



Original Article

# Changing the Antisolvent and Its Effect on the Structural and Optical Properties of the Perovskite Layer in Mesoporous Perovskite Solar Cells

Naser Jahanbakhshi Zadeh<sup>1\*</sup>, Mahmood Borhani Zarandi<sup>2</sup>, Bita Nakhaei<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Semiconductor, Institute of Science and High Technology and Environmental Sciences, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran.

<sup>2</sup>Department of Physics, Yazd University, Yazd, Iran.

Received: Jun 26, 2025

Revised: Jul 06, 2025

Accepted: Jul 24, 2025

**Abstract:** In this paper, by choosing chlorobenzene (CB) and diethyl ether (DEE) as antisolvents, the effect of changing the antisolvent on the morphology, optical and structural properties of  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  perovskite and the performance of perovskite solar cell (PSC) with the structure FTO/Compact  $\text{TiO}_2$ /Mesoporous  $\text{TiO}_2$ / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /CuInS<sub>2</sub>/Au was investigated. The direct optical bandgap for the perovskite with CB and DEE antisolvents was calculated 1.579 and 1.595 eV, respectively, and for both samples the indirect optical bandgap was 56 meV lower than the direct bandgap. The Urbach energy for the perovskite with CB and DEE antisolvents was obtained 0.085 and 0.089 eV, respectively, which indicated fewer interband defect states for the sample with CB antisolvent. The parameters of crystallite size, unit cell volume, dislocation density and microstrain for the perovskite with CB antisolvent were obtained 66.53 nm, 1083.249 Å<sup>3</sup>,  $2.25 \times 10^{-4}$  and  $2.69 \times 10^{-3}$ , respectively, which compared to the values of these parameters in the sample with DEE antisolvent (63.59 nm, 1083.684 Å<sup>3</sup>,  $2.47 \times 10^{-4}$  and  $2.84 \times 10^{-3}$ , respectively), indicating higher quality and fewer lattice defects. Finally, PSC with CB antisolvent showed an efficiency of 10.89%, which was about 19% higher than the efficiency of PSC with DEE antisolvent (9.16%). The results of this research can be used in the optical and structural optimization of the perovskite layer to manufacture efficient perovskite solar cells.

**Keywords:** Antisolvent, Perovskite, Solar Cell, Structural and Optical Properties

\*Corresponding Author: [n\\_jahanbakhshi@yahoo.com](mailto:n_jahanbakhshi@yahoo.com)

## How to Cite This Article:

Jahanbakhshi Zadeh, N., Borhani Zarandi, M., Nakhaei, B., Changing the Antisolvent and Its Effect on the Structural and Optical Properties of the Perovskite Layer in Mesoporous Perovskite Solar Cells. *Nanomeghyas*. 2025;12(1): 25-34.

DOI: [10.22034/ns.2025.2064098.1393](https://doi.org/10.22034/ns.2025.2064098.1393)





# تغییر ضد حلال و اثر آن بر خواص ساختاری و اپتیکی لایه پروسکایت در سلولهای خورشیدی پروسکایتی مزومتخلخل

ناصر جهان بخشی زاده<sup>۱\*</sup>، محمود برهانی زرنندی<sup>۲</sup>، بیتا نخعی<sup>۲</sup>

۱- گروه نیمه هادی ها، پژوهشگاه علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران  
۲- دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۹/۲۸

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۳/۷/۱۵

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۵/۱۵

**چکیده:** در این مقاله با انتخاب کلروبنزن (CB) و دیاتیلتر (DEE) بعنوان ضدحلال، اثر تغییر ضدحلال بر ریختشناسی، خواص اپتیکی و ساختاری پروسکایت  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  و عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی (PSC) با ساختار  $\text{FTO/Compact TiO}_2/\text{Mesoporous TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{CuInS}_2/\text{Au}$  مورد بررسی قرار گرفت. گاف انرژی مستقیم برای لایه پروسکایت با ضد حلالهای CB و DEE به ترتیب  $1.579 \text{ eV}$  و  $1.595 \text{ eV}$  محاسبه شد بطوریکه برای هر دو نمونه گاف انرژی غیرمستقیم به اندازه  $56 \text{ meV}$  از گاف انرژی مستقیم کمتر بود. انرژی اورباخ برای لایه پروسکایت با ضدحلالهای CB و DEE به ترتیب  $0.085 \text{ eV}$  و  $0.089 \text{ eV}$  بدست آمد که نشان دهنده حالتی ناقص بین نواری کمتر برای نمونه با ضدحلال CB بود. پارامترهای ساختاری لایه پروسکایت شامل اندازه بلورک، حجم واحد شبکه، چگالی نابجایی و میکرو کرنش برای پروسکایت با ضدحلال CB به ترتیب  $66/53 \text{ nm}$ ،  $1.083/249 \text{ \AA}^3$ ،  $2/25 \times 10^{-3}$  و  $10^{-3} \times 2/69$  بدست آمد که در مقایسه با مقادیر این پارامترها در نمونه با ضدحلال DEE (به ترتیب  $63/59 \text{ nm}$ ،  $1.083/684 \text{ \AA}^3$ ،  $2/47 \times 10^{-3}$  و  $2/84 \times 10^{-3}$ )، نشان دهنده کیفیت بیشتر و نقصهای شبکههای کمتر برای نمونه با ضدحلال CB بود. در نهایت PSC با ضدحلال CB بازدهی  $10/89\%$  را نشان داد که حدود  $19\%$  بیشتر از بازدهی PSC با ضدحلال DEE ( $9/16\%$ ) بود. نتایج این پژوهش میتواند در بهینهسازی اپتیکی و ساختاری لایه پروسکایت برای ساخت سلولهای خورشیدی پروسکایت کارآمد مورد استفاده قرار گیرد.

**واژگان کلیدی:** ضد حلال، پروسکایت، سلول خورشیدی، خواص ساختاری و اپتیکی.

[n\\_jahanbakhshi@yahoo.com](mailto:n_jahanbakhshi@yahoo.com)

**نحوه استناد به این مقاله:**

جهان بخشی زاده، ناصر، برهانی زرنندی، محمود، نخعی، بیتا. تغییر ضد حلال و اثر آن بر خواص ساختاری و اپتیکی لایه پروسکایت در سلولهای خورشیدی پروسکایتی مزومتخلخل. *نانومقیاس*، ۱۲(۱)، ۲۵-۳۴.

DOI: 10.22034/ns.2025.2064098.1393



## ۱- مقدمه

پروسکایت های آلی-معدنی به دلیل دارا بودن خواص منحصر به فردی مانند ضریب جذب بالا، گاف انرژی قابل تنظیم، طول انتشار بالای حامل های بار، انرژی اکسایتون کم و فرآیند تولید مقرون به صرفه در تحقیقات مورد توجه زیادی قرار گرفته اند [۱-۳]. این ویژگی های متمایز، استفاده از این مواد را برای کاربردهای مختلفی مانند لیزر و فتوولتائیک بسیار مناسب می سازد [۴-۹]. در زمینه فوتولتائیک، افزایش قابل توجهی در کارایی سلول های خورشیدی پروسکایتی (PSC) در سال های اخیر ثبت شده است. بازدهی (PCE) این نوع از سلولهای خورشیدی افزایش قابل توجهی را تجربه کرده است و از ۳/۸٪ به مقدار قابل توجه و ثبت شده ۲۶/۱٪ رسیده است [۱۰-۱۲]. ریخت شناسی و یکنواختی لایه پروسکایت به عنوان دو پارامتر حیاتی در بهبود عملکرد PSC ها در نظر گرفته می شوند [۱۳]. یکی از روشهای مناسب برای ساخت لایه پروسکایت با کیفیت بالا، استفاده از ضدحلال در حین فرایند لایه نشانی لایه پروسکایت است [۱۴-۱۶]. سئوک و همکاران برای اولین بار در سال ۲۰۱۴ ضدحلال تولوئن را در فرایند ساخت سلول های خورشیدی لایه نازک پروسکایت مورد استفاده قرار دادند و PSC های با بازدهی قابل توجه ۱۶/۲٪ و حداقل هیستریزس را در محیط آزمایشگاه ایجاد کردند [۱۷]. از آن زمان تاکنون، ضدحلال ها نقشی اساسی در پیشرفت فناوری های مربوط به PSC ها ایفا کرده اند. استفاده از روش مهندسی ضدحلال به عنوان یک استراتژی ساده و کارآمد برای تعدیل فرآیندهای هسته زایی و رشد بلور لایه پروسکایت مورد استفاده قرار می گیرد بطوریکه منجر به ساخت سلول های خورشیدی پروسکایت کارآمد و با کیفیت بالا می شود [۱۸ و ۱۹]. ضدحلال های مختلفی مانند تولوئن، کلروفرم، اتانول، کلروبنزن و دی اتیل اتر برای درک تأثیر آنها بر بلورینگی و ریخت شناسی لایه های نازک پروسکایت مورد مطالعه قرار گرفته اند [۲۰ و ۲۱].

و شرایط محیطی بلورهای پروسکایتی با اندازه های کنترل شده و حداقل چگالی حفره های سطحی را تولید کردند که بازدهی PSC های ساخته شده با آنها ۱۴٪ را نشان داد [۲۰]. لی و همکاران تأثیر ضدحلال های با گشتاورهای دوقطبی و ثابت های دی الکتریک متفاوت را بر روی بلورینگی و پوشش سطح لایه های نازک پروسکایت مورد بررسی قرار دادند، که در نتیجه آن PSC های با ابعاد ۱۱/۲۵ سانتی متر مربع، PCE بالای ۱۱٪ را نشان داد [۲۲]. در مطالعه دیگری، پروخویچ و همکاران اثر غوطه ور کردن لایه های جذب پروسکایت در ضدحلال های با قطبیت های مختلف شامل کلروبنزن و ایزوپروپانول را مورد بررسی قرار دادند [۲۳]. فیلم های پروسکایتی با ضدحلال ایزوپروپانول، ریخت شناسی یکنواخت تری با دانه های بزرگ تر نسبت به فیلم های با ضدحلال کلروبنزن نشان دادند. با این حال، نمونه های با ضدحلال ایزوپروپانول اثر هیستریزس بالاتری را در طول اسکن جریان-ولتاژ از خود نشان دادند [۲۳]. چن و همکاران ضدحلال های مختلفی را برای ایجاد لایه سرب پدید یکنواخت و متخلخل کنترل شده در روش لایه نشانی دو مرحله ای مورد استفاده قرار دادند [۲۴]. یافته های این گروه نشان داد که لایه های پروسکایتی درمان شده با ضدحلال اتانول سطوح صاف و بدون حفره ای را تشکیل می دهند و PSC های بر پایه این ضد حلال بازدهی ۱۶/۸٪ را نشان داد. اکثر تحقیقات انجام شده در مورد مهندسی ضدحلال در جهت بهبود عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی می باشد. این بهبود عملکرد تا حد زیادی تحت تأثیر عوامل متعدد مرتبط با ساختار لایه پروسکایت از جمله اندازه دانه ها، مرزهای دانه ها، چگالی حفره های سطحی و بلورینگی لایه پروسکایت است [۲۰]. کیم و همکاران PSC های معکوس درمان شده با ضدحلال های دی کلرو بنزن با نقطه جوش بالا و کلروفورم با نقطه جوش پایین که در یک محیط کنترل شده ساخته شده اند را گزارش کردند [۲۵]. آنها نشان دادند که لایه پروسکایت ساخته شده با ضدحلال کلروفورم دارای یک سطح فشرده و بدون حفره است و PCE سلول خورشیدی پروسکایتی

## ۲- بخش تجربی

### ۲-۱- مواد و تجهیزات مورد استفاده

**مواد:** تیتانیوم ایزوپروپوکسید ۹۷٪، هیدرویدیک اسید، هیدروکلریک اسید و متیل آمین-شرکت سیگما آلدریج، دی متیل فرمامید (DMF)، دی متیل سولفوکسید (DMSO)، دی اتیل اتر، کلروبنزن و اتانول-شرکت مرک، سرب یدید ( $PbI_2$ )، خمیر دی اکسید تیتانیوم و FTO-شرکت شریف سولار

**تجهیزات مورد استفاده:** دستگاه SEM (TESCANVEGA3)، دستگاه پراش پرتو ایکس (XRD-Bruker, D8 Advance)، دستگاه طیف فوتولومینسانس (PL-Avaspec 2048 TEC)، دستگاه طیف جذب و بازتاب (spectrophotometer LAMBDA 35 UV-Vis-near IR) و دستگاه طیف جذب و لتاژ (Spectrophotometer Keithley 2400, AM 1.5G under 100) دستگاه اندازه گیری جریان-illuminat ion  $mWcm^{-2}$

### ۲-۲- سنتز متیل آمونیوم یدید (MAI)

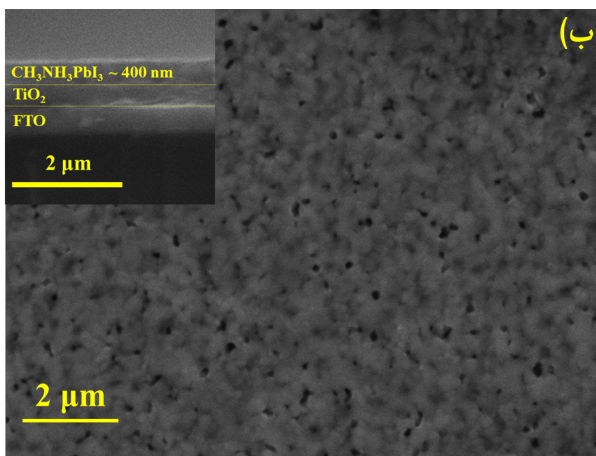
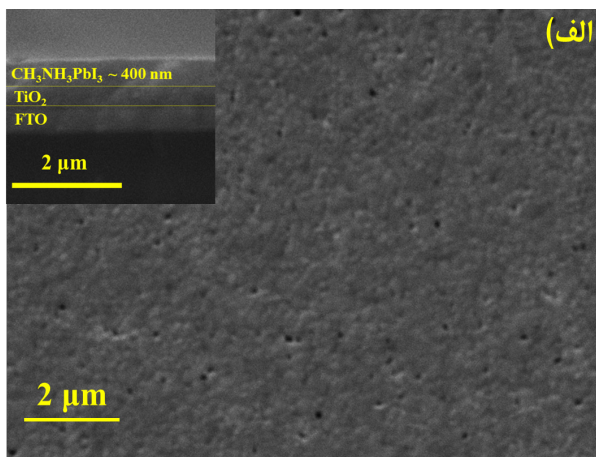
سنتز متیل آمونیوم یدید (MAI) بر اساس روش‌های ذکر شده در مقالات انجام گرفت [۲۶]. در ابتدا ۳۰ mL از متیل آمین (۳۳ %wt در اتانول) و ۲۸ mL هیدرویدیک اسید (HI) در یک بالون در حمام یخ مخلوط شدند. اسید HI به صورت قطره قطره به متیل آمین و حین چرخش اضافه شد. بعد از ۲ ساعت که مخلوط حاصل بر روی همزن مغناطیسی قرار داشت پودر سفید رنگ در ته بالون تولید شد. در ادامه ترکیب حاصل به مدت یک ساعت در دمای  $60^\circ C$  قرار داده شد تا پودر سفید رنگ (MAI) خالص حاصل شود. سپس پودر حاصل را در اتانول حل و با اضافه کردن دی اتیل اتر به آن فرایند ته نشین شدن تکرار شد. بعد

ساخته شده با آن ۱۴٪/۲ بود. در حالی که لایه پروسکایت ساخته شده با ضدحلال دی کلروبنزن دارای ریخت شناسی نامناسب با حفره های سطحی زیاد بود و بازدهی PSC ساخته شده با آن عدد ۸/۱٪ را نشان داد. آنها این تفاوت در عملکرد را به تبخیر ضدحلال پس از فرایند بازپخت نسبت دادند و نتیجه گرفتند که دی کلرو بنزن یک ضد حلال ضعیف برای PSC ها است [۲۵]. با این حال، مشخص نشده است که تغییر ضدحلال چه تاثیری بر ویژگی‌های نوری و ساختاری لایه‌های پروسکایت و در نتیجه عملکرد سلول خورشیدی دارد. بنابراین، بررسی سیستماتیک تأثیر تغییر ضدحلال بر خواص نوری و ساختاری و عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایت می تواند در بهینه سازی اپتیکی و ساختاری لایه پروسکایت جهت استفاده در سلول های خورشیدی پروسکایتی کارآمد مفید باشد. در این پژوهش اثر استفاده از ضد حلال های کلروبنزن و دی اتیل اتر بر خواص ساختاری و اپتیکی لایه پروسکایت متیل آمونیوم سرب یدید ( $CH_3NH_3PbI_3$ ) مقایسه و مورد بررسی قرار گرفت. در ادامه لایه پروسکایت ایجاد شده با این دو ضدحلال در ساخت سلول خورشیدی پروسکایتی مزومتخلخل با ساختار FTO/Compact- $TiO_2$ /Mesoporous- $TiO_2$ / $CH_3NH_3PbI_3$ / $CuInS_2$ /Au استفاده شد و اثر هر کدام از این ضدحلال ها بر پارامترهای فوتولتائیک سلول خورشیدی مورد بررسی قرار گرفت. مشخص شد که PSC ساخته شده با ضد حلال کلروبنزن عملکرد اپتیکی و فوتولتائیکی بهتری نسبت به نمونه ساخته شده با ضد حلال دی اتیل اتر دارد. حداکثر بازدهی PSC ساخته شده با ضد حلال کلروبنزن مقدار ۱۰/۸۹٪ بود که ۱۹٪ درصد افزایش بازدهی را نسبت به بازدهی PSC ساخته شده با ضد حلال دی اتیل اتر نشان می داد. پارامترهای فوتولتائیک چگالی جریان اتصال کوتاه، ولتاژ مدار باز و فاکتور پرشدگی برای PSC ساخته شده با ضد حلال کلروبنزن به ترتیب  $21/49$ ،  $0/86$  V و  $0/60$  و برای PSC ساخته شده با ضد حلال دی اتیل اتر به ترتیب  $18/15$ ،  $0/83$  V و  $0/60$  بدست آمد.

دور بر دقیقه روی لایه  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  پوشش داده و به مدت ۱۰ دقیقه در دمای  $100^\circ\text{C}$  فرایند پخت انجام شد. در نهایت، روی لایه HTL،  $60\text{ nm}$  طلا به عنوان الکتروود مقابل لایه نشانی شد.

### ۳- نتایج و بحث

برای بررسی اثر تغییر ضد حلال بر ریخت شناسی لایه پروسکایت، از مشخصه یابی SEM استفاده شد. همانطور که در شکل ۱ مشاهده می شود، لایه پروسکایت ایجاد شده با ضد حلال کلروبنزن نسبت به نمونه ایجاد شده با ضد حلال دی اتیل اتر دارای سطحی یکنواخت تر با حفره های سطحی کمتر است.



شکل ۱: تصویر SEM از سطح لایه پروسکایت با ضد حلال الف- کلروبنزن و ب- دی اتیل اتر- تصاویر درج شده سطح مقطع مربوط به تصاویر SEM است

از فیلتر کردن، این مرحله چندبار تکرار و در نهایت ترکیب حاصل تحت دمای  $60^\circ\text{C}$  خشک شد تا پودر MAI بدست آید.

### ۳-۲- ساخت سلول خورشیدی پروسکایتی مزومتخلخل

در ابتدا با پودر روی و هیدروکلریک اسید، شیشه های رسانای FTO اچ شده و در حمام اولتراسونیک به ترتیب با آب صابون، آب دیونیزه، استون، آب دیونیزه، اتانول و ایزوپروپانول و هر مرحله به مدت ۱۵ دقیقه شستشو داده و سپس در دستگاه آون در دمای  $100^\circ\text{C}$  به مدت ۲۰ دقیقه خشک شدند. برای ایجاد لایه  $\text{TiO}_2$  فشرده ( $\text{Compact-TiO}_2$ )، محلولی از تیتانیوم ایزوپروپوکسید در هیدروکلریک اسید ۲ مولار و اتانول با سرعت  $4000$  دور بر دقیقه به مدت ۶۰ ثانیه لایه نشانی و در دمای  $100^\circ\text{C}$  به مدت ۱۰ دقیقه در آون خشک و در دمای  $500^\circ\text{C}$  به مدت ۶۰ دقیقه پخت داده شد. لایه  $\text{TiO}_2$  مزومتخلخل (Mesoporous- $\text{TiO}_2$ ) حاوی خمیر  $\text{TiO}_2$  با نانوذرات  $20\text{ nm}$  و اتانول بر روی بستر Compact- $\text{TiO}_2/\text{FTO}$  با سرعت  $4000$  دور بر دقیقه به مدت ۶۰ ثانیه پوشش داده شد. نمونه ها در دمای  $100^\circ\text{C}$  به مدت ۱۰ دقیقه در آون خشک و سپس در دمای  $500^\circ\text{C}$  به مدت ۶۰ دقیقه پخت شدند. برای لایه نشانی لایه پروسکایت  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ،  $40\ \mu\text{l}$  از محلول  $35\text{ mmol/l}$  / سرب یدید و MAI در حلال های DMF و DMSO با سرعت  $3000$  دور بر دقیقه به مدت ۳۰ ثانیه بر روی لایه ها پوشش داده شد. برای بررسی اثر نوع ضد حلال بر خواص الکترواپتیکی لایه پروسکایت،  $150\ \mu\text{l}$  از هر کدام از ضد حلال های کلروبنزن و دی اتیل اتر در حین فرایند لایه نشانی لایه پروسکایت، روی فیلم  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  ریخته شد. سپس لایه های FTO/ Compact- $\text{TiO}_2/\text{Mesoporous-TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  به مدت ۳۰ دقیقه در دمای  $100^\circ\text{C}$  پخت داده شدند. برای لایه انتقال دهنده حفره (HTL)،  $30\ \mu\text{l}$  از محلول  $\text{CuInS}_2$  به مدت ۳۰ ثانیه با سرعت  $3000$

$$D = \frac{\lambda}{\beta \cos \theta} \quad (1)$$

$$\varepsilon = \frac{\beta}{4 \tan \theta} \quad (2)$$

$$\delta = \frac{m}{D^2} \quad (3)$$

$$d = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta} \quad (4)$$

در اینجا  $\lambda$  طول موج پرتو ایکس  $0.15406$  nm)،  $\theta$  زاویه پراش براگ (بر حسب رادیان)،  $\beta$  پهنا در نصف مقدار بیشینه (FWHM)،  $m$  ثابت برابر با واحد و  $n$  مرتبه پراش است. تغییرات در اندازه متوسط پارامترهای اندازه بلورک، میکرو کرنش، FWHM، چگالی نابجایی و پارامترهای شبکه در جداول ۱ و ۲ نشان داده شده است.

جدول ۱: میانگین میکرو کرنش، چگالی نابجایی، FWHM و اندازه بلورک لایه‌های پروسکایت با ضدحلال‌های کلروبنزن و دی اتیل اتر

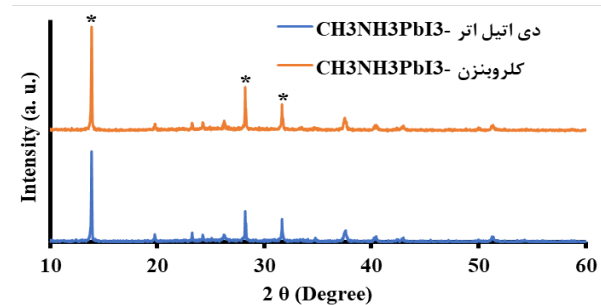
ضدحلال	$\varepsilon^*(10^{-3})$	$\delta^*(10^{-4})$	$\mu(10^{-3})$ FWHM	D (nm)
کلروبنزن	۲/۶۹	۲/۲۵	۲/۲۲	۶۶/۵۳
دی اتیل اتر	۲/۸۴	۲/۴۷	۲/۳۵	۶۳/۵۹

جدول ۲- پارامترهای شبکه پروسکایت  $CH_3NH_3PbI_3$  با ضدحلال‌های کلروبنزن و دی اتیل اتر

ضدحلال	a(A°)	c(A°)	Vol. (A°³)
کلروبنزن	۸/۹۳۴۹	۱۳/۵۶۹۰	۱۰۸۳/۲۴۹
دی اتیل اتر	۸/۹۳۳۳	۱۳/۵۷۹۱	۱۰۸۳/۶۸۴

پارامترهای  $\delta$  و  $\varepsilon$  مربوط به لایه پروسکایت با ضدحلال کلروبنزن نسبت به مقدار این پارامترها در پروسکایت با ضدحلال دی اتیل اتر، کمتر هستند که نشان دهنده نقص شبکه کمتر در پروسکایت با ضدحلال کلروبنزن است [۲۹]. همچنین با توجه به

لایه پروسکایت با حفره سطحی کمتر می تواند در کاهش باز ترکیب زوج الکترون-حفره موثر باشد که این موضوع باعث بهبود عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی می شود. برای بررسی اثر تغییر ضد حلال در حین فرایند لایه نشانی تک مرحله ای بر بلورینگی لایه پروسکایت، مشخصه یابی XRD پروسکایت های لایه نشانی شده با ضد حلال های کلروبنزن و دی اتیل اتر مورد ارزیابی قرار گرفت (شکل ۲).



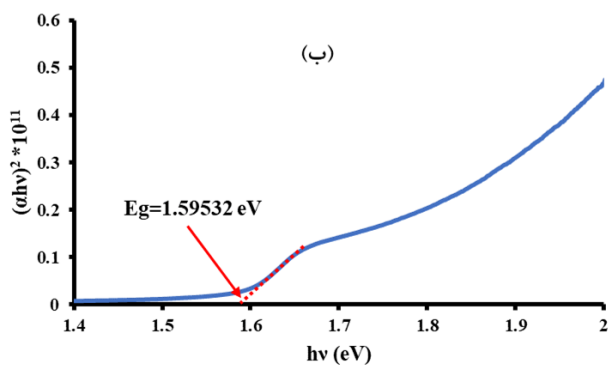
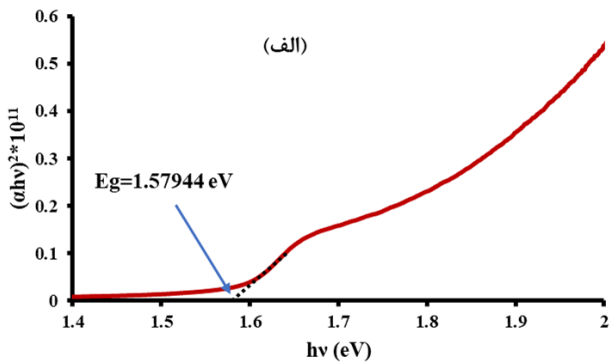
شکل ۲: طیف XRD لایه پروسکایت با ضد حلال های کلروبنزن و دی اتیل اتر

پیک های پراش در  $\theta$  برابر با  $13/85^\circ$ ،  $28/22^\circ$  و  $31/65^\circ$ ، به ترتیب مربوط به صفحات (۱۱۰)، (۲۲۰) و (۳۱۰) می باشد، که تشکیل فاز چهار ضلعی پروسکایت را برای هر دو ضد حلال نشان می دهد [۲۷]. شدت پیک های طیف XRD مربوط به نمونه ساخته شده با ضدحلال کلروبنزن نسبت به نمونه ساخته شده با ضدحلال دی اتیل اتر بیشتر است. این موضوع نشان دهنده بلورینگی بهتر لایه پروسکایت ایجاد شده با ضدحلال کلروبنزن می باشد. تجزیه و تحلیل الگوهای XRD لایه پروسکایت مربوط به دو ضد حلال کلروبنزن و دی اتیل اتر، اطلاعات ارزشمندی را معرفی می کند که نشان دهنده تفاوت های متعدد در فاکتورهای هندسی بین رشد پروسکایت است. اندازه بلورک (D)، میکرو کرنش ( $\varepsilon$ )، چگالی نابجایی اتمی ( $\delta$ ) و فاصله بین سطحی (d) لایه های پروسکایت با استفاده از معادله های زیر محاسبه شد [۲۸]:

سلول خورشیدی پروسکایتی شود. اطلاعات مربوط به ساختار نواری و خواص نوری لایه پروسکایت را می توان با تجزیه و تحلیل طیف جذب آن تعیین کرد. رابطه بین انرژی نور فرودی بر لایه پروسکایت و ضریب جذب آن از قانون توان  $T_{auc}$  به صورت زیر به دست می آید [۲۹]:

$$\alpha hv = A(hv - E_g)^n \quad (6)$$

در اینجا  $A$ ،  $h$  و  $E_g$  به ترتیب ثابت، ثابت پلانک و انرژی گاف هستند. نماد  $n$  شاخصی که به ماهیت انتقال الکترونیکی بستگی دارد، می تواند مقادیر  $0/5$ ،  $1/5$ ،  $2$  و  $3$  داشته باشد. شکل های  $4$  و  $5$  نمودارهای مربوط به رابطه  $T_{auc}$  را به ازای  $n$  برابر به  $0/5$  و  $2$  نشان می دهد که به ترتیب برای محاسبه گاف اپتیکی مستقیم و گاف اپتیکی غیر مستقیم استفاده می شود.



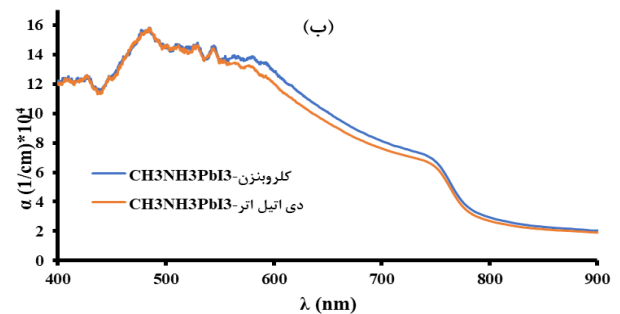
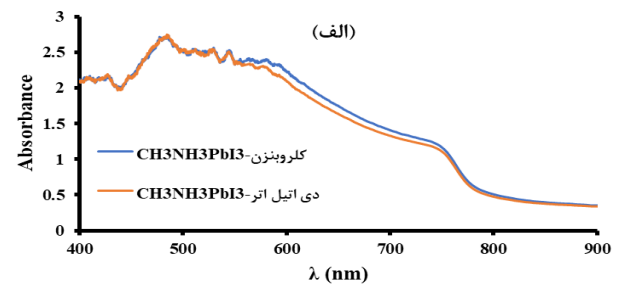
شکل 4: گاف اپتیکی مستقیم لایه پروسکایت  $CH_3NH_3PbI_3$  با ضد حلال الف- کلروبنزن و ب- دی اتیل اتر

نتایج جدول ۲، برای لایه پروسکایت با ضدحلال کلروبنزن نسبت به نمونه با ضدحلال دی اتیل اتر انقباض شبکه (حجم  $1083/249$  نسبت به حجم  $1083/684$ ) مشاهده می شود که این انقباض شبکه در بهبود عملکرد و پایداری سلول های خورشیدی پروسکایتی موثر است [۲۹].

ضریب جذب لایه های پروسکایت ذکر شده با استفاده از رابطه زیر بدست آمد [۲۸]:

$$\alpha = 2.303 \frac{A}{d} \quad (5)$$

بطوریکه  $A$  جذب و  $d$  ضخامت لایه پروسکایت است. در شکل ۳ طیف جذب و همچنین تغییرات ضریب جذب لایه پروسکایت با ضدحلال های کلروبنزن و دی اتیل اتر در بازه طول موجی  $400$  تا  $900$  نانومتر مشاهده می شود.



شکل ۳: الف- طیف جذب و ب- تغییرات ضریب جذب لایه پروسکایت  $CH_3NH_3PbI_3$  با ضد حلال های کلروبنزن و دی اتیل اتر

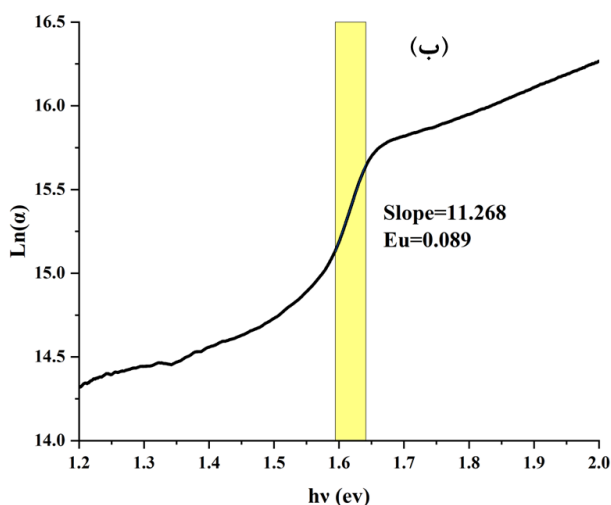
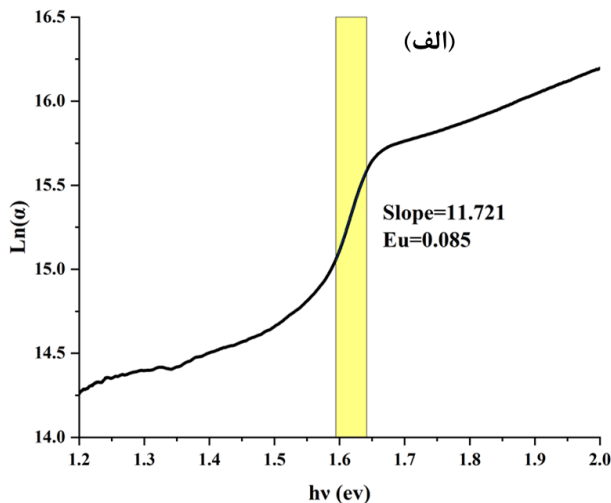
لبه جذب برای هر دو نمونه در طول موج تقریبی  $780$  نانومتر قرار دارد. در بازه طول موجی  $560$  تا  $750$  نانومتر، پروسکایت با ضدحلال کلروبنزن جذب بیشتری دارد که می تواند منجر به تولید زوج الکترون-حفره بیشتر و در نتیجه افزایش چگالی جریان

می توان از طیف‌های جذب استخراج و با استفاده از رابطه زیر محاسبه کرد [۲۸]:

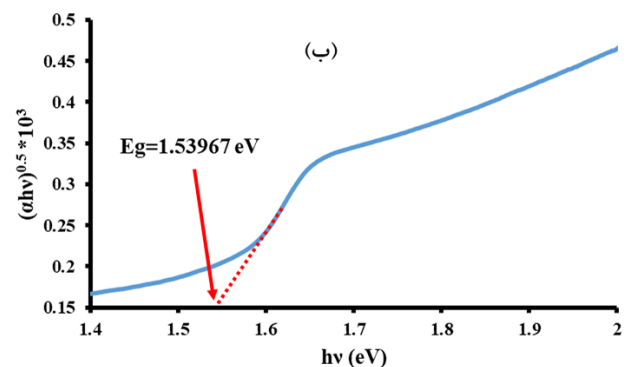
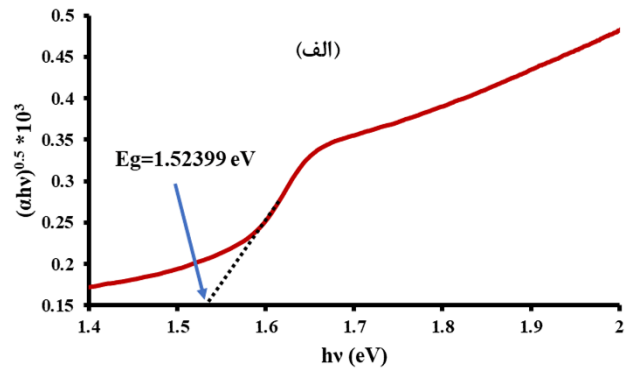
$$\alpha = \alpha_0 \exp\left(\frac{E}{Eu}\right) \quad (7)$$

$$\ln(\alpha) = \frac{hv}{Eu} + \ln(\alpha_0) \quad (8)$$

بطوری که  $\alpha$  ضریب جذب پروسکایت،  $\alpha_0$  ثابت،  $E$  انرژی فوتون فرودی و  $Eu$  انرژی اورباخ است. انرژی اورباخ برابر با معکوس شیب نمودار  $\ln(\alpha)$  بر حسب  $hv$  است (شکل ۶).



شکل ۶: انرژی اورباخ لایه پروسکایت  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  با ضد حلال الف- کربونزن و ب- دی اتیل اتر



شکل ۵: گاف اپتیکی غیرمستقیم لایه پروسکایت  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  با ضد حلال الف- کربونزن و ب- دی اتیل اتر

همانطور که مشاهده می شود گاف اپتیکی مستقیم برای لایه پروسکایت با ضدحلال کربونزن نسبت به نمونه با ضدحلال دی اتیل اتر کمتر است که در توافق با نمودار جذب ارائه شده در شکل ۳-الف می باشد. همچنین برای هر دو نمونه پروسکایت با ضدحلال های کربونزن و دی اتیل اتر، گاف اپتیکی غیرمستقیم به حدود ۵۶ meV از گاف اپتیکی مستقیم کمتر است که این تفاوت به اثر کوانتومی راشبا نسبت داده می شود [۳۰].

حالت‌های نقص در ناحیه گاف اپتیکی را می توان براساس کمیت انرژی اورباخ مورد تحلیل قرار داد. این حالت‌های نقص موضعی در ناحیه گاف نواری، مسئول تشکیل دنباله جذبی در طیف‌های جذبی هستند که به آن دنباله اورباخ و انرژی مرتبط با آن، انرژی اورباخ نامیده می‌شود. انرژی اورباخ را

جدول ۳- پارامترهای فوتولتائیک سلول های خورشیدی پروسکایتی با ضدحلال های کلروبنزن و دی اتیل اتر

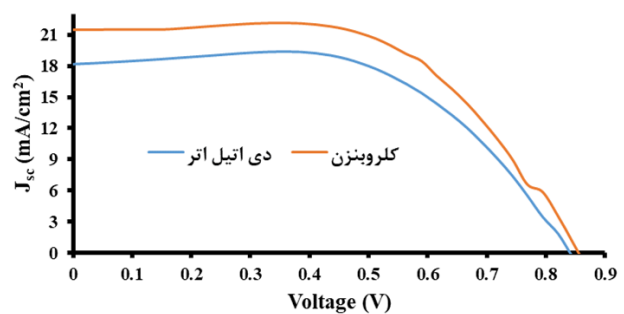
ضدحلال	Jsc (mA/cm <sup>2</sup> )	Voc (V)	FF	Efficiency (%)	
کلروبنزن	۲۱/±۴۹	۰/۳۸	۰/±۸۶	۰/۰۳	۰/۱۰/±۸۹
دی اتیل اتر	۱۸/±۱۵	۰/۴۱	۰/±۸۳	۰/۰۲	۰/۰۲۹/±۱۶

#### ۴- نتیجه گیری

در این پژوهش اثر تغییر ضدحلال در روش تک مرحله ای برای ساخت لایه پروسکایت بر خواص ساختاری و اپتیکی این لایه و نهایتاً عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی مزومتخلخل مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور ضدحلال های کلروبنزن و دی اتیل اتر انتخاب شدند. مشخص شد که نوع ضدحلال مورد استفاده شده در روش تک مرحله ای بر تغییر خواص اپتیکی و ساختاری لایه پروسکایت موثر است و نهایتاً عملکرد سلول خورشیدی پروسکایتی را مورد تاثیر قرار می دهد. لایه پروسکایت با ضد حلال کلروبنزن ریخت شناسی بهتر و بلورینگی بیشتری نسبت به لایه پروسکایت با ضدحلال دی اتیل اتر از خود نشان داد. با استفاده از مشخصه یابی انرژی اورباخ مشخص شد که لایه پروسکایت با ضدحلال کلروبنزن نسبت به لایه پروسکایت با ضدحلال دی اتیل اتر نقص های شبکه ای کمتری دارد. همچنین پارامترهای فوتولتائیک سلول خورشیدی پروسکایتی ساخته شده با ضدحلال کلروبنزن نسبت به نمونه با ضدحلال دی اتیل اتر مقادیر بیشتری را از خود نشان دادند که دلیل آن کیفیت اپتیکی و ساختاری بهتر لایه پروسکایت با ضدحلال کلروبنزن بود. برای بررسی جامع تر اثر تغییر ضدحلال بر پارامترهای عملکردی سلول خورشیدی پروسکایتی شامل خواص الکتریکی و پایداری محیطی نیاز به مشخصه یابی هایی مانند امپدانس (EIS) و اندازه گیری زاویه تماس قطره آب است که در ادامه این کار پژوهشی انجام خواهد شد.

مقدار انرژی اورباخ برای لایه پروسکایت با ضد حلال های کلروبنزن و دی اتیل اتر به ترتیب مقادیر ۰/۰۸۵ eV و ۰/۰۸۹ eV بدست آمد. مقدار کمتر انرژی اورباخ برای نمونه با ضد حلال کلروبنزن می تواند منجر به طول عمر و طول انتشار بیشتر حامل های بار در لایه پروسکایت شود [۳۱].

شکل ۷ و جدول ۳ به ترتیب نمودار جریان-ولتاژ و پارامترهای فوتولتائیک سلول های خورشیدی پروسکایتی با ضدحلال های کلروبنزن و دی اتیل اتر را نشان می دهد. با توجه به اینکه لایه پروسکایت ساخته شده با ضدحلال کلروبنزن نسبت به پروسکایت ساخته شده با ضدحلال دی اتیل اتر سطحی با حفره های کمتر و همچنین کیفیت بلوری و اپتیکی بهتری دارد، پارامترهای فوتولتائیک سلول خورشیدی پروسکایتی مربوط به آن افزایش قابل ملاحظه ای را نسبت به نمونه با ضدحلال دی اتیل اتر نشان می دهد. چگالی جریان سلول خورشیدی پروسکایتی با ضدحلال کلروبنزن ۲۱/۴۹ mA/cm<sup>2</sup> است که نسبت به چگالی جریان سلول خورشیدی با ضدحلال دی اتیل اتر (۱۸/۱۵ mA/cm<sup>2</sup>) افزایش ۱۸٪ مشاهده می شود. همچنین بازدهی سلول خورشیدی پروسکایتی با ضدحلال کلروبنزن ۱۰/۸۹٪ است که حدود ۱۹٪ بیشتر از بازدهی سلول خورشیدی با ضدحلال دی اتیل اتر است.



شکل ۷- نمودار جریان-ولتاژ سلول خورشیدی پروسکایتی با ضدحلال های کلروبنزن و دی اتیل اتر

methods of NiOx nanoparticles and its effect on hole conductivity and stability of nip perovskite solar cells. *Synthetic Metals*. 2022 Sep 1;289:117115. <https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2022.117115>.

[9] Jin RJ, Lou YH, Huang L, Wang KL, Chen CH, Chen J, Hu F, Wang ZK. Photochemical shield enabling highly efficient perovskite photovoltaics. *Advanced Materials*. 2024 May;36(21):2313154. <https://doi.org/10.1002/adma.202313154>.

[10] 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 May 6;131(17):6050-1. <https://doi.org/10.1021/ja809598r>.

[11] Green MA, Dunlop ED, Hohl-Ebinger J, Yoshita M, Kopidakis N, Hao X. Solar cell efficiency tables (Version 58). *Progress in photovoltaics*. 2021 Jul 1;29(7). <https://doi.org/10.1002/ppp.3444>.

[12] Cao X, Su G, Hao L, Zhou J, Zeng Q, He X, Wei J. A green solvent engineering process for synthesizing perovskite films in high humidity atmospheres for efficient solar cells. *Journal of Materials Chemistry C*. 2024;12(5):1631-9. <https://doi.org/10.1039/D3TC04358D>.

[13] Sun J, Li F, Yuan J, Ma W. Advances in Metal Halide Perovskite Film Preparation: The Role of Anti-Solvent Treatment. *Small Methods*. 2021 May;5(5):2100046. <https://doi.org/10.1002/smt.202100046>.

[14] Nur-E-Alam M, Islam MA, Kar YB, Kiong TS, Misran H, Khandaker MU, Fouad Y, Soudagar ME, Cuce E. Anti-solvent materials enhanced structural and optical properties on ambiently fabricated perovskite thin films. *Scientific reports*. 2024 Aug 28;14(1):19995. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-70344-3>.

[15] Gou Y, Tang S, Yuan C, Zhao P, Chen J, Yu H. Research progress of green antisolvent for perovskite solar cells. *Materials Horizons*. 2024;11(15):3465-81. <https://doi.org/10.1039/D4MH00290C>.

[16] Asuo IM, Varposhti AM, Gomez ED, Doumon NY. Anti-solvent engineering enables efficient ambient-processed halide perovskite solar cells. *Journal of Materials Chemistry C*. 2024;12(21):7562-71. <https://doi.org/10.1039/D4TC01305K>.

[14] Jeon NJ, Noh JH, Kim YC, Yang WS, Ryu S, Seok SI. Solvent engineering for high-performance inorganic-organic hybrid perovskite solar cells. *Nature materials*. 2014 Sep;13(9):897-903. <https://doi.org/10.1038/nmat4014>.

[15] Zhang W, Zhang T, Qin L, Kang SZ, Zhao Y, Li X. Anti-solvent engineering to rapidly purify PbI<sub>2</sub> for efficient perovskite solar cells. *Chemical Engineering Journal*. 2024 Jan 1;479:147838. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.147838>.

## ۵- تشکر و قدردانی

این پژوهش در قالب طرح پژوهشی شماره ۰۳/۱۹۰۸ با استفاده از اعتبارات طرح پژوهشی پژوهشگاه علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران انجام شده است.

## مراجع

[1] Cheng Y, Wei Q, Ye Z, Zhang X, Ji P, Wang N, Zan L, Fu F, Liu S. Synergistic effect of anti-solvent and component engineering for effective passivation to attain highly stable perovskite solar cells. *Solar RRL*. 2022 Sep;6(9):2200418. <https://doi.org/10.1002/solr.202200418>.

[2] Li G, Wang Z, Wang Y, Yang Z, Dong P, Feng Y, Jiang Y, Feng SP, Zhou G, Liu JM, Gao J. Co-Solvent Engineering Contributing to Achieve High-Performance Perovskite Solar Cells and Modules Based on Anti-Solvent Free Technology. *Small*. 2023 Jul;19(28):2301323. <https://doi.org/10.1002/sml.202301323>.

[3] Jiao J, Yang C, Wang Z, Yan C, Fang C. Solvent engineering for the formation of high-quality perovskite films: a review. *Results in Engineering*. 2023 Jun 1;18:101158. <https://doi.org/10.1021/acsami.8b16315>.

[4] Lin K, Xing J, Quan LN, de Arquer FP, Gong X, Lu J, Xie L, Zhao W, Zhang D, Yan C, Li W. Perovskite light-emitting diodes with external quantum efficiency exceeding 20 per cent. *Nature*. 2018 Oct 11;562(7726):245-8. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0575-3>.

[5] Jahanbakhshi Zadeh N, Borhani Zarandi M. Interfacial engineering of mp-TiO<sub>2</sub>/CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> with Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: Effect of different phases of alumina on performance and stability of perovskite solar cells. *Journal of Materials Research*. 2021 Dec:1-3. <https://doi.org/10.1557/s43578-021-00442-9>.

[6] Moon J, Mehta Y, Gundogdu K, So F, Gu Q. Metal-halide perovskite lasers: Cavity formation and emission characteristics. *Advanced Materials*. 2024 May;36(20):2211284. <https://doi.org/10.1002/adma.202211284>.

[7] Zhao Y, Yin X, Li P, Ren Z, Gu Z, Zhang Y, Song Y. Multifunctional perovskite photodetectors: from molecular-scale crystal structure design to micro/nano-scale morphology manipulation. *Nano-Micro Letters*. 2023 Dec;15(1):187. <https://doi.org/10.1007/s40820-023-01161-y>.

[8] Abadi SP, Zarandi MB, Zadeh NJ. Synthesis

- Thin Solid Films. 2018 Sep 1;661:122-7. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2018.07.025>.
- [23] Zadeh NJ, Zarandi MB, Nateghi MR. Effect of crystallization strategies on CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> perovskite layer deposited by spin coating method: dependence of photovoltaic performance on morphology evolution. Thin Solid Films. 2018 Aug 30;660:65-74. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2018.03.038>.
- [24] Baikie T, Fang Y, Kadro JM, Schreyer M, Wei F, Mhaisalkar SG, Graetzel M, White TJ. Synthesis and crystal chemistry of the hybrid perovskite (CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>)PbI<sub>3</sub> for solid-state sensitised solar cell applications. Journal of Materials Chemistry A. 2013;1(18):5628-41. <https://doi.org/10.1039/c3ta10518k>.
- [25] Nakhaee B, Borhani Zarandi M, Jahanbakhshi Zadeh N. Optical and structural engineering of CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> film via CB-antisolvent for efficient and stable perovskite solar cells. Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2023 May;34(13):1094. <https://doi.org/10.1007/s10854-023-10518-3>.
- [26] Nakhaee B, Zarandi MB, Zadeh NJ. Deciphering the role of antisolvent on the structural and optical properties of CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> film and its impacts on the performance and stability of nip perovskite solar cells. Optical Materials. 2023 Feb 1;136:113421. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2022.113421>.
- [27] Zadeh NJ, Zarandi MB, Nateghi MR. Optical properties of the perovskite films deposited on mesoporous TiO<sub>2</sub> by one step and hot casting techniques. Thin Solid Films. 2019 Feb 1;671:139-46. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2018.12.029>.
- [28] Mehdizadeh-Rad H, Singh J. Influence of Urbach energy, temperature, and longitudinal position in the active layer on carrier diffusion length in perovskite solar cells. ChemPhysChem. 2019 Oct 16;20(20):2712-7. <https://doi.org/10.1002/cphc.201801038>.
- [16] Li J, Yang R, Que L, Wang Y, Wang F, Wu J, Li S. Optimization of anti-solvent engineering toward high performance perovskite solar cells. Journal of Materials Research. 2019 Jul;34(14):2416-24. <https://doi.org/10.1557/jmr.2019.122>.
- [17] Gedamu D, Asuo IM, Benetti D, Baſti M, Ka I, Cloutier SG, Rosei F, Nechache R. Solvent-antisolvent ambient processed large grain size perovskite thin films for high-performance solar cells. Scientific reports. 2018 Aug 27;8(1):12885. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-31184-0>.
- [18] Yang H, Wang H, Zhang J, Chang J, Zhang C. A Facile way to improve the performance of perovskite solar cells by toluene and diethyl ether mixed antisolvent engineering. Coatings. 2019 Nov 18;9(11):766. <https://doi.org/10.1039/d2ra05454j>.
- [19] Lee KM, Lin CJ, Liou BY, Yu SM, Hsu CC, Suryanarayanan V, Wu MC. Selection of anti-solvent and optimization of dropping volume for the preparation of large area sub-module perovskite solar cells. Solar Energy Materials and Solar Cells. 2017 Dec 1;172:368-75. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.151723>.
- [20] Prochowicz D, Tavakoli MM, Solanki A, Goh TW, Pandey K, Sum TC, Saliba M, Yadav P. Understanding the effect of chlorobenzene and isopropanol anti-solvent treatments on the recombination and interfacial charge accumulation in efficient planar perovskite solar cells. Journal of Materials Chemistry A. 2018;6(29):14307-14. <https://doi.org/10.1039/c8ta03782e>.
- [21] Chen Y, Wu W, Ma R, Wang C. Perovskites fabricated with volatile anti-solvents for more efficient solar cells. Journal of Molecular Structure. 2019 Jan 5;1175:632-7. <https://doi.org/10.1002/adom.201801029>.
- [22] Kim GH, Jeong J, Jang H, Kim JW, Kim JY. Fast vaporizing anti-solvent for high crystalline perovskite to achieve high performance perovskite solar cells.