

# نقش پروسکایت دوبعدی در بهبود پایداری و عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی بدون لایه انتقال‌دهنده حفره

مهناز مظفری، بهجت عباس\*، محمدعلی حداد و علی بنویدی

گروه تحقیقاتی فوتونیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران

**چکیده:** با توجه به اهمیت پایداری سلول‌های خورشیدی در تجاری سازی آنها، پروسکایت‌های دوبعدی در فصل مشترک بین پروسکایت سه‌بعدی و لایه‌های انتقال‌دهنده بار نقش مؤثری در بهبود پایداری سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دارند. در این پژوهش، پروسکایت سه‌کاتیونی سه‌بعدی و کاتیون فنیل‌تری‌متیل‌آمونیم برای تشکیل پروسکایت دوبعدی، به‌عنوان مواد جاذب نور در سلول‌های خورشیدی به‌کار برده شده‌است. با توجه به نفوذ رطوبت از همه جوانب لایه پروسکایت، به بررسی ساختارهای پروسکایت دوبعدی / سه‌بعدی، سه‌بعدی / دوبعدی و دوبعدی / سه‌بعدی / دوبعدی پرداختیم. نتایج نشان داد که تشکیل پروسکایت دوبعدی بر روی پروسکایت سه‌بعدی (سه‌بعدی / دوبعدی) افزون بر محافظت لایه پروسکایت سه‌بعدی در برابر رطوبت، منجر به بهبود ریخت‌شناسی لایه پروسکایت می‌شود. در حالی‌که، تشکیل پروسکایت دوبعدی در زیر پروسکایت سه‌بعدی (دوبعدی / سه‌بعدی) در بهبود بلورینگی پروسکایت سه‌بعدی مؤثر است. سلول‌های خورشیدی پروسکایتی سه‌بعدی / دوبعدی به‌دلیل بهبود بیشتر نقص‌های سطحی و کاهش بازترکیبی بار، بازده ۹/۸۱٪ از خود نشان دادند. در حالی‌که، سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دوبعدی / سه‌بعدی / دوبعدی با بهبود بلورینگی پروسکایت سه‌بعدی و محافظت دو جانبه پروسکایت سه‌بعدی با پروسکایت دوبعدی، ۹۸٪ از بازده اولیه خود را به مدت ۲۴۰ روز حفظ کردند.

**واژگان کلیدی:** سلول خورشیدی، پروسکایت دوبعدی / سه‌بعدی / دوبعدی، فنیل‌تری‌متیل‌آمونیم یدید، پایداری.

\*[abehjat@yazd.ac.ir](mailto:abehjat@yazd.ac.ir)

هستند که عملکرد سلول به‌دلیل بازترکیبی بار غیرتابشی محدود می‌شود [۸، ۹].

نقص‌ها روی سطح و در مرزهای دانه یک نقش مهم در نفوذ رطوبت یا اکسیژن به داخل لایه پروسکایت بازی می‌کنند و تخریب لایه را تسریع می‌بخشند. چندین روش از جمله: استفاده از مواد افزودنی، پیش‌ماده‌های جایگزین، استوکیومتری تغییر یافته [۱۰-۱۲]، کاتیون‌های فلز قلیایی کوچک [۱۳-۱۵] یا استفاده از لایه‌های بافر آلی نازک در رابط بین مواد انتقال‌دهنده بار و پروسکایت گزارش شده است [۱۶-۱۹]. چندین کار روی پروسکایت‌های چند بعدی با استفاده از کاتیون‌های مونوآمونیم و دی‌آمونیم گزارش شده است که افزون بر کاهش نقص‌های سطحی، با توجه به ویژگی آبریز زنجیر آلکیل‌آمونیم منجر به بهبود پایداری دستگاه می‌شود [۲۰، ۲۱]. یک رویکرد مکمل

## ۱- مقدمه

پروسکایت‌ها به‌دلیل ویژگی‌های اپتوالکترونیک خویشان از جمله ضریب جذب بالا، انتقال بار مناسب و گاف انرژی قابل تنظیم، توجه زیادی را به خود جذب کرده‌اند [۱-۳]. این مواد با گاف انرژی مناسب برای جذب نور خورشید، کاندید عالی برای تشکیل سلول‌های خورشیدی در نظر گرفته شده‌اند. گسترده‌ترین نوع پروسکایت مطالعه‌شده پروسکایت متیل‌آمونیم سرب یدید  $(\text{MAPbI}_3)$  براساس ساختار  $\text{AMX}_3$  سه‌بعدی است که A نشان‌دهنده کاتیون آلی یا معدنی تک ظرفیتی مانند متیل‌آمونیم، فرم‌آمیدینیوم یا سزیم است و M یک کاتیون فلزی دوظرفیتی مانند سرب یا قلع است و X یک هالید مانند کلر، برم یا ید است [۴-۷]. لایه‌های نازک پروسکایت در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی بازده بالا، هنوز حاوی نقص‌هایی به‌ویژه در سطح

موادی که برای ساخت سلول‌های خورشیدی مورد استفاده قرار گرفتند عبارتند از: شیشه رسانای Fluorine-doped Tin Oxide (FTO) با مقاومت ۱۵ اهم، حلال‌های اتانول، ایزوپروپانول، دی‌متیل‌فرمامید و دی‌متیل‌سولفوکسید از شرکت مرک (Merck, 99.99%)، تیتانیم ایزوپروپوکسید (۹۸٪) از شرکت کیمیا اکسیر، پودر CsI و خمیر نانو ساختار تیتانیم دی‌اکسید (۲۰ نانومتر) از شرکت شریف سولار، پودر PbI<sub>2</sub> و پودرهای CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>Cl، CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>Br و HC(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>I به عنوان کاتیون‌های سه‌بعدی از شرکت ایده‌فناوران بیتا تک آروین (یزد، ایران) و پودر فنیل‌تری‌متیل‌آمونیم یدید (PTAI, 99%) (Alfa Aesar) به عنوان کاتیون دوجبه‌ای استفاده شده است.

## ۲-۲- روش ساخت سلول‌های خورشیدی

برای ساخت سلول‌های خورشیدی پروسکایتی بدون لایه انتقال‌دهنده حفره، ابتدا بخشی از لایه رسانا FTO با استفاده از پودر روی و هیدروکلریک اسید لایه‌برداری شد. مراحل شستشو به ترتیب با آب و صابون، آب مقطر، استون و اتانول تحت اولتراسونیک انجام شد و زیرلایه به مدت ۱۵ دقیقه در آن با دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد قرار گرفت تا خشک شود. سپس لایه سدکننده حفره با سرعت چرخش ۴۰۰۰ دور بر دقیقه لایه‌نشانی شد و به مدت یک ساعت در دمای ۵۰۰ درجه سانتی‌گراد پخت داده شد. پس از آن، لایه نانومتخلخل تیتانیم‌دی‌اکسید نیز با سرعت چرخش ۴۰۰۰ دور بر دقیقه لایه‌نشانی شد و به مدت یک ساعت تا دمای ۵۰۰ درجه سانتی‌گراد پخت داده شد. سپس فرآیند تشکیل پروسکایت‌های چند لایه‌ای به روش زیر انجام شد.

### ۱-۲-۲- تشکیل پروسکایت دوجبه‌ای / سه‌بعدی

ابتدا محلول PbI<sub>2</sub> حاوی CsPbI<sub>3</sub> بر لایه نانومتخلخل تیتانیم‌دی‌اکسید با سرعت ۱۵۰۰ دور بر دقیقه لایه‌نشانی شد و به مدت یک دقیقه در دمای ۷۰ درجه سانتی‌گراد پخت داده شد. سپس، محلول ۱/۵ میلی‌گرم فنیل‌تری‌متیل‌آمونیم یدید در یک میلی‌لیتر حلال ایزوپروپانول به روش چرخشی لایه‌نشانی و به مدت ۲ دقیقه در دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد پخت داده شد.

شامل استفاده از دو لایه‌های دوجبه‌ای - سه‌بعدی است، که دارای بازده بالای مربوط به پروسکایت‌های سه‌بعدی و همزمان پایداری و ویژگی‌های اصلاح سطح پروسکایت‌های دوجبه‌ای است [۲۲]. تحقیقات اخیر نشان می‌دهد که وضعیت لایه‌های رابط در سلول خورشیدی پروسکایتی، عامل اصلی در بهبود پایداری و عملکرد مؤثر دستگاه است [۲۳-۲۶]. بنابراین برای افزایش بازده و پایداری سلول‌های خورشیدی پروسکایتی، مهندسی رابط‌های مختلف (به‌عنوان مثال رابط بین لایه انتقال‌دهنده الکترون و پروسکایت، رابط بین لایه پروسکایت و لایه انتقال‌دهنده حفره) ضروری است که در کارهای مختلف توسعه یافته است [۲۷-۳۱]. پروسکایت‌های دوجبه‌ای تحت شرایط سخت رطوبت و دمای بالا، مقاوم و برای مهندسی رابط جذاب هستند.

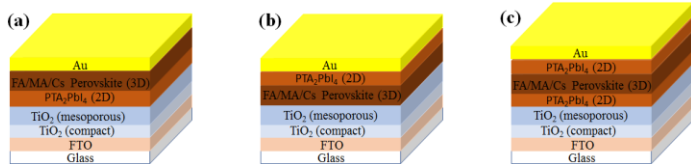
در این پژوهش، کاتیون‌های فنیل‌تری‌متیل‌آمونیم یدید (PTAI) برای تشکیل پروسکایت دوجبه‌ای PTA<sub>2</sub>PbI<sub>4</sub> بین لایه پروسکایت سه‌بعدی و لایه‌های انتقال‌دهنده بار استفاده شد. ابتدا، پروسکایت دوجبه‌ای بین لایه انتقال‌دهنده الکترون (TiO<sub>2</sub>) و پروسکایت سه‌بعدی به روش لایه‌نشانی چرخشی دو مرحله‌ای لایه‌نشانی شد. سپس، پروسکایت دوجبه‌ای بر روی پروسکایت سه‌بعدی لایه‌نشانی شد. این منجر به تغییر ریخت‌شناسی لایه پروسکایت و کاهش دام‌های سطح شده است. همچنین کاتیون‌های فنیل‌تری‌متیل‌آمونیم (PTA) منجر به افزایش آبگریزی سطح لایه پروسکایت و مهار نفوذ رطوبت می‌شود. نهایتاً سلول‌های خورشیدی با پروسکایت‌های دوجبه‌ای/سه‌بعدی/دوجبه‌ای ساخته شد. نتایج نشان داد، سلول‌های خورشیدی پروسکایتی اصلاح‌شده با فنیل‌تری‌متیل‌آمونیم یدید، ۹۸٪ از بازده اولیه خود را به مدت ۲۴۰ روز تحت شرایط محیطی حفظ کردند. بنابراین، این کار توانایی امیدوارکننده پروسکایت دوجبه‌ای PTA<sub>2</sub>PbI<sub>4</sub> به‌عنوان رابط مؤثر برای تحقق سلول‌های خورشیدی پروسکایتی کارآمد و پایدار در آینده را نشان می‌دهد.

## ۲- بخش تجربی

### ۱-۲- مواد مورد نیاز

## ۳- بحث و نتایج

سلول‌های خورشیدی نانو متخلخل پروسکایتی چندلایه‌ای از جمله: (a) دوبعدی / سه‌بعدی، (b) سه‌بعدی / دوبعدی و (c) دوبعدی / سه‌بعدی مطابق با شکل ۱ ساخته شدند.



شکل ۱: طرح ساختار لایه‌های تشکیل‌دهنده سلول‌های خورشیدی پروسکایتی (a) دوبعدی / سه‌بعدی، (b) سه‌بعدی / دوبعدی و (c) دوبعدی / سه‌بعدی.

طیف‌های پراش پرتو ایکس (XRD) برای تخمین ساختارهای کریستالی پروسکایت‌ها مورد بررسی قرار گرفتند. الگوهای XRD، قله‌های پراش متمایز در تقریباً  $14^\circ$ ،  $24/2^\circ$ ،  $28^\circ$ ،  $31/5^\circ$ ،  $40/3^\circ$  و  $43^\circ$  را نشان می‌دهد که بیان‌کننده حضور فاز پروسکایت سه‌بعدی سه کاتیونی با ساختار کریستالی ارتورومبیک است. همچنین، قله‌های آشکار شده در  $12/5^\circ$  و  $38/4^\circ$  مرتبط به فاز  $PbI_2$  است [۳۲].

شکل ۲، تفاوت‌ها بین لایه‌های پروسکایت چندلایه‌ای را نشان می‌دهد. به‌طور ویژه، شدت قله  $PbI_2$  در پروسکایت سه‌بعدی / دوبعدی بیشتر است، در حالی که شدت قله پروسکایت سه‌بعدی در تقریباً  $14^\circ$  در پروسکایت‌های دوبعدی / سه‌بعدی و دوبعدی / سه‌بعدی افزایش یافته که نشان‌دهنده افزایش بلورینگی پروسکایت سه‌بعدی است.

افزون بر این، یک قله در تقریباً  $7^\circ$  در هر سه حالت مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده تشکیل پروسکایت دوبعدی است. همان‌طور که انتظار می‌رود در پروسکایت دوبعدی / سه‌بعدی / دوبعدی شدت این قله افزایش یافته است. همچنین، یک قله کوچک در تقریباً  $8/3^\circ$  در پروسکایت دوبعدی / سه‌بعدی / دوبعدی آشکار می‌شود که احتمالاً مرتبط به پسماند فنیل‌تری‌متیل‌آمونیم دیدید است [۳۳]. در شکل ۲، نمادهای \*، ♦، ■ و ● به ترتیب نشان‌دهنده پروسکایت FA/MA/Cs سه‌بعدی، فاز  $PbI_2$  پروسکایت  $PTA_2PbI_4$  دوبعدی و پسماند PTAI است.

پس از آن محلول (FAI/MABr/MACl)  $HC(NH_2)_2I/CH_3NH_3Br/CH_3NH_3Cl$  در ایزوپروپانول با سرعت چرخش  $1300$  دور بر دقیقه به مدت  $30$  ثانیه لایه‌نشانی شد و به مدت  $15$  دقیقه در دمای  $150$  درجه سانتی‌گراد پخت داده شد (شکل ۱ (a)).

## ۲-۲-۲- تشکیل پروسکایت سه‌بعدی / دوبعدی

ابتدا پروسکایت سه‌بعدی سه کاتیونی  $HC(NH_2)_2/CH_3NH_3/Cs$  به روش دو مرحله‌ای چرخشی ترتیبی لایه‌نشانی شد و به مدت  $15$  دقیقه در دمای  $150$  درجه سانتی‌گراد پخت داده شد [۳۲]. سپس برای تشکیل پروسکایت دوبعدی بر پروسکایت سه‌بعدی،  $1/5$  میلی‌گرم فنیل‌تری‌متیل‌آمونیم دیدید در یک میلی‌لیتر حلال ایزوپروپانول حل شد و با سرعت چرخش  $1300$  دور بر دقیقه به مدت  $30$  ثانیه بر پروسکایت سه‌بعدی لایه‌نشانی شد و به مدت  $5$  دقیقه در دمای  $150$  درجه سانتی‌گراد پخت داده شد (شکل ۱ (b)).

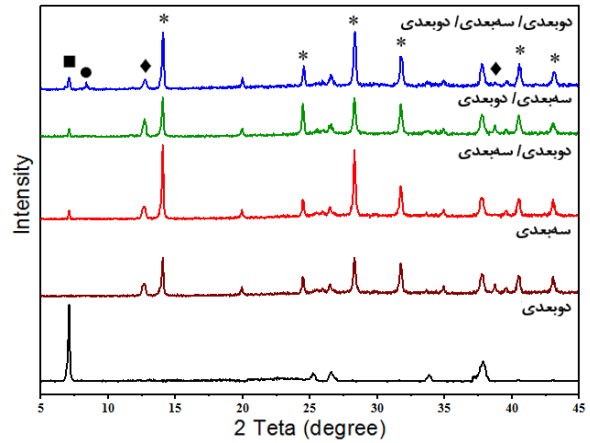
## ۳-۲-۲- تشکیل پروسکایت دوبعدی / سه‌بعدی / دوبعدی

ابتدا، محلول  $PbI_2$  حاوی  $CsPbI_3$  بر روی لایه نانو متخلخل تیتانیم‌دی‌اکسید با سرعت  $1500$  دور بر دقیقه لایه‌نشانی شد و به مدت یک دقیقه در دمای  $70$  درجه سانتی‌گراد پخت داده شد. سپس، محلول فنیل‌تری‌متیل‌آمونیم دیدید به روش چرخشی لایه‌نشانی و به مدت  $2$  دقیقه در دمای  $100$  درجه سانتی‌گراد پخت داده شد. پس از آن محلول (FAI/MABr/MACl) با سرعت چرخش  $1300$  دور بر دقیقه به مدت  $30$  ثانیه لایه‌نشانی شد و به مدت  $15$  دقیقه در دمای  $150$  درجه سانتی‌گراد پخت داده شد. سپس، برای تشکیل پروسکایت دوبعدی بر روی پروسکایت سه‌بعدی، محلول فنیل‌تری‌متیل‌آمونیم دیدید در ایزوپروپانول با سرعت چرخش  $1300$  دور بر دقیقه به مدت  $30$  ثانیه بر روی پروسکایت سه‌بعدی لایه‌نشانی شد و به مدت  $5$  دقیقه در دمای  $150$  درجه سانتی‌گراد پخت داده شد (شکل ۱ (c)).

در مرحله آخر،  $60$  نانومتر طلا با دستگاه کندوپاش به‌عنوان الکتروُد مقابل لایه‌نشانی شد.

با توجه به لبه جذب طیف UV-vis از پروسکایت دوبعدی در شکل ۳، محاسبه می‌شود که گاف انرژی لایه دوبعدی تقریباً ۲/۵۶ eV است.

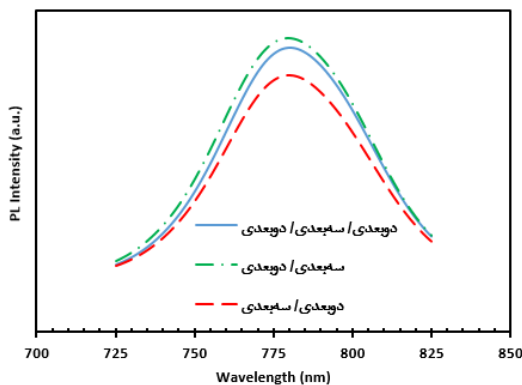
برای بررسی عمیق بازترکیبی حامل‌های بار در لایه‌های پروسکایت، طیف فوتولومینسانس از لایه‌های پروسکایت لایه‌نشانی شده بر روی شیشه با استفاده از لیزر با طول موج ۴۵۰ نانومتر اندازه‌گیری شد. همان‌طور که در شکل ۴ نشان داده شده، پروسکایت‌های سه‌بعدی/دوبعدی و دوبعدی/سه‌بعدی/دوبعدی به ترتیب انتشار فوتولومینسانس قوی‌تری نسبت به پروسکایت دوبعدی/سه‌بعدی دارند. شدت فوتولومینسانس افزایش یافته نشان می‌دهد که در این حالت‌ها، اصلاح PTAI منجر به بهبود نقص‌ها در لایه پروسکایت شده و بازترکیبی غیر تابشی سطح سرکوب شده است. این نتیجه نشان می‌دهد که به دام افتادن بار در پروسکایت‌های سه‌بعدی/دوبعدی و دوبعدی/سه‌بعدی/دوبعدی به ترتیب کمتر از پروسکایت دوبعدی/سه‌بعدی است، که می‌تواند به کاهش تعداد نقص‌های سطح نسبت داده شود.



شکل ۲: طیف‌های پراش پرتو ایکس از پروسکایت‌های چندلایه‌ای. نمادهای \*، ● و ◆ به ترتیب نشان‌دهنده پروسکایت FA/MA/Cs سه‌بعدی، فاز  $PbI_2$ ، پروسکایت  $PTA_2PbI_4$  دوبعدی و پسماند PTAI است.

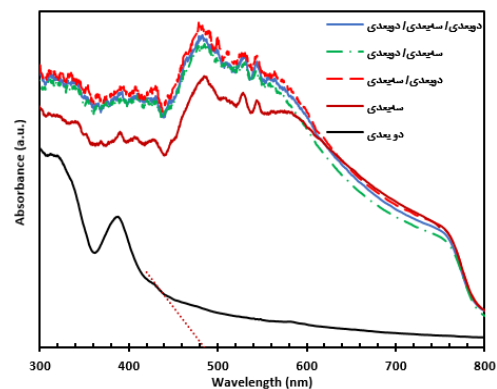
اندازه دانه پروسکایت سه‌بعدی محاسبه شده از نتایج XRD در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی سه‌بعدی، دوبعدی/سه‌بعدی، سه‌بعدی/دوبعدی و دوبعدی/سه‌بعدی/دوبعدی به ترتیب ۴۶۰، ۴۸۰، ۴۶۰ و ۴۸۸ است که نشان‌دهنده افزایش اندازه دانه پروسکایت سه‌بعدی رشد یافته بر روی پروسکایت دوبعدی است. همچنین، کرنش ساختار به ترتیب ۰/۳۲۶، ۰/۳۱۸، ۰/۳۲۴ و ۰/۳۰۰ است که نشان می‌دهد، سلول خورشیدی پروسکایتی دوبعدی/سه‌بعدی/دوبعدی کمترین کرنش ساختار را دارد.

طیف جذب UV-vis از پروسکایت‌های چندلایه‌ای در شکل ۳، نشان می‌دهد که در هر سه حالت تقریباً میزان جذب نور یکسان است و افزایش ناچیز جذب در پروسکایت‌های دوبعدی/سه‌بعدی و دوبعدی/سه‌بعدی/دوبعدی احتمالاً مرتبط به افزایش بلورینگی پروسکایت سه‌بعدی مطابق با طیف XRD در شکل ۲ است.

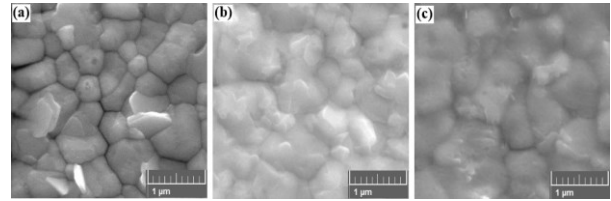


شکل ۴: طیف فوتولومینسانس از لایه‌های پروسکایت لایه‌نشانی شده روی شیشه.

با توجه به تصاویر FE-SEM از سطح پروسکایت در شکل ۵ مشاهده می‌شود که سطح پروسکایت سه‌بعدی/دوبعدی یکنواخت‌تر است. در حالی که سطح پروسکایت دوبعدی/سه‌بعدی غیریکنواخت و با تخلخل‌های بیشتر بین کریستال‌های پروسکایت است. بنظر می‌رسد این نقص‌های سطحی منجر به بازترکیب و کاهش چگالی جریان می‌شود. این تصاویر در واقع حمایت‌کننده شکل ۴ است.



شکل ۳: طیف جذب UV-vis از لایه‌های پروسکایت لایه‌نشانی شده روی Glass/FTO/TiO<sub>2</sub>.



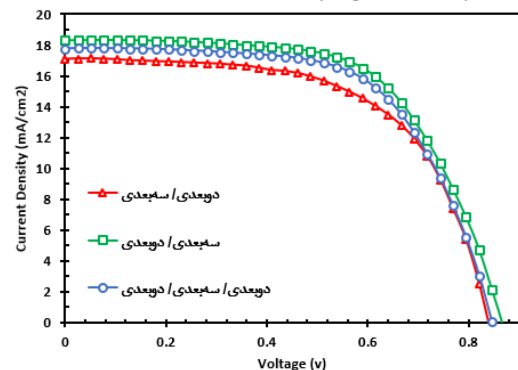
شکل ۵: تصاویر FE-SEM از سطح پروسکایت (a) دوبعدی / سه بعدی، (b) سه بعدی / دوبعدی و (c) دوبعدی / سه بعدی / دوبعدی.

جدول ۱، مشخصه‌های فوتوولتایی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی بدون لایه انتقال‌دهنده حفره و شکل ۶ نمودارهای چگالی جریان-ولتاژ متناظرشان را نشان می‌دهد.

جدول ۱: مشخصه‌های فوتوولتایی سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دوبعدی / سه بعدی، سه بعدی / دوبعدی و دوبعدی / سه بعدی بدون لایه انتقال‌دهنده حفره.

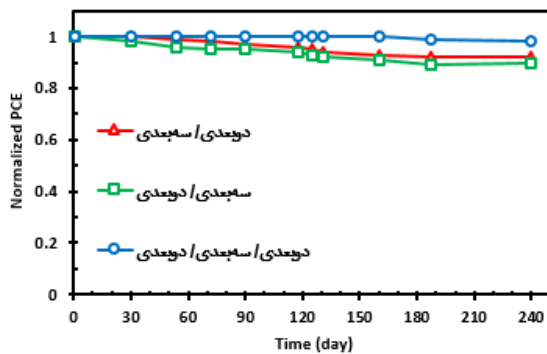
Solar Cells	Voc (v)	Jsc (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	PCE (%)	Rs (Ω cm <sup>2</sup> )	Rsh (Ω cm <sup>2</sup> )
دوبعدی/سه بعدی	0.83 ± 0.02	17.08 ± 0.29	60.7 ± 0.2	8.63 ± 0.29	1.1 ± 0.4	1369 ± 61
سه بعدی/دوبعدی	0.86 ± 0.02	18.30 ± 0.28	62.4 ± 0.2	9.81 ± 0.28	7.8 ± 0.3	7261 ± 57
دوبعدی/سه بعدی/دوبعدی	0.86 ± 0.03	17.78 ± 0.31	61.3 ± 0.3	9.37 ± 0.31	7.9 ± 0.3	7257 ± 59

افزایش ولتاژ مدار باز (Voc) در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی سه بعدی / دوبعدی و دوبعدی / سه بعدی / دوبعدی می‌تواند مرتبط با کاهش تعداد دام‌های لایه پروسکایت باشد. همچنین، بهبود چگالی جریان اتصال کوتاه (Jsc) و ضریب پرشدگی (FF) در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی سه بعدی / دوبعدی و دوبعدی / سه بعدی / دوبعدی نسبت به سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دوبعدی / سه بعدی نشان‌دهنده کاهش بازترکیبی بار است. بنابراین مشاهده می‌شود که کاهش تعداد دام‌ها و نقص‌های لایه پروسکایت منجر به کاهش بازترکیبی بار و در نتیجه افزایش بازده سلول‌های خورشیدی می‌شود.



شکل ۶: نمودار چگالی جریان-ولتاژ سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دوبعدی / سه بعدی، سه بعدی / دوبعدی و دوبعدی / سه بعدی بدون لایه انتقال‌دهنده حفره.

برای بررسی پایداری طولانی مدت سلول‌های خورشیدی در برابر رطوبت، ۱۰ سلول خورشیدی پروسکایتی بدون لایه انتقال‌دهنده حفره از هر کدام را در محیط آزمایشگاه با رطوبت نسبی ۶۰٪-۲۰٪ بدون هیچ‌گونه کپسوله‌سازی در دمای اتاق قرار داده شده‌اند. بعد از ۲۴۰ روز (در فصل‌های بهار، تابستان و پاییز) مشاهده شد که سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دوبعدی / سه بعدی / دوبعدی مقاومت بالاتری در برابر تخریب ناشی از رطوبت داشتند و در این مدت فقط ۲٪ کاهش بازده را تجربه کردند (شکل ۷). در صورتی که سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دوبعدی / سه بعدی و سه بعدی / دوبعدی به ترتیب کاهش بازده ۸٪ و ۱۰٪ را تجربه کردند.



شکل ۷: ارزیابی پایداری سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دوبعدی / سه بعدی، سه بعدی / دوبعدی و دوبعدی / سه بعدی بدون لایه انتقال‌دهنده حفره در محیط با رطوبت نسبی ۶۰٪-۲۰٪ بدون کپسوله‌سازی در دمای اتاق.

## ۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دوبعدی / سه بعدی، سه بعدی / دوبعدی و دوبعدی / سه بعدی / دوبعدی ساخته شدند. سپس به بررسی نقش پروسکایت  $\text{PTA}_2\text{PbI}_4$  دوبعدی در بهبود پایداری و عملکرد سلول‌های خورشیدی پرداختیم. با توجه به طیف‌های XRD مشاهده می‌شود که تشکیل پروسکایت دوبعدی در ابتدا و سپس پروسکایت سه بعدی می‌تواند منجر به افزایش بلورینگی پروسکایت سه بعدی شود. ولی در ساختاری که ابتدا پروسکایت سه بعدی و سپس پروسکایت دوبعدی تشکیل می‌شود، پروسکایت دوبعدی منجر به بهبود ریخت‌شناسی سطح پروسکایت و کاهش بازترکیبی بار می‌شود که این منجر به افزایش چگالی جریان و در نتیجه افزایش بازده می‌شود. بنابراین، در این پژوهش مشاهده می‌شود که کاهش نقص‌های سطحی و در نتیجه کاهش بازترکیبی نسبت به افزایش

[7]. Zhao Y, Zhu K. Organic–inorganic hybrid lead halide perovskites for optoelectronic and electronic applications. *Chemical Society Reviews*. 2016;45(3):655-89.

[8]. Ball JM, Petrozza A. Defects in perovskite-halides and their effects in solar cells. *Nature Energy*. 2016;1(11):1-13.

[9]. Wang J, Fu W, Jariwala S, Sinha I, Jen AK-Y, Ginger DS. Reducing surface recombination velocities at the electrical contacts will improve perovskite photovoltaics. *ACS Energy Letters*. 2018;4(1):222-7.

[10]. Chen Q, Zhou H, Song T-B, Luo S, Hong Z, Duan H-S, et al. Controllable self-induced passivation of hybrid lead iodide perovskites toward high performance solar cells. *Nano letters*. 2014;14(7):4158-63.

[11]. Qiu W, Merckx T, Jaysankar M, De La Huerta CM, Rakocevic L, Zhang W, et al. Pinhole-free perovskite films for efficient solar modules. *Energy & Environmental Science*. 2016;9(2):484-9.

[12]. Wang L, McCleese C, Kovalsky A, Zhao Y, Burda C. Femtosecond time-resolved transient absorption spectroscopy of CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> perovskite films: evidence for passivation effect of PbI<sub>2</sub>. *Journal of the American Chemical Society*. 2014;136(35):12205-8.

[13]. Abdi-Jalebi M, Andaji-Garmaroudi Z, Cacovich S, Stavrakas C, Philippe B, Richter JM, et al. Maximizing and stabilizing luminescence from halide perovskites with potassium passivation. *Nature*. 2018;555(7697):497-501.

[14]. Li N, Tao S, Chen Y, Niu X, Onwudinanti CK, Hu C, et al. Cation and anion immobilization through chemical bonding enhancement with fluorides for stable halide perovskite solar cells. *Nature energy*. 2019;4(5):408-15.

[15]. Saliba M, Matsui T, Domanski K, Seo J-Y, Ummadisingu A, Zakeeruddin SM, et al. Incorporation of rubidium cations into perovskite solar cells improves photovoltaic performance. *Science*. 2016;354(6309):206-9.

[16]. Liang PW, Chueh CC, Williams ST, Jen AKY. Roles of fullerene-based interlayers in enhancing the performance of organometal perovskite thin-film solar cells. *Advanced Energy Materials*. 2015;5(10):1402321.

[17]. Shao Y, Xiao Z, Bi C, Yuan Y, Huang J. Origin and elimination of photocurrent hysteresis

بلورینگی پروسکایت، نقش موثرتری در بهبود بازده دارد. ولی در بررسی پایداری سلول‌های خورشیدی مشاهده شد که سلول‌های خورشیدی پروسکایتی دوبعدی / سه‌بعدی / دوبعدی و دوبعدی / سه‌بعدی به ترتیب نسبت به سلول‌های خورشیدی پروسکایتی سه‌بعدی / دوبعدی از مقاومت بالاتری در برابر رطوبت برخوردارند. این نتایج نشان می‌دهد که محافظت پروسکایت سه‌بعدی در برابر تخریب ناشی از نفوذ رطوبت از طرف تیتانیوم‌دی‌اکسید از اهمیت بیشتری برخوردار است و با لایه‌نشانی پروسکایت دو بعدی در دو طرف پروسکایت سه‌بعدی، تخریب را به حداقل رسانده است.

### تشکر و قدردانی

نویسندگان از حمایت مالی بنیاد ملی علم ایران (صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور) (INSF-4004830) تشکر می‌کنند.

### مراجع

[1]. Brenner TM, Egger DA, Kronik L, Hodes G, Cahen D. Hybrid organic–inorganic perovskites: low-cost semiconductors with intriguing charge-transport properties. *Nature Reviews Materials*. 2016;1(1):1-16.

[2]. Huang J, Yuan Y, Shao Y, Yan Y. Understanding the physical properties of hybrid perovskites for photovoltaic applications. *Nature Reviews Materials*. 2017;2(7):1-19.

[3]. Li W, Wang Z, Deschler F, Gao S, Friend RH, Cheetham AK. Chemically diverse and multifunctional hybrid organic–inorganic perovskites. *Nature Reviews Materials*. 2017;2(3):1-18.

[4]. Saliba M. Polyelemental, multicomponent perovskite semiconductor libraries through combinatorial screening. *Advanced Energy Materials*. 2019;9(25):1803754.

[5]. Stoumpos CC, Kanatzidis MG. Halide Perovskites: poor Man's high-performance semiconductors. *Advanced Materials*. 2016;28(28):5778-93.

[6]. Zhao D, Yu Y, Wang C, Liao W, Shrestha N, Grice CR, et al. Low-bandgap mixed tin–lead iodide perovskite absorbers with long carrier lifetimes for all-perovskite tandem solar cells. *Nature Energy*. 2017;2(4):1-7.

- dopant? *Angewandte Chemie*. 2019;131(46):16844-9.
- [29]. Wang Y, Zhang T, Kan M, Zhao Y. Bifunctional stabilization of all-inorganic  $\alpha$ -CsPbI<sub>3</sub> perovskite for 17% efficiency photovoltaics. *Journal of the American Chemical Society*. 2018;140(39):12345-8.
- [30]. Ye Q, Zhao Y, Mu S, Ma F, Gao F, Chu Z, et al. Cesium lead inorganic solar cell with efficiency beyond 18% via reduced charge recombination. *Advanced materials*. 2019;31(49):1905143.
- [31]. Zhang J, Hodes G, Jin Z, Liu S. All-inorganic CsPbX<sub>3</sub> perovskite solar cells: progress and prospects. *Angewandte Chemie International Edition*. 2019;58(44):15596-618.
- [32]. Wang S, Jin J, Qi Y, Liu P, Xia Y, Jiang Y, et al.  $\delta$ -CsPbI<sub>3</sub> intermediate phase growth assisted sequential deposition boosts stable and high-efficiency triple cation perovskite solar cells. *Advanced Functional Materials*. 2020;30(7):1908343.
- [33]. Wang X, Wang Y, Zhang T, Liu X, Zhao Y. Steric mixed-cation 2D perovskite as a methylammonium locker to stabilize MAPbI<sub>3</sub>. *Angewandte Chemie International Edition*. 2020;59(4):1469-73.
- by fullerene passivation in CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> planar heterojunction solar cells. *Nature communications*. 2014;5(1):5784.
- [18]. Wang K, Neophytou M, Aydin E, Wang M, Laurent T, Harrison GT, et al. Triarylphosphine oxide as cathode interfacial material for inverted perovskite solar cells. *Advanced Materials Interfaces*. 2019;6(12):1900434.
- [19]. Wang Q, Dong Q, Li T, Gruverman A, Huang J. Thin insulating tunneling contacts for efficient and water-resistant perovskite solar cells. *Advanced Materials*. 2016;28(31):6734-9.
- [20]. Zhao T, Chueh C-C, Chen Q, Rajagopal A, Jen AK-Y. Defect passivation of organic-inorganic hybrid perovskites by diammonium iodide toward high-performance photovoltaic devices. *ACS Energy Letters*. 2016;1(4):757-63.
- [21]. Zheng X, Chen B, Dai J, Fang Y, Bai Y, Lin Y, et al. Defect passivation in hybrid perovskite solar cells using quaternary ammonium halide anions and cations. *Nature Energy*. 2017;2(7):1-9.
- [22]. Grancini G, Nazeeruddin MK. Dimensional tailoring of hybrid perovskites for photovoltaics. *Nature Reviews Materials*. 2019;4(1):4-22.
23. Bi S, Leng X, Li Y, Zheng Z, Zhang X, Zhang Y, et al. Interfacial modification in organic and perovskite solar cells. *Advanced Materials*. 2019;31(45):1805708.
- [24]. Chen W, Li X, Li Y, Li Y. A review: crystal growth for high-performance all-inorganic perovskite solar cells. *Energy & Environmental Science*. 2020;13(7):1971-96.
- [25]. Han TH, Tan S, Xue J, Meng L, Lee JW, Yang Y. Interface and defect engineering for metal halide perovskite optoelectronic devices. *Advanced Materials*. 2019;31(47):1803515.
- [26]. Rajagopal A, Yao K, Jen AKY. Toward perovskite solar cell commercialization: a perspective and research roadmap based on interfacial engineering. *Advanced Materials*. 2018;30(32):1800455.
- [27]. Wang Y, Dar MI, Ono LK, Zhang T, Kan M, Li Y, et al. Thermodynamically stabilized  $\beta$ -CsPbI<sub>3</sub>-based perovskite solar cells with efficiencies > 18%. *Science*. 2019;365(6453):591-5.
- [28]. Wang Y, Liu X, Zhang T, Wang X, Kan M, Shi J, et al. The role of dimethylammonium iodide in CsPbI<sub>3</sub> perovskite fabrication: additive or



## The role of 2D perovskite in improving the stability and performance of hole transporting layer-free perovskite solar cells

M. Mozaffari, A. Behjat\*, M.A. Haddad, A. Benvidi

Faculty of Physics, Yazd University, Yazd, Iran.

**Abstract:** Considering the importance of the stability of solar cells in their industrialization, 2D perovskites in the interface between 3D perovskite and charge transfer layers play a key role in improving the stability of perovskite solar cells. In this research, 3D triple-cation perovskite and 2D PTA<sub>2</sub>PbI<sub>4</sub> perovskite have been used as light absorbing materials in fabricated solar cells. Considering the penetration of moisture from all sides of the perovskite layer, we investigated 3D/2D, 2D/3D and 2D/3D/2D perovskite structures. Experimental results show that the formation of 2D perovskite above the 3D perovskite (2D/3D) in addition to protecting the 3D perovskite layer against moisture, leads to the improvement of the morphology of the perovskite layer. The formation of 2D perovskite under the 3D perovskite (3D/2D) is effective in improving the crystallinity of 3D perovskite. 2D/3D perovskite solar have 9.81 efficiency cells due to the improvement of surface defects and reduction of charge recombination. Besides, 2D/3D/2D perovskite solar cells by improving the crystallinity of 3D perovskite and the double protection of 3D perovskite by 2D perovskite, maintained 98% of the initial efficiency for 240 days.

**Keywords:** Solar cell, 2D/3D/2D perovskite, Phenyl trimethylammonium iodide, Stability