{oc} با افزایش دما در این شکل مشخص است.



شکل 6. نمودار J-V در دماهای مختلف. افزایش دما سبب کاهش سطح زیر نمودار و کاهش راندمان است.

تاثیر چگالی نقص¹ در پارامترهای فوتوولتاییک سلول خورشیدی

جدول 2 میزان تغییرات V_{oc} ، J_{sc} ، FF و PCE را به ازای

1 Defect density

شکل 5. تغییرات پارامترهای فوتوولتاییک با تغییرات دما: (a) تغییرات J_{sc} بر حسب دما، (b) تغییرات PCE بر حسب دما، (c) تغییرات V_{oc} بر حسب دما، (d) تغییرات FF بر حسب دما

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	22/22	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

سرب n-i-p مورد بررسی قرار گرفت و از یک نیمه هادی نوظهور به عنوان لایه انتقال دهنده حفره استفاده شد. اثر تغییر ضخامت لایه جاذب نور، تغییر دما و تغییر چگالی نقص‌های لایه پروسکایت بر پارامترهای فوتولتاییک بررسی گردید. پارامترهای محاسبه شده در این پژوهش Voc، Jsc، FF، PCE و QE است. این پژوهش با استفاده از نرم‌افزار SCAPS-1D نسخه 3.3.10 انجام گردید. نتایج این تحقیق نشان داد که افزایش ضخامت 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 1000 نانومتر است. از سوی دیگر مشخص شد که افزایش دما از 290 تا 400 کلوین کاهش راندمان سلول خورشیدی به میزان 19/88% 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 96/7% در کاهش راندمان سلول‌های خورشیدی پروسکایت اثر دارد. نتایج به دست آمده در این تحقیق در مقایسه با مطالعات انجام شده بر روی سلول‌های خورشیدی پروسکایت Cs₂PtI₆ راندمان بالاتری را نشان می‌دهد. این مطالعه می‌تواند در فرایند تولید سلول‌های خورشیدی بدون سرب موثر باشد.

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 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 فوتولتاییک سلول خورشیدی را بررسی کرده‌ایم که نتایج آن در جدول 2 قابل مشاهده است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش یک مدل سلول خورشیدی پروسکایت بدون

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.

منابع

- [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 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 Cs₃Sb₂I₉ 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 doubleFA₄Ge₁₁Sb₁₁Cl₁₂ perovskite for photovoltaic applications, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 192, 140–146.
- [16] Kulkarni A., et al., (2019) Performance enhancement of AgBi₂I₇ solar cells by modulating a solvent-mediated adduct and tuning remnant BiI₃ in one-step crystallization, *Chem. Commun.*, 55(28), 4031–4034.
- [17] Ahmad K., et al., (2019) A (CH₃NH₃)₃Bi₂I₉ 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.