Nanomeghyas
www.nanomeghyas.ir
نانومقیاس

Sol-Gel Synthesis of Aluminum Oxide Nanoparticles and Investigation of the Effect of α- and γ-Al_2O_3 Phases as a Mesoporous Layer on the Structural, Optical, and Photovoltaic Properties of Perovskite Solar Cells

N. Jahanbakhshi Zadeh[1*], M. Borhani Zarandi[2], M. B. Askari[1], M. Sani[3], M. Shojaeifar[4]

[1*]Department of Semiconductor, Institute of Science and High Technology and Environmental Sciences, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran.

[2]Department of Physics, Yazd University, Yazd, Iran.

[3]Department of Fiber Optic, Institute of Science and High Technology and Environmental Sciences, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran.
[4]Department of Laser, Institute of Science and High Technology and Environmental Sciences, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran

Received: 2026-06-06 Revised: 2026-07-28 Accepted: 2026-08-20

Abstract: In this study, α-Al_2O_3 and γ-Al_2O_3 nanoparticles were synthesized via the sol–gel method and employed as mesoporous layer in perovskite solar cells with the structure of FTO/Compact TiO_2/Mesoporous Al_2O_3/$CH_3NH_3PbI_3$/$CuInS_2$/Au. The aim of this study was to investigate the effect of the crystalline phase of aluminum oxide on the structural, optical, and photovoltaic properties of the $CH_3NH_3PbI_3$ perovskite layer. The structural characteristics of the samples were evaluated using XRD and SEM. The results revealed that the γ-Al_2O_3 scaffold improved the crystallization of the perovskite layer and increased the perovskite crystallite size from 44.29 to 45.82 nm. Moreover, the average grain size of the perovskite layer increased from 410 nm for the α-Al_2O_3-based sample to 470 nm for the γ-Al_2O_3-based sample, indicating enhanced crystal growth and reduced grain boundaries in the perovskite layer. Optical investigations demonstrated that the perovskite layer grown on the γ-Al_2O_3 scaffold exhibited higher light absorption and improved optical quality. The direct band gaps for the α-Al_2O_3 and γ-Al_2O_3-based samples were determined to be 1.566 and 1.533 eV, respectively, while the indirect band gaps were 1.521 and 1.488 eV, respectively. The 0.045 eV difference between the direct and indirect band gaps was attributed to the Rashba effect. Furthermore, the reduction of the Urbach energy from 0.186 eV for the α-Al_2O_3-based perovskite to 0.170 eV for the γ-Al_2O_3-based sample indicated decreased structural disorder and electronic defects. The improved structural and optical properties of the perovskite layer on the γ-Al_2O_3 scaffold enhanced the photovoltaic performance of the corresponding solar cell, increasing the power conversion efficiency from 6.01% for the α-Al_2O_3-based device to 6.81% for the γ-Al_2O_3-based device. These results demonstrate that γ-Al_2O_3 as a mesoporous scaffold can effectively improve the performance of perovskite solar cells by enhancing crystal growth, reducing defects, and increasing light absorption in the perovskite layer.

Keywords: Perovskite Solar Cell, Aluminum Oxide, Optical Properties, Structural Properties, Substrate

Corresponding Author. Email: n_jahanbakhshi@yahoo.com

How to Cite This Article:
Jahanbakhshi Zadeh N., Borhani Zarandi M., Askari M. B., Sani M., Shojaeifar M. Sol-Gel Synthesis of Aluminum Oxide Nanoparticles and Investigation of the Effect of α- and γ-Al_2O_3 Phases as a Mesoporous Layer on the Structural, Optical, and Photovoltaic Properties of Perovskite Solar Cells. Nanomeghyas. 2026;():e738952 (In Persian). doi: 10.22034/ns.2026.2091857.1435

This is an open access article under the CC-BY license (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

نانومقیاس

سنتز نانوذرات اکسید آلومینیوم به روش سل-ژل و بررسی اثر فازهای α و γ آن‌ها به‌عنوان لایه مزومتخلخل بر خواص ساختاری، اپتیکی و فتوولتائیک سلول‌های خورشیدی پروسکایتی

ناصر جهان بخشی زاده[1*] | محمود برهانی زرندی[2]، محمدباقر عسکری[1]، میلاد ثانی[3]، محسن شجاعی فر[4]

[1]گروه نیمه هادی ها، پژوهشگاه علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، کرمان
[2]دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران
[3]گروه فیبرنوری، پژوهشگاه علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، کرمان
[4] گروه لیزر، پژوهشگاه علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، کرمان

تاریخ دریافت:۱۴۰۵/۰۳/۱۶ تاریخ بازنگری:۱۴۰۵/۰۵/۰۶ تاریخ پذیرش:۱۴۰۵/۰۵/۲۹

چکیده: در این پژوهش، نانوذرات α-Al_2O_3 و γ-Al_2O_3 به روش سل-ژل سنتز شده و پس از تهیه خمیر مزومتخلخل، به‌عنوان زیرلایه پروسکایت در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با ساختار FTO/Compact TiO_2/Mesoporous Al_2O_3/$CH_3NH_3PbI_3$/$CuInS_2$/Au به‌کار گرفته شدند. هدف این مطالعه بررسی تأثیر فاز بلوری اکسید آلومینیوم بر خواص ساختاری، اپتیکی و عملکرد فتوولتائیک لایه پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$بود. ویژگی‌های ساختاری نمونه‌ها با استفاده از آنالیزهای XRD و SEM بررسی شد. نتایج نشان داد که زیرلایه γ-Al_2O_3 موجب بهبود تبلور پروسکایت شده و اندازه بلورک پروسکایت را از ۴۴/۲۹ به ۴۵/۸۲ نانومتر افزایش می‌دهد. همچنین متوسط اندازه بلورهای پروسکایت از ۴۱۰ نانومتر در نمونه با زیرلایه α-Al_2O_3 به ۴۷۰ نانومتر در نمونه با زیرلایه γ-Al_2O_3 افزایش یافت که نشان‌دهنده رشد بهتر بلورها و کاهش مرزدانه‌های لایه پروسکایت است. بررسی خواص اپتیکی نشان داد که پروسکایت رشد یافته روی زیرلایه γ-Al_2O_3 جذب نوری بیشتر و کیفیت اپتیکی بهتری دارد. گاف انرژی مستقیم برای نمونه‌های با زیرلایه های α-Al_2O_3 و γ-Al_2O_3 به‌ترتیب ۱/۵۶۶ و ۱/۵۳۳ eV و گاف انرژی غیرمستقیم ۱/۵۲۱ و ۱/۴۸۸ eV به‌دست آمد. اختلاف ۰/۰۴۵ eV میان گاف‌های انرژی به اثر راشبا نسبت داده شد. همچنین کاهش انرژی اورباخ از ۰/۱۸۶ eV برای پروسکایت با زیرلایه α-Al_2O_3 به ۰/۱۷۰ eV برای نمونه با زیرلایه γ-Al_2O_3 نشان‌دهنده کاهش بی‌نظمی ساختاری و نقص‌های الکترونیکی است. بهبود خواص ساختاری و اپتیکی برای پروسکایت با زیرلایه γ-Al_2O_3 موجب افزایش عملکرد سلول خورشیدی برپایه این زیرلایه شد؛ به‌طوری‌که بازده تبدیل توان از ۶/۰۱٪ برای سلول خورشیدی بر پایه α-Al_2O_3 به ۶/۸۱٪ برای سلول خورشیدی بر پایه γ-Al_2O_3 افزایش یافت. این نتایج نشان می‌دهد که γ-Al_2O_3 به‌عنوان لایه مزومتخلخل، با بهبود رشد بلوری، کاهش نقص‌ها و افزایش جذب نور لایه پروسکایت، می‌تواند عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی را ارتقا دهد.

واژگان کلیدی: سلول خورشیدی پروسکایتی، اکسید آلومینیوم، خواص اپتیکی، خواص ساختاری، زیرلایه

نویسندهٔ مسئول: n_jahanbakhshi@yahoo.com

نحوه استناد به این مقاله: جهانبخشی زاده ناصر, برهانی زرندی محمود, عسکری محمدباقر, ثانی میلاد, شجاعی فر محسن. سنتز نانوذرات اکسید آلومینیوم به روش سل-ژل و بررسی اثر فازهای α و γ آن‌ها به‌عنوان لایه مزومتخلخل بر خواص ساختاری، اپتیکی و فتوولتائیک سلول‌های خورشیدی پروسکایتی . Nanomeghyas. 1405;():e738952. doi: 10.22034/ns.2026.2091857.1435

این مقاله تحت مجوز دسترسی آزاد CC-BY منتشر شده است(https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

۱- مقدمه

سلول‌های خورشیدی مبتنی بر پروسکایت های آلی-معدنی (PSC[1])، از نظر بازدهی و مزیت قابل توجه در تولید کم‌هزینه، یکی از امیدوارکننده‌ترین کاندیداها برای سلول‌های خورشیدی نسل بعدی هستند [۱-۵]. از زمان اولین گزارش مربوط به ساخت PSC در سال ۲۰۰۹، پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ به طور گسترده به عنوان جاذب نور با زیرلایه TiO_2 مورد استفاده قرار گرفته است [۶-۸]. پس از تنها ۱۵ سال تحقیق و توسعه، در اواسط سال ۲۰۲۴، رکورد PCE[2] تایید شده‌ی سلول‌های خورشیدی تک پیوندی به حدود ۲۷٪ رسید، که تقریباً مشابه سطح PCE سلول‌های خورشیدی سیلیکونی تک پیوندی است که از دهه ۵۰ قرن گذشته در حال توسعه بوده‌اند [۹-۱۱]. PSCها را می‌توان به دو دسته تقسیم کرد: نوع مزومتخلخل و نوع مسطح. PSCهای با ساختار مزومتخلخل شامل زیرلایه اکسید قلع آلاییده شده با فلوئور (FTO[3])، لایه فشرده از نیمرسانا مانند TiO_2، لایه مزومتخلخل، لایه پروسکایت، لایه انتقال حفره (HTL[4]) و یک الکترود شمارنده هستند و در مقابل، سلول خورشیدی با ساختار مسطح دارای لایه مزومتخلخل نیست و تماس مستقیمی بین پروسکایت و لایه فشرده نیمه‌رسانا برقرار است. عملکرد فوتولتائیک PSCها نه تنها به لایه جاذب پروسکایت، بلکه به لایه‌های انتقال دهنده الکترون (ETL[5]) و زیرلایه‌های مزومتخلخل وابسته است [۱۲-۱۴]. نقش این لایه‌ها در هسته‌زایی، رشد کریستال‌ها، استخراج بار و کاهش بازترکیب حامل ها در فصل مشترک، حیاتی و غیرقابل انکار است [۱۵-۱۷]. در میان انواع مواد مورد استفاده به عنوان لایه مزومتخلخل یا ETL، اکسید آلومینیوم (Al_2O_3) به دلیل پایداری شیمیایی عالی، خلوص بالا، هزینه کم و خواص الکتریکی مناسب که مانع از بازترکیب معکوس حامل های بار می‌شود توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده است [۱۸-۲۰]. اسنیث و همکارانش گزارش دادند که ولتاژ اتصال کوتاه (Voc) سلول‌های خورشیدی مزومتخلخل را می‌توان با استفاده از لایه مزومتخلخل مبتنی بر Al_2O_3 بهبود بخشید و برهمین اساس سلول خورشیدی پروسکایتی بر پایه Al_2O_3 را سلول های خورشیدی پروسکایتی ابرساختار نامگذاری کردند [۲۱]. در این ساختار Al_2O_3 یک عایق با شکاف نواری پهن (۷ تا ۹ الکترون‌ولت) است و صرفاً به عنوان یک چارچوب عمل می‌کند که پروسکایت روی آن پوشش داده می‌شود. آنها نشان دادند که انتقال الکترون از طریق لایه پروسکایت بسیار سریع‌تر از نیمرسانای TiO_2 نوع n است و جایگزین کردن TiO_2 با Al_2O_3 منجر به افزایش افزایش Voc تا مرتبه چند صد میلی‌ولت می شود. اغلب مطالعات انجام شده در زمینه استفاده از Al_2O_3 در ساختار PSCs بر روی بهینه‌سازی پارامترهایی نظیر ضخامت این لایه و تاثیر آن بر فرایند کپسوله کردن در جهت محافظت از سلول خورشیدی از عوامل تخریبی مانند رطوبت و اکسیزن بوده است [۲۲-۲۶]. میاساکا و همکارانش اثرات لایه‌های نازک مزومتخلخل کامپوزیتی ناهمگن از TiO_2 و Al_2O_3 را بر خواص فتوولتائیک و انتقال حامل‌های بار در PSC های مبتنی بر پروسکایت ترکیبی $FAPbI_{3-x}Cl_x$ مورد بررسی قرار دادند [۲۷]. آنها دریافتند که کیفیت و مورفولوژی لایه پروسکایت به شدت تحت تأثیر نسبت TiO_2/Al_2O_3 در لایه مزومتخلخل قرار دارد. همچنین بازده تبدیل توان سلول خورشیدی پروسکایت با استفاده از کامپوزیت TiO_2 و Al_2O_3 در مقایسه با سلول‌های مبتنی بر TiO_2 و Al_2O_3 بهبود یافت و برای PSC با کامپوزیت TiO_2/Al_2O_3 با نسبت ۷:۳، بازدهی ۱۱٪ گزارش شد. عبدی و همکارانش اثرات مورفولوژی و ضخامت چارچوب Al_2O_3 بر انتقال بار در سلول‌های خورشیدی مبتنی بر پروسکایت را گزارش دادند [۲۸]. آنها نشان دادند که برای رسیدن به حداکثر راندمان سلول‌های خورشیدی پروسکایتی، ضخامت بهینه‌ای برای لایه پروسکایت و زبری و ضخامت سطح بهینه‌ای برای چارچوب Al_2O_3 وجود دارد. یک پارامتر بسیار کلیدی و در عین حال کمتر مورد بررسی قرار گرفته، تأثیر فاز کریستالی خود اکسید آلومینیوم بر خواص لایه مزومتخلخل بعنوان چارچوب رشد لایه پروسکایت و متعاقب آن، عملکرد فوتوولتائیک سلول خورشیدی پروسکایتی است. در این پژوهش، به مقایسه دقیق و سیستماتیک دو فاز α و γ اکسید آلومینیوم به صورت لایه‌های مزومتخلخل به عنوان زیرلایه پروسکایت پرداخته‌ایم. لایه پروسکایت بر روی هر دو زیرلایه رشد داده شد. اثر این تغییر فاز بر خواص اپتیکی و ساختاری لایه پروسکایت و نهایتا عملکرد فوتوولتائیک PSC مورد بررسی و تحلیل قرار گرفت. در نهایت لایه پروسکایت با لایه مزومتخلخل تشکیل شده از فاز γ نسبت به فاز α خواص اپتیکی، ساختاری و عملکرد فوتوولتائیک بهتری از خود نشان داد. این نتایج، نشان می‌دهند که فاز کریستالی یک زیرلایه می‌تواند نقشی فراتر از یک ساپورت ساختاری ایفا کند و با تعدیل خواص اپتیکی و ساختاری لایه پروسکایت، مستقیماً بازده سلول خورشیدی را تعیین می نماید.

۲- بخش تجربی

۲-۱- مواد و تجهیزات مورد استفاده

مواد: تیتانیوم ایزوپروپوکسید ۹۷٪، هیدرویدیک اسید، هیدروکلریک اسید، آلومینیوم سولفات، اتیلن گلیکول، آمونیوم سولفات، آمونیاک و متیل آمین- شرکت سیگما آلدریچ، دی متیل فرمامید (DMF[6])، دی‌متیل سولفوکسید

[1] Perovskite solar cell
[2] Power conversion efficiency
[3] Fluorine-doped tin oxide
[4] Hole transport layer
[5] Electron transport layer
[6] Dimethylformamide

(DMSO[1])، دی اتیل اتر، سیتریک اسید، اتیل سلولز، ترپینول، کلروبنزن و اتانول-شرکت مرک، سرب یدید (PbI_2)، $CuInS_2$ و FTO-شرکت شریف سولار.

تجهیزات مورد استفاده: دستگاه SEM[2] (TESCANVEGA3)، دستگاه پراش پرتو ایکس (XRD[3]-Bruker, D8 Advance)، دستگاه طیف جذب و بازتاب (LAMBDA 35 UV–Vis-near IR Spectrophotometer)، دستگاه اندازه گیری جریان–ولتاژ (Keithley 2400, AM 1.5G under 100 $mWcm^{-2}$ illumination)

۲-۲- سنتز فازهای α و γ اکسید آلومینیوم

مقادیر ۱/۳۲ گرم آمونیوم سولفات و ۶/۶۶ گرم آلومینیوم سولفات در ۱۰ میلی‌لیتر آب دیونیزه حل شدند. سپس محلول حاصل روی هات پلیت حرارت داده تا رسوب به رنگ سفید مایل به صورتی حاصل شود. ۱ میلی‌لیتر آمونیاک به پودر رسوب شده اضافه شد و با حرارت دادن خشک و پودر سفید آمونیوم آلومینیوم سولفات حاصل شد. مقدار ۴/۷۴ گرم از آمونیوم آلومینیوم سولفات به محلول ۲۵٪ آمونیاک اضافه و به مدت ۴ ساعت هم زده شد. در ادامه ۱۱/۶ گرم سیتریک اسید اضافه و مخلوط حاصل به مدت ۱ ساعت در دمای ۵۰ درجه سانتیگراد هم زده شد. سپس اتیلن گلیکول (۷/۷۲ گرم) به محلول اضافه و به مدت ۱ ساعت در دمای ۸۰ درجه سانتیگراد حرارت داده شد. در این مرحله محلول شفاف (Sol) به دست آمد. حلال‌ها با حرارت دادن در دمای ۱۳۰ درجه سانتیگراد حذف شدند و ژل به دست آمد. با پخت محصول نهایی در دمای ۹۵۰ درجه ساتی گراد به مدت ۳۰ دقیقه فاز γ اکسید آلومینیوم و با پخت آن در دمای ۱۱۰۰ درجه سانتی گراد و مدت ۳۰ دقیقه فاز α اکسید آلومینیوم بدست آمد.

۲-۳- تهیه خمیر Al_2O_3

ابتدا ۱۰ میلی لیتر آب دیونیزه و ۲ گرم پودر Al_2O_3 سنتز شده همراه با مگنت و به مدت ۵ دقیقه روی همزن مغناطیسی قرار داده شد. در ادامه و حین هم خوردن، ۲۰ میلی لیتر اتانول به مخلوط حاصل اضافه و به مدت ۱۰ دقیقه هم زده شد. ۳/۴ میلی لیتر ترپینول اضافه و به مدت ۱۵ دقیقه هم زده شد. در ادامه ۱ گرم اتیل سلولز اضافه و به مدت ۱۵ دقیقه هم زده شد. در نهایت مخلوط حاصل به مدت ۲۴ ساعت روی همزن مغناطیسی و در دمای ۷۰ درجه سانتی گراد قرار داده شد تا خمیر Al_2O_3 بدست آمد.

۲-٤- سنتز متیل آمونیوم یدید (MAI)

سنتز متیل آمونیوم یدید (MAI[4]) بر اساس روش‌های ذکر شده در مقالات انجام گرفت [۲۹]. در ابتدا ۳۰ mL از متیل آمین (۳۳ %wt در اتانول) و ۲۸ mL هیدرویدیک اسید (HI) در یک بالون با حجم ۱۵۰ mL در حمام یخ مخلوط شدند. اسید HI حین چرخش و به صورت قطره قطره اضافه شد. بعد از حدود ۲ ساعت پودر سفید رنگ در ته بالون ایجاد شد. رسوب ته نشین شده به مدت یک ساعت در دمای ۶۰ °C خشک شد. جهت انجام فرایند باز تبلور، پودر حاصل را در اتانول حل و با اضافه کردن دی اتیل اتر به آن فرایند ته‌نشین شدن تکرار شد. این مرحله چندبار تکرار و درنهایت ترکیب حاصل تحت دمای ۶۰ °C خشک شد تا پودر سفید رنگ و بلوری MAI بدست آید.

۲-۵- ساخت سلول پروسکایتی مزومتخلخل بر پایه Al_2O_3

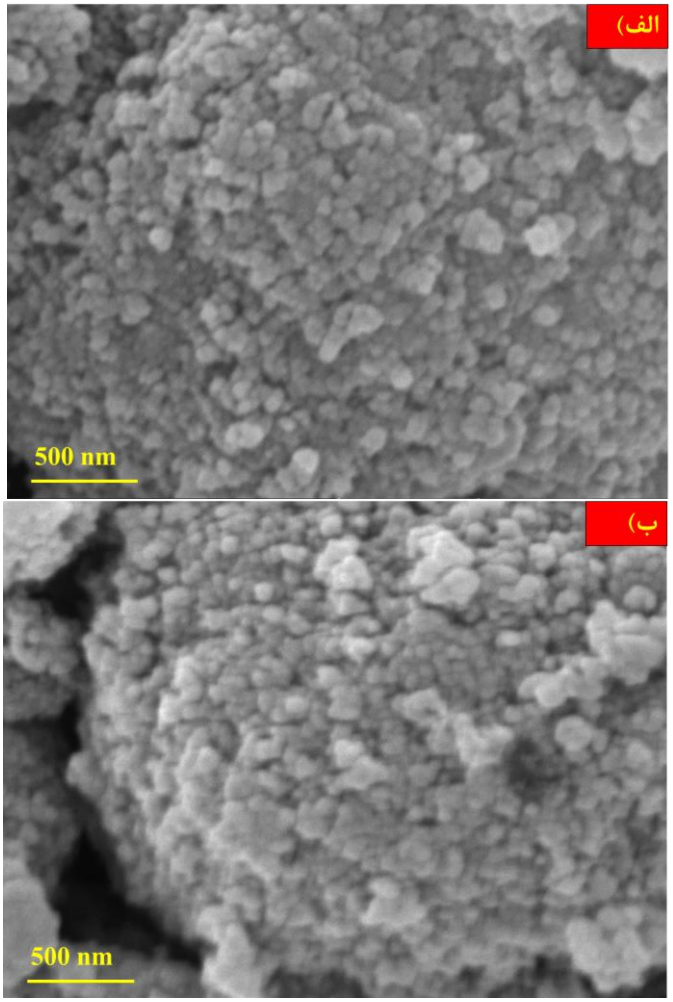
در ابتدا شیشه‌های رسانای FTO با استفاده از پودر روی و هیدروکلریک اسید اچ شده و سپس در حمام اولتراسونیک به ترتیب با آب صابون، آب دیونیزه، استون، اتانول و ایزوپروپانول و هر مرحله به مدت ۱۵ دقیقه شستشو داده و سپس در دستگاه آون در دمای ۱۰۰°C به مدت ۱۵ دقیقه خشک شدند. برای ایجاد لایه فشرده TiO_2 (C-TiO_2)، محلولی از تیتانیم ایزوپروپوکسید در هیدروکلریک اسید ۲ مولار و اتانول توسط دستگاه لایه-نشانی چرخشی با سرعت ۴۰۰۰ دور بر دقیقه به مدت ۶۰ ثانیه لایه‌نشانی و در دمای ۱۰۰°C به مدت ۱۵ دقیقه در آون خشک و در دمای ۵۰۰°C به مدت ۳۰ دقیقه پخت داده شد. لایه مزو متخلخل (Al_2O_3 MP-) (Al_2O_3 حاوی خمیر Al_2O_3 و اتانول (با نسبت ۱ به ۷) روی بستر FTO/C-TiO_2 با سرعت ۶۰۰۰ دور بر دقیقه به مدت ۶۰ ثانیه لایه-نشانی شد. نمونه‌ها در دمای 100 °C به مدت ۱۰ دقیقه در آون خشک و سپس در دمای 500 °C به مدت ۶۰ دقیقه پخت شدند. برای لایه‌نشانی لایه پروسکایت از روش دو مرحله ای غوطه وری استفاده شد و برای این منظور ابتدا محلول ۴۶۰ میلی گرم سرب یدید (PbI_2) در ۱ میلی لیتر DMF که به مدت ۱۲ ساعت در دمای ۷۰ درجه سانتیگراد هم خورده بود با سرعت ۴۰۰۰ دور بر دقیقه و زمان ۶۰ ثانیه روی زیرلایه FTO/C-TiO_2/MP-AL_2O_3 لایه نشانی و در دمای ۸۵ درجه سانتیگراد خشک شد و در ادامه در محلول ۸ میلی گرم بر میلی لیتر از MAI در ایزوپروپانول به مدت ۳ دقیقه غوطه ور شد. در نهایت به مدت ۲۰ دقیقه در دمای ۸۰ درجه سانتیگراد پخت داده شد تا لایه پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ تشکیل شود. از ماده $CuInS_2$ بعنوان لایه انتقال دهنده حفره استفاده شد و برای لایه نشانی چرخشی آن بر روی زیرلایه FTO/C-TiO_2/MP-AL_2O_3/$CH_3NH_3PbI_3$ از سرعت ۳۰۰۰ دور بر دقیقه و زمان ۴۵ ثانیه استفاده و در ادامه به مدت ۱۰ دقیقه در دمای ۱۰۰ درجه سانتیگراد پخت داده شد. در نهایت ۶۰ نانومتر طلا بعنوان الکترود کاتد بر روی لایه انتقال دهنده حفره و به روش کند و پاش لایه نشانی شد. ۱۰ سلول برای هر نمونه در نظر گرفته شد که در انتهای آزمایش برای هر نمونه ۸ سلول

[1] Dimethyl sulfoxide
[2] Scanning electron microscopy
[3] X-ray Diffraction
[4] Methylammonium Iodide

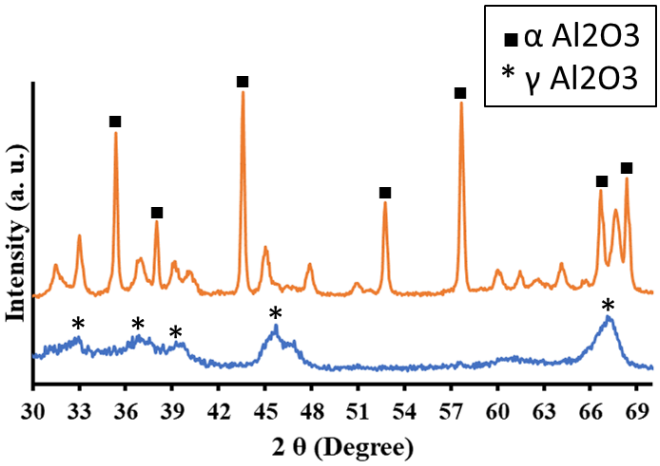
سالم که شرایط اندازه‌گیری پارامترهای فوتوولتائیک را داشتند بـرای تحلیـل استفاده شدند.

۳- نتایج و بحث

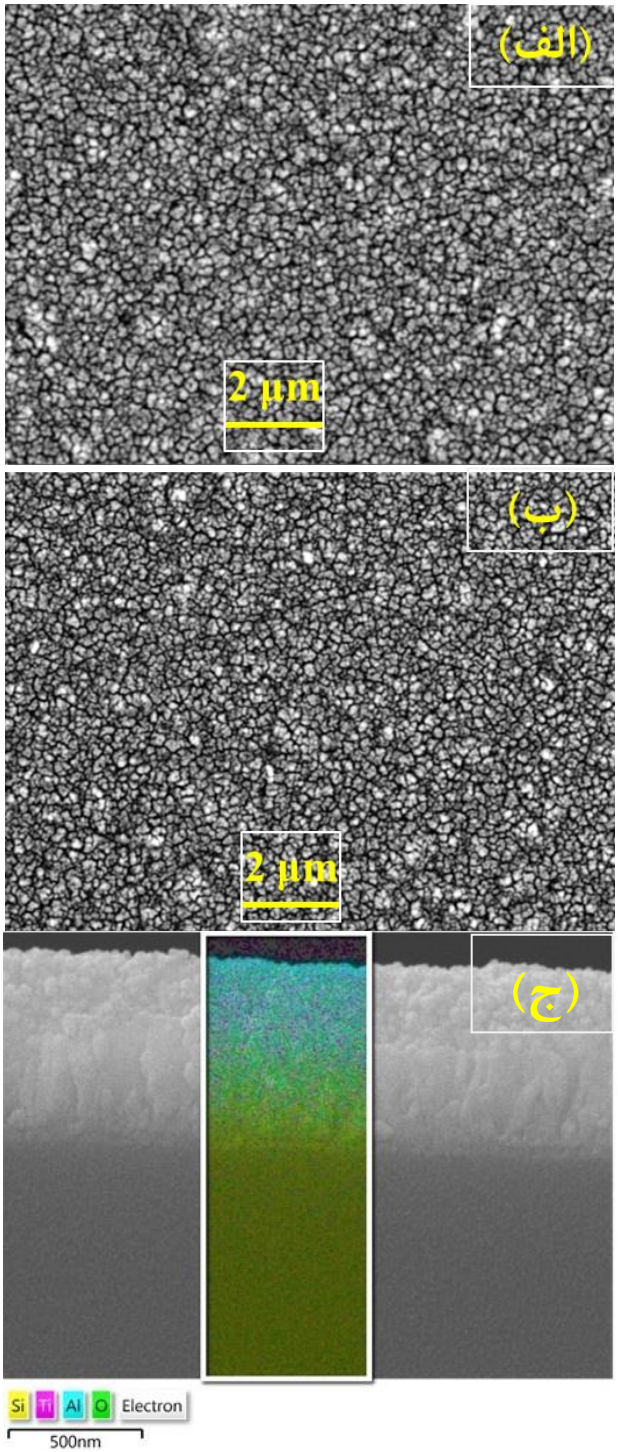
شکل ۱ تصویر SEM نمونه‌های سنتز شده و شکل‌های ۲ و ۳ به ترتیب تصویر مربوط به الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) فازهای γ و α اکسید آلومینیوم سنتز شده و تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) لایه $MP\text{-}Al_2O_3$ که روی زیرلایه $FTO/C\text{-}TiO_2$ لایه نشانی شده است همراه با نقشه توزیع عناصر مقطع عرضی را نشان می‌دهند. در الگوی XRD و برای فاز γ، پیک‌های ظاهر شده در زوایای ۳۲/۹۱، ۳۷/۱۱، ۳۹/۱۵، ۴۵/۷۵ و ۶۷/۴۱ درجه به ترتیب مربوط به صفحات (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۲۲۲)، (۴۰۰) و (۴۴۰) است. همچنین برای فاز α پیک‌های ظاهر شده در زوایای ۳۵/۳۷، ۳۸/۰۵، ۴۳/۵۹، ۵۲/۷۵، ۵۷/۶۹، ۶۶/۶۹ و ۶۸/۳۷ درجه به ترتیب مربوط به صفحات (۱۰۴)، (۱۱۰)، (۱۱۳)، (۰۲۴)، (۱۱۶)، (۲۱۴) و (۳۰۰) است [۳۰ و ۳۱].



شکل ۱: تصاویر SEM اکسید آلومینیوم سنتز شده: الف- فاز γ و ب- فاز α

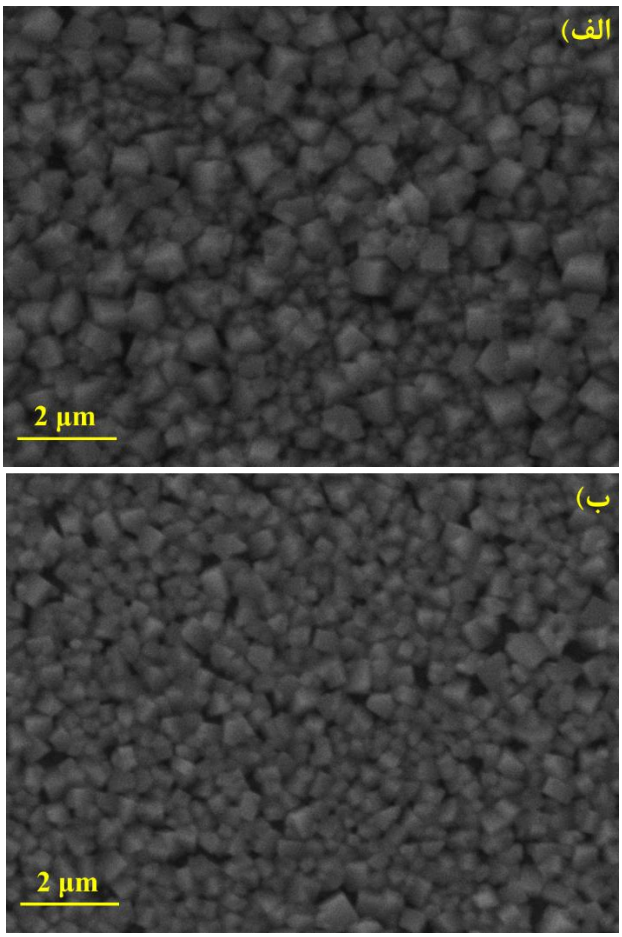


شکل ۲: الگوی XRD فازهای α و γ اکسید آلومینیوم سنتز شده



شکل ۳: تصاویر SEM مورفولوژی سطح لایه $MP\text{-}Al_2O_3$ لایه نشانی شده روی زیرلایه $FTO/C\text{-}TiO_2$: الف- فاز γ و ب- فاز α و ج- نقشه توزیع عناصر در مقطع عرضی

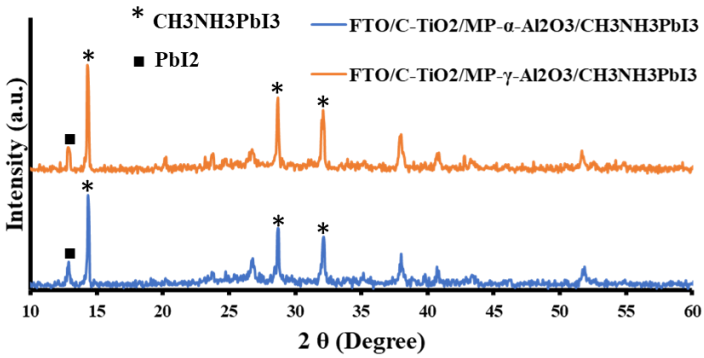
شکل ۴ تصاویر SEM لایه های پروسکایت لایه نشانی شده به روش دو مرحله ای غوطه وری با پیش ماده های PbI_2 و MAI را نشان می‌دهد که روی زیرلایه $FTO/C\text{-}TiO_2/MP\text{-}AL_2O_3$ لایه‌نشانی شده‌اند. همانطور که مشاهده می‌شود ریخت شناسی لایه پروسکایت لایه نشانی شده به صورت ساختارهای مکعبی است که کنار همدیگر قرار گرفته و سطح را پوشش داده‌اند. لایه پروسکایت لایه نشانی شده با زیرلایه $\gamma\text{-}Al_2O_3$ نسبت به نمونه با زیرلایه $\alpha\text{-}Al_2O_3$ از بلورهای بزرگتری تشکیل شده است که این موضوع می‌تواند به دلیل تخلخل بیشتر فاز γ نسبت به فاز α اکسید آلومینیوم باشد که نهایتا منجر به هسته زایی بهتر و تشکیل بلور بزرگتر برای لایه پروسکایت می‌شود [۳۲و۳۳]. متوسط اندازه بلور برای لایه پروسکایت با زیرلایه‌های γ و α اکسید آلومینیوم به ترتیب حدود ۴۷۰ و ۴۱۰ نانومتر است.



شکل ٤: تصاویر SEM لایه پروسکایت لایه نشانی شده بر روی الف- $FTO/C\text{-}TiO_2/MP\text{-}\gamma\text{-}Al_2O_3$ و ب- $FTO/C\text{-}TiO_2/MP\text{-}\alpha\text{-}Al_2O_3$

در شکل ۵ الگوی XRD لایه‌های پروسکایت فوق الذکر نشان داده شده است. پیک‌های موجود در زوایای ۱۴/۳۵، ۲۸/۷۵ و ۳۲/۱۵ درجه به ترتیب مربوط به صفحات (۱۱۰)، (۲۲۰) و (۳۱۰) بلور پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ نسبت داده می‌شود [۳۴]. قله ظاهر شده در زاویه ۱۲/۸۵ درجه مربوط به پیش ماده سرب یدید است که بعنوان ناخالصی لایه پروسکایت درنظر گرفته می‌شود. شدت پیک‌های مربوط به پروسکایت لایه

نشانی شده بر فاز γ اکسید آلومینیوم نسبت به پروسکایت لایه نشانی شده بر فاز α اکسید آلومینیوم بیشتر است که این موضوع نشان دهنده بلورینگی بیشتر و در نتیجه خواص فوتوولتائیک بیشتر برای پروسکایت لایه نشانی شده بر فاز γ اکسید آلومینیوم است [۳۵].



شکل ۵: الگوی XRD پروسکایت لایه نشانی شده بر فازهای α و γ اکسید آلومینیوم

با تجزیه و تحلیل الگوی XRD لایه پروسکایت می‌توان اطلاعات مربوط به فاکتورهای هندسی و میزان منظم بودن رشد بلور این لایه را مورد بررسی قرار داد. برای این منظور از روابط زیر برای محاسبه پارامترهای اندازه بلورک (D)، میکروکرنش (ε)، چگالی نابجایی (δ) و فاصله بین سطحی (d) لایه‌های پروسکایت فوق الذکر استفاده شد [۳۶].

$$D = 0.9\frac{\lambda}{\beta\ cos\theta} \quad (1)$$

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

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

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

که λ طول موج پرتو ایکس (۰/۱۵۴۰۶ nm)، θ زاویه پراش براگ بر حسب رادیان، β پهنا در نصف مقدار بیشینه (FWHM)، m ثابت برابر با واحد و n مرتبه پراش است. نتایج این محاسبات و همچنین پارامترها و حجم سلول واحد شبکه پروسکایت‌های لایه نشانی شده در جداول ۱ و ۲ آورده شده است.

جدول ۱: پارامترهای میکروکرنش، چگالی نابجایی و اندازه بلورک پروسکایت با زیرلایه‌های مختلف

زیرلایه پروسکایت	ε (*۳ ۱۰⁻)	δ(*۴ ۱۰⁻)	FWHM(*۳ ۱۰⁻)	D(nm)
FTO/C-TiO_2/MP-γ-Al_2O_3	۳/۸۷	۴/۷۶	۳/۲۵	۴۵/۸۲
FTO/C-TiO_2/MP-α-Al_2O_3	۴/۰۲	۵/۱۰	۳/۳۷	۴۴/۲۹

جدول ۲: پارامترهای شبکه و حجم سلول واحد شبکه مربوط به پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ با زیرلایه‌های مختلف

زیرلایه پروسکایت	a(Å)	c(Å)	Volume($Å^3$)
FTO/C-TiO_2/MP-γ-Al_2O_3	۸/۸۰۴۱۰۲	۱۳/۳۱۳۲۸	۱۰۳۱/۹۴۱۷۸
FTO/C-TiO_2/MP-α-Al_2O_3	۸/۸۱۴۶۰۵	۱۳/۳۱۳۲۵	۱۰۳۴/۴۰۳۰۶

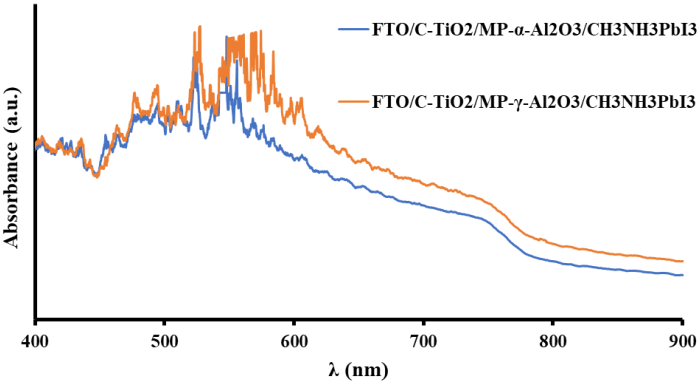
چگالی نابجایی به نقایص شبکه لایه پروسکایت اشاره دارد و پارامتر میکروکرنش نشان می‌دهد که چقدر اتم‌های لایه پروسکایت از موقعیت‌های شبکه مرجع خود جابجا شده‌اند. جدول ۱ نشان می‌دهد که پارامترهای میکروکرنش و چگالی نابجایی برای پروسکایت با زیرلایه FTO/C-TiO_2/MP-α-Al_2O_3 بیشتر از نمونه با زیرلایه FTO/C-TiO_2/MP-γ-Al_2O_3 است. مشاهده شد که اندازه بلورک لایه پروسکایت با زیرلایه MP-γ-Al_2O_3 نسبت به نمونه با زیرلایه MP-α-Al_2O_3 بزرگتر است. این نتایج نشان می‌دهد که پروسکایت با زیرلایه MP-γ-Al_2O_3 دارای عیوب شبکه کمتری است و می‌تواند منجر به خواص فتوولتائیک بهتری در سلول‌های خورشیدی پروسکایتی شود [۳۷]. همان‌طور که در جدول ۲ نشان داده شده است، تغییر زیرلایه بر خواص ساختاری فیلم پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ مانند حجم سلول واحد و پارامترهای شبکه تاثیر می‌گذارد. برهمکنش‌های بین یون‌های مختلف در ساختار فیلم پروسکایت مسئول تغییر در پارامترهای شبکه هستند و همچنین این برهمکنش‌ها بر ساختار شکاف نواری و عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی تأثیر می‌گذارند [۳۸]. همچنین برای نمونه با زیرلایه MP-γ-

Al_2O_3 انقباض شبکه مشاهده می‌شود که می‌تواند پایداری لایه پروسکایت را افزایش دهد [۳۹].

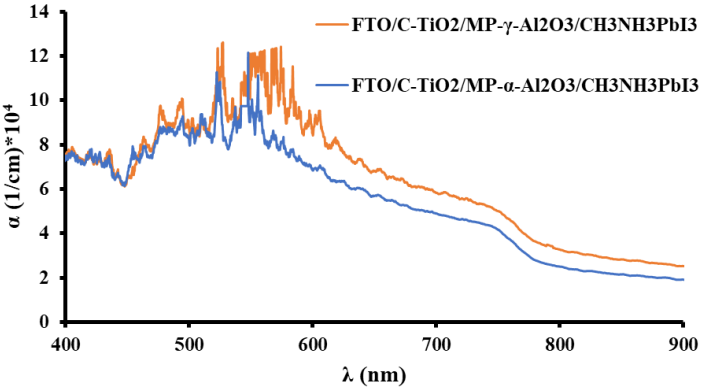
شکل‌های ۶ و ۷ به ترتیب طیف جذب و تغییرات ضریب جذب لایه‌های پروسکایت ذکر شده را در بازه طول موجی ۴۰۰–۹۰۰ نشان می‌دهد. برای هر دو نمونه پروسکایت لبه جذب در طول موج حدود ۷۸۰ نانومتر است. برای محاسبه ضریب جذب از رابطه زیر استفاده شده است [۴۰]:

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

که A و d به ترتیب جذب و ضخامت لایه پروسکایت هستند. ضخامت لایه پروسکایت برای هر دو نمونه ۶۸۰ نانومتر در نظر گرفته شده است.



شکل ٦: طیف جذب پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ با زیرلایه‌های مختلف

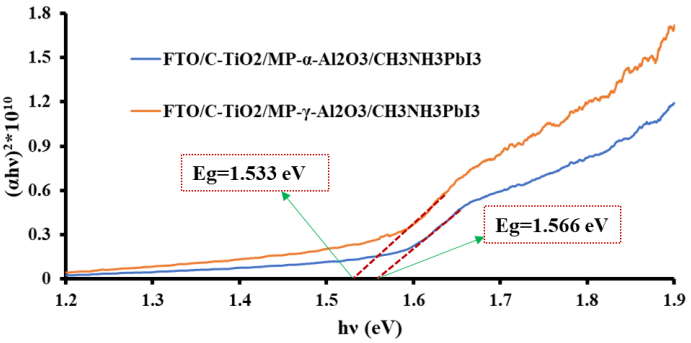


شکل ۷: تغییرات ضریب جذب لایه پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ با زیرلایه‌های مختلف

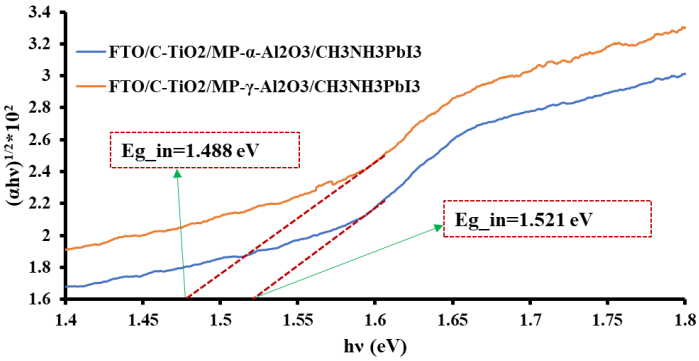
روند تغییرات مربوط به نمودار شکل‌های ۵ و ۶ یکسان است که این موضوع باتوجه به رابطه ۵ قابل انتظار است. برای بازه طول موجی حدود ۵۵۰ تا ۹۰۰ نانومتر جذب لایه پروسکایت با زیرلایه FTO/C-TiO_2/MP-γ-Al_2O_3 نسبت به نمونه دیگر بیشتر است که می‌تواند منجر به تولید زوج الکترون–حفره بیشتر در لایه پروسکایت و در نتیجه بهبود عملکرد فوتوولتائیک سلول خورشیدی پروسکایتی شود. با استفاده طیف جذب اندازه-گیری شده برای لایه پروسکایت، می‌توان گاف‌های اپتیکی مستقیم و غیرمستقیم این لایه را بدست آورد. برای این منظور از رابطه مربوط به قانون Tauk استفاده شد [۳۴]:

$$\alpha h\nu = (h\nu - E_g)^n \qquad (6)$$

که در این رابطه h و Eg به ترتیب ثابت پلانک و گاف انرژی هستند. برای گاف انرژی مستقیم مقدار n برابر با ۰/۵ و برای گاف انرژی غیرمستقیم مقدار n برابر با ۲ است. شکل‌های ۸ و ۹ به ترتیب مقادیر مربوط به گاف انرژی مستقیم و گاف انرژی غیرمستقیم را برای لایه پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ با زیرلایه‌های متفاوت را نشان می‌دهد. گاف انرژی مستقیم برای لایه پروسکایت با زیرلایه FTO/C-TiO_2/MP-α-Al_2O_3 برابر با ۱/۵۶۶ eV بدست آمد و در مقایسه با مقدار این کمیت برای لایه پروسکایت با زیرلایه FTO/C-TiO_2/MP-γ-Al_2O_3 (۱/۵۳۳ eV)، مقدار بیشتری از خود نشان داد که در توافق با طیف جذب این لایه‌ها در شکل ۷ بود. همچنین گاف غیرمستقیم مربوط به لایه پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ برای هر دو زیرلایه، حدود ۰/۰۴۵ الکترون‌ولت کمتر از گاف انرژی مستقیم به‌دست آمد. این اختلاف می‌تواند با پدیده شکافتگی راشبا که در برخی پروسکایت‌های هیبریدی گزارش شده است، مرتبط باشد. با این حال، با توجه به اینکه نتایج این پژوهش بر پایه طیف جذب و تحلیل نمودارهای Tauc است، نسبت دادن قطعی این اختلاف به اثر راشبا امکان‌پذیر نیست و تأیید مستقیم این پدیده نیازمند استفاده از روش‌های تکمیلی مانند طیف‌سنجی نشر فوتوالکترون تفکیک‌شده زاویه‌ای (ARPES)، فوتولومینسانس وابسته به دما یا طیف‌سنجی تفکیک زمانی است [۴۱].



شکل ۸: گاف انرژی مستقیم لایه پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ با زیرلایه-های متفاوت

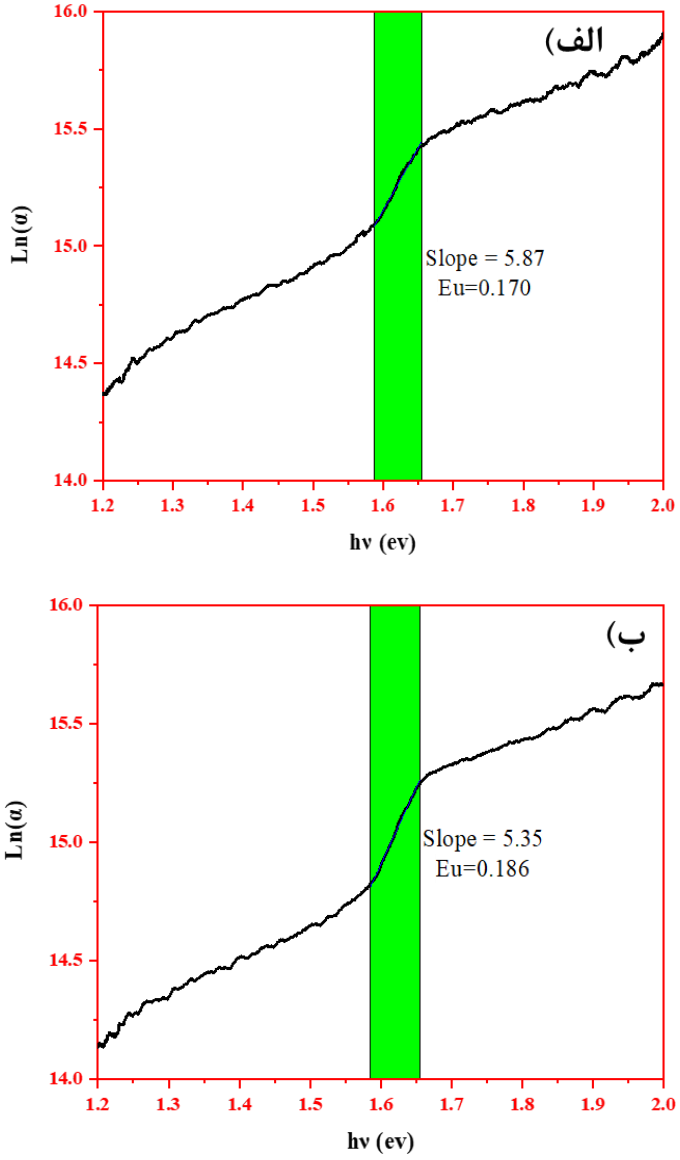


شکل ۹: گاف انرژی غیرمستقیم لایه پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ با زیرلایه‌های متفاوت

انرژی اورباخ به عنوان معیاری از بی‌نظمی انرژی، یک ویژگی مهم نیمه‌هادی‌ها برای ارزیابی عملکرد اپتوالکترونیکی آنها است. در پژوهش‌های زیادی ارتباط انرژی اورباخ با خواص ساختاری و اپتوالکترونیکی و در نتیجه با عملکرد اپتوالکترونیکی نیمه‌هادی ها بررسی شده است [۴۲-۴۴]. به‌طورکلی، مقادیر کوچک انرژی اورباخ نشان‌دهنده‌ی کیفیت ساختاری بالای ماده و همچنین خواص الکترونیکی عالی، مانند تحرک‌پذیری بالای حامل‌های بار است. انرژی اورباخ را می‌توان با استفاده طیف جذب و طبق رابطه زیر بدست آورد [۴۵]:

$$\alpha = \alpha_0 \exp\left(\frac{E}{E_u}\right) \qquad (7)$$

که در این رابطه پارامترهای α_0، E و E_u به ترتیب مقدار ثابت، انرژی نور فرودی و انرژی اورباخ هستند. شکل ۱۰ مقادیر انرژی اورباخ را برای پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ با زیرلایه‌های FTO/C-TiO2/MP-γ-Al_2O_3 و FTO/C-TiO2/MP-α-Al_2O_3 نشان می‌دهد. کمتر بودن انرژی اورباخ برای پروسکایت با زیرلایه FTO/C-TiO2/MP-γ-Al_2O_3 نسبت به نمونه دیگر نشان دهنده نواقص ساختاری کمتر و همچنین عملکرد فوتوولتائیک بهتر برای این نمونه است.



شکل ۱۰: انرژی اورباخ لایه پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ با زیرلایه: الف) FTO/C-TiO2/MP-α-Al_2O_3 و ب) FTO/C-TiO2/MP-γ-Al_2O_3

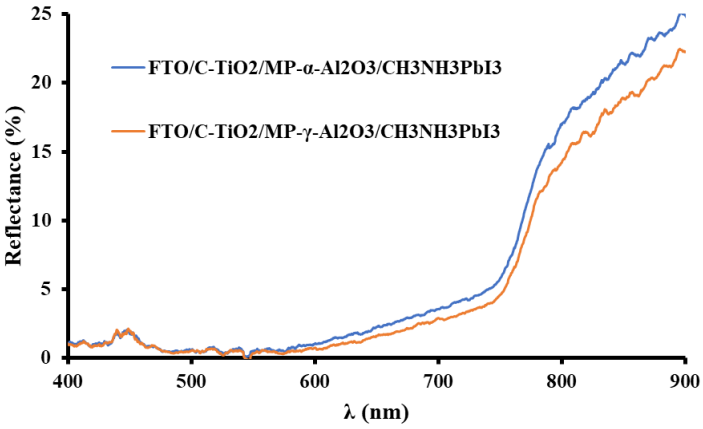
با استفاده از طیف‌های جذب و بازتاب لایه پروسکایت، می‌توان پارامترهای اپتیکی این لایه مانند ضریب خاموشی (k) و ضریب شکست (n) مربوط به این لایه را بدست آورد. برای این منظور از روابط زیر استفاده شد [۳۴]:

$$k = \frac{\alpha\lambda}{4\pi} \qquad (8)$$

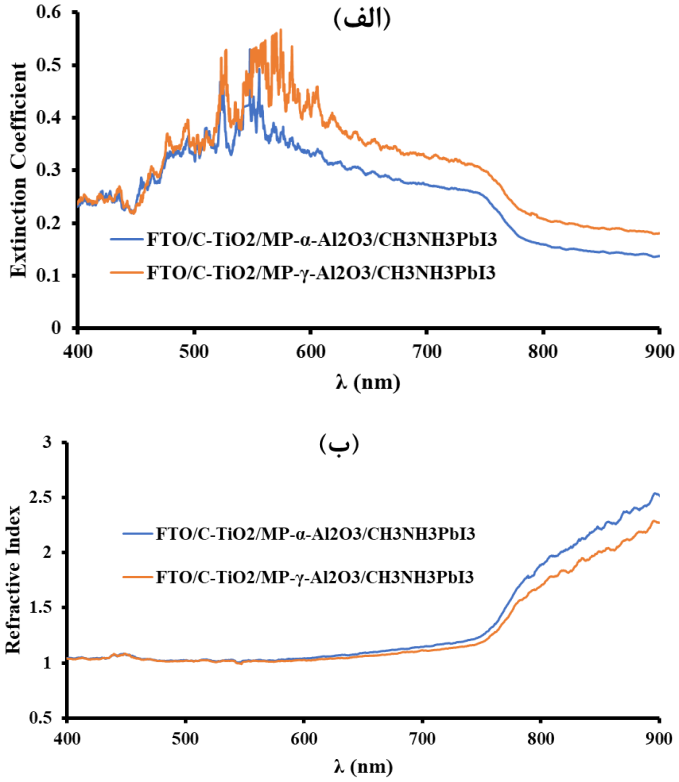
$$n = \frac{1+R}{1-R} + \sqrt{\frac{4R}{(1-R)^2} - k^2} \qquad (9)$$

که در روابط فوق λ و R به ترتیب طول موج نور فرودی و ضریب بازتاب هستند. شکل‌های ۱۱ و ۱۲ به ترتیب تغییرات طیف بازتاب و پارامترهای

اپتیکی k و n مربوط به لایه پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ با زیرلایه‌های مختلف را در بازه طول موجی ۴۰۰–۹۰۰ نانومتر نشان می‌دهد. مطابق با رابطه مربوط به پارامتر ضریب خاموشی، روند تغییرات این کمیت متناظر با تغییرات ضریب جذب لایه پروسکایت (شکل ۶) می‌باشد. تغییرات ضریب شکست لایه پروسکایت در بازه حدود ۱ تا ۲/۵ قرار دارد و از طول موج حدود ۶۵۰ نانومتر به بعد، مقدار ضریب شکست برای نمونه با زیرلایه $FTO/C\text{-}TiO_2/MP\text{-}\gamma\text{-}Al_2O_3$ نسبت به نمونه دیگر کمتر است که می‌تواند به دلیل عیوب ساختاری کمتر برای لایه پروسکایت مربوط به این نمونه باشد [۴۶].

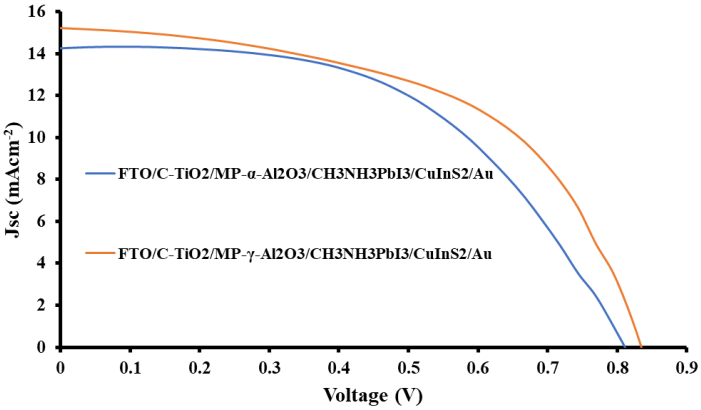


شکل ۱۱: طیف بازتاب لایه پروسکایت با زیرلایه‌های مختلف



شکل ۱۲: تغییرات الف) ضریب خاموشی و ب) ضریب شکست لایه پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ با زیرلایه‌های مختلف در بازه طول موجی ۴۰۰–۹۰۰ نانومتر

شکل ۱۳ منحنی تغییرات جریان–ولتاژ سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با ساختارهای $FTO/C\text{-}TiO_2/MP\text{-}\gamma\text{-}Al_2O_3/CH_3NH_3PbI_3/CuInS_2/Au$ و $FTO/C\text{-}TiO_2/MP\text{-}\alpha\text{-}Al_2O_3/CH_3NH_3PbI_3/CuInS_2/Au$ و جدول ۳ پارامترهای فوتوولتائیک مربوط به آنها را نشان می‌دهد. مقادیر به صورت میانگین ± انحراف معیار برای ۸ سلول مستقل گزارش شده‌اند. اختلاف بین دو گروه با استفاده از آزمون t مستقل بررسی شد و برای تمامی پارامترهای فوتوولتائیک اختلاف از نظر آماری معنی‌دار بود ($P<0/05$).



شکل ۱۳: نمودار جریان-ولتاژ سلول خورشیدی پروسکایتی با زیرلایه‌های متفاوت برای لایه پروسکایت

جدول ۳: پارامترهای فوتوولتائیک سلول‌های خورشیدی پروسکایتی با زیرلایه‌های متفاوت برای لایه پروسکایت

زیرلایه پروسکایت	Voc (V)	Jsc ($mAcm^{-2}$)	FF	Efficiency (%)
FTO/C-TiO_2/MP-γ-Al_2O_3	0.84±0.02	15.22±0.37	0.54±0.01	6.81±0.13
FTO/C-TiO_2/MP-α-Al_2O_3	0.81±0.02	14.25±0.34	0.53±0.01	6.03±0.11

سلول خورشیدی با ساختار FTO/C-TiO_2/MP-γ-Al_2O_3/$CH_3NH_3PbI_3$/$CuInS_2$/Au نسبت به نمونه دیگر بازدهی بیشتری را نشان داد که بر اساس اطلاعات جدول ۳، این تفاوت بازدهی بیشتر متاثر از پارامترهای چگالی جریان و ولتاژ مدار باز سلول‌های خورشیدی ساخته شده است. از آنجا که لایه پروسکایت با زیرلایه FTO/C-TiO_2/MP-γ-Al_2O_3 نسبت به نمونه با زیرلایه FTO/C-TiO_2/MP-α-Al_2O_3 بلورینگی بیشتر، نواقص ساختاری کمتر و جذب اپتیکی بیشتری را از خود نشان داد، سلول خورشیدی پروسکایتی ساخته شده با آن نیز پارامترهای فوتوولتائیک بهتر و در نتیجه بازدهی بیشتری را نشان داد. همچنین مطابق با تصاویر SEM، لایه پروسکایت با زیرلایه FTO/C-TiO_2/MP-γ-Al_2O_3 نسبت به نمونه دیگر از بلورهای بزرگتری تشکیل شده بود که این موضوع باعث افزایش چگالی جریان و ولتاژ مدار باز سلول خورشیدی پروسکایتی متناظر با آن می‌شود. گرچه بازده تبدیل توان سلول‌های خورشیدی ساخته‌شده در این پژوهش نسبت به بالاترین مقادیر گزارش‌شده برای سلول‌های خورشیدی پروسکایتی کمتر است، باید توجه داشت که هدف اصلی این مطالعه دستیابی به بیشترین بازده نبوده، بلکه بررسی تأثیر فاز بلوری لایه مزومتخلخل Al_2O_3بر خواص ساختاری، اپتیکی و عملکرد فتوولتائیک لایه پروسکایت بوده است. در این راستا، تمامی شرایط ساخت سلول ثابت نگه داشته شد و تنها فاز بلوری اکسید آلومینیوم به‌عنوان متغیر پژوهش تغییر یافت. همچنین استفاده از ساختار FTO/C-TiO_2/MP-Al_2O_3/$CH_3NH_3PbI_3$/$CuInS_2$/Au، بهره‌گیری از پروسکایت تک‌کاتیونی $CH_3NH_3PbI_3$ و عدم بهینه‌سازی سایر اجزای سلول و شرایط ساخت، از جمله عوامل مؤثر بر محدود بودن بازده تبدیل توان در این پژوهش هستند.

٤- نتیجه گیری

در این پژوهش، تأثیر فاز بلوری اکسید آلومینیوم مزومتخلخل بر کیفیت اپتیکی و ساختاری لایه پروسکایت $CH_3NH_3PbI_3$ و عملکرد سلول‌های خورشیدی پروسکایتی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که تغییر فاز زیرلایه از α-Al_2O_3 به γ-Al_2O_3 تأثیر قابل‌توجهی بر رشد بلوری و خواص اپتیکی لایه پروسکایت دارد. آنالیزهای XRD و SEM نشان دادند که استفاده از γ-Al_2O_3 موجب افزایش اندازه بلورک از ۴۴/۲۹ به ۴۵/۸۲ نانومتر و افزایش اندازه متوسط بلورهای پروسکایت از ۴۱۰ به ۴۷۰ نانومتر شده است که بیانگر بهبود فرایند تبلور، کاهش مرزدانه‌ها و در نتیجه کاهش مراکز بازترکیب است. بررسی خواص اپتیکی نیز نشان داد که لایه پروسکایت رشد یافته بر روی γ-Al_2O_3 دارای جذب نوری بیشتر، گاف انرژی کوچک‌تر و انرژی اورباخ کمتر است. کاهش انرژی اورباخ از ۰/۱۸۶ به ۰/۱۷۰ eV بیانگر کاهش بی‌نظمی ساختاری و نقص‌های موضعی در لایه پروسکایت است. همچنین، مشاهده اختلاف ۰/۰۴۵ eV بین گاف‌های انرژی مستقیم و غیرمستقیم در هر دو نمونه می‌تواند با پدیده شکافتگی راشبا همخوانی داشته باشد، هرچند تأیید قطعی این پدیده مستلزم استفاده از روش‌های تکمیلی مانند ARPES، فوتولومینسانس وابسته به دما یا طیف‌سنجی تفکیک زمانی است. بهبود همزمان خواص ساختاری و اپتیکی در نمونه مبتنی بر γ-Al_2O_3 منجر به افزایش پارامترهای فتوولتائیک شد؛ به‌طوری‌که Voc از ۰/۸۱ به ۰/۸۴ V، چگالی جریان اتصال کوتاه از ۱۴/۲۵ به ۱۵/۲۲ $mAcm^{-2}$ و بازده تبدیل توان از ۶/۰۱٪ به ۶/۸۱٪ افزایش یافت. این نتایج نشان می‌دهد که فاز γ-Al_2O_3 با فراهم کردن بستر مناسب‌تر برای رشد لایه پروسکایت، نقش مؤثری در بهبود کیفیت ساختاری و اپتیکی لایه و افزایش عملکرد اولیه سلول‌های خورشیدی پروسکایتی ایفا می‌کند. با این حال، از آنجا که در این پژوهش آزمون‌های پایداری بلندمدت سلول‌های خورشیدی انجام نشده است، نتیجه‌گیری حاضر صرفاً به عملکرد اولیه سلول‌ها محدود می‌شود و درباره تأثیر فاز اکسید

آلومینیوم بعنوان زیرلایه مزومتخلخل لایه پروسکایت بر پایداری بلندمدت سلول‌ها نمی‌توان اظهار نظر قطعی کرد. انجام آزمون‌های پایداری در شرایط مختلف محیطی و عملیاتی می‌تواند موضوع پژوهش‌های آینده باشد.

تشکر و قدردانی

این پژوهش در قالب طرح پژوهشی شماره ۰۴/۱۸۰۶ 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] Zhang L, Zhang M, Wang H, Li Z, Zhang Z, Song Y, Song X, Wang S, Chen J, Li W, Dong H. Diverse perovskite solar cells: progress, challenges, and perspectives. Advanced Materials. 2026 Jan;38(1):e12221.

[2] Jia S, Gu C, Zhou X, Miao Y, Tian Y, Wen S, Ma J, Bao X. Self-Assembled Monolayers for High-Performance Perovskite Solar Cells. Advanced Functional Materials. 2026 Feb;36(12):e12747.

[3] Pan Q, Zhong Q, Pu J, Yu G, Chen J, Cao M, Feng B. Perovskite solar cells towards industrialization: Overcoming challenges with data-driven strategies. Nanoscale. 2026.

[4] Li G, Zhang Z, Agyei-Tuffour B, Wu L, Gries TW, Prashanthan K, Frohloff L, Musiienko A, Li J, Zhu R, Hart LJ. Stabilizing high-efficiency perovskite solar cells via strategic interfacial contact engineering. Nature Photonics. 2026 Jan;20(1):55-62.

[5] Seyisi T, Fouda-Mbanga BG, Mnyango JI, Nthwane YB, Nyoni B, Mhlanga S, Hlangothi SP, Tywabi-Ngeva Z. Major challenges for commercialization of perovskite solar cells: A critical review. Energy Reports. 2025 Jun 1;13:1400-15.

[6] Sewela T, Ocaya RO, Malevu TD. Recent insights into the transformative role of Graphene-based/TiO_2 electron transport layers for perovskite solar cells. Energy Science & Engineering. 2025 Jan;13(1):4-26.

[7] Yan H, Zhao X, Huang H, Wu D, Zhu P, Li D, Fan B, Qiu Y, Yang Y, Geng Q, Cui P. Flocculating-regulated TiO_2 deposition enables the synergistic effect of doping for perovskite solar cells with efficiency exceeding 25.8%. Advanced Energy Materials. 2025 Feb;15(8):2403200.

[8] Abadi SP, Zarandi MB, Zadeh NJ. Synthesis methods of NiO_x nanoparticles and its effect on hole conductivity and stability of nip perovskite solar cells. Synthetic Metals. 2022 Sep 1;289:117115.

[9] Kot M, Gawlińska-Nęcek K, Henkel K, Flege JI. Prospects of improving efficiency and stability of hybrid perovskite solar cells by alumina ultrathin films. Small. 2025 Mar;21(12):2408435.

[10] Zhou J, Tan L, Liu Y, Li H, Liu X, Li M, Wang S, Zhang Y, Jiang C, Hua R, Tress W. Highly efficient and stable perovskite solar cells via a multifunctional hole transporting material. Joule. 2024 Jun 19;8(6):1691-706.

[11] Xiong Z, Zhang Q, Cai K, Zhou H, Song Q, Han Z, Kang S, Li Y, Jiang Q, Zhang X, You J. Homogenized chlorine distribution for> 27% power conversion efficiency in perovskite solar cells. Science. 2025 Nov 6;390(6773):638-42.

[12] Mujahid A, Khan MY, Uddin MM, Alamer FA, Alsalmi O, Rasheduzzaman M, Hasan MZ. Computational modeling and photovoltaic performance evaluation of various ETL/HTL engineered $CsCdI_3$-based perovskite solar cell architectures. RSC advances. 2025;15(39):32679-707.

[13] Zhang SY, Guo X, Xu YM, Jiao Y, Lin ZH, Zhang JC, Ouyang JY, Guo LX, Hao Y, Chang JJ. Optimizing ETL/$CsPbBr_3$ buried interface contact for enhanced efficiency and stability of inorganic perovskite solar cells. Rare Metals. 2025 May;44(5):3069-79.

[14] Muppana VN, Samykano M, Pandey AK, Keng NW, Rajamony RK, Suraparaju SK. Optimizing charge transport and bandgap alignment of ETL and HTL in Tin-based perovskite

a porous Al_2O_3 buffer layer. The journal of physical chemistry letters. 2015 Feb 5;6(3):432-7.

[24] Qiu Q, Liu H, Qin Y, Ren C, Song J. Efficiency enhancement of perovskite solar cells based on Al_2O_3-passivated nano-nickel oxide film. Journal of Materials Science. 2020 Oct;55(28):13881-91.

[25] Singh R, Ghosh S, Subbiah AS, Mahuli N, Sarkar SK. ALD Al_2O_3 on hybrid perovskite solar cells: Unveiling the growth mechanism and long-term stability. Solar Energy Materials and Solar Cells. 2020 Feb 1;205:110289.

[26] Qiang Y, Xie Y, Qi Y, Wei P, Shi H, Geng C, Liu H. Enhanced performance of carbon-based perovskite solar cells with a Li^+-doped SnO_2 electron transport layer and Al_2O_3 scaffold layer. Solar Energy. 2020 May 1;201:523-9.

[27] Numata Y, Sanehira Y, Miyasaka T. Impacts of heterogeneous TiO_2 and Al_2O_3 composite mesoporous scaffold on formamidinium lead trihalide perovskite solar cells. ACS Applied Materials & Interfaces. 2016 Feb 24;8(7):4608-15.

[28] Abdi N, Abdi Y, Alemipour Z. Effects of morphology and thickness of Al_2O_3 scaffold on charge transport in Perovskite-based solar cells. Solar Energy. 2017 Sep 1;153:379-82.

[29] Zadeh NJ, Zarandi MB, Nateghi MR. Optical properties of the perovskite films deposited on meso-porous TiO_2 by one step and hot casting techniques. Thin Solid Films. 2019 Feb 1;671:139-46.

[30] Jbara AS, Othaman Z, Ati AA, Saeed MA. Characterization of γ-Al_2O_3 nanopowders synthesized by Co-precipitation method. Materials Chemistry and Physics. 2017 Feb 15;188:24-9.

[31] Su J, Liu Y, Peng X, Sun G, Jiang X. Preparation of α-Al_2O_3 by low-temperature calcining γ-Al_2O_3 with α-phase seed in-situ obtained by ball milling. Materials Today Communications. 2023 Aug 1;36:106681.

[32] Lee JW, Lee DK, Jeong DN, Park NG. Control of crystal growth toward scalable fabrication of solar cells via machine learning. Materials Today Communications. 2025 Jun 1;46:112874.

[15] Zadeh NJ, Zarandi MB, Nateghi MR. Effect of crystallization strategies on $CH_3NH_3PbI_3$ perovskite layer deposited by spin coating method: dependence of photovoltaic performance on morphology evolution. Thin Solid Films. 2018 Aug 30;660:65-74.

[16] Zang L, Zhao C, Hu X, Tao J, Chen S, Chu J. Emerging trends in electron transport layer development for stable and efficient perovskite solar cells. Small. 2024 Jun;20(26):2400807.

[17] Kumar A, Singh S, Sharma A, Ahmed EM. Efficient and stable perovskite solar cells by interface engineering at the interface of electron transport layer/perovskite. Optical Materials. 2022 Oct 1;132:112846.

[18] Si H, Liao Q, Zhang Z, Li Y, Yang X, Zhang G, Kang Z, Zhang Y. An innovative design of perovskite solar cells with Al_2O_3 inserting at ZnO/perovskite interface for improving the performance and stability. Nano Energy. 2016 Apr 1;22:223-31.

[19] Ajdič Ž, Jošt M, Topič M. The effect of Al_2O_3 on the performance of perovskite solar cells. Solar RRL. 2024 Jun;8(12):2400247.

[20] Yang ZL, Zhang ZY, Fan WL, Hu CS, Zhang L, Qi JJ. High-performance g-C_3N_4 added carbon-based perovskite solar cells insulated by Al2O3 layer. Solar Energy. 2019 Nov 15;193:859-65.

[21] Lee MM, Teuscher J, Miyasaka T, Murakami TN, Snaith HJ. Efficient hybrid solar cells based on meso-superstructured organometal halide perovskites. science. 2012 Nov 2;338(6107):643-7.

[22] Choi EY, Kim J, Lim S, Han E, Ho-Baillie AW, Park N. Enhancing stability for organic-inorganic perovskite solar cells by atomic layer deposited Al_2O_3 encapsulation. Solar Energy Materials and Solar Cells. 2018 Dec 15;188:37-45.

[23] Guarnera S, Abate A, Zhang W, Foster JM, Richardson G, Petrozza A, Snaith HJ. Improving the long-term stability of perovskite solar cells with

perovskite solar cells. Advanced Functional Materials. 2019 Nov;29(47):1807047.

[33] Listorti A, Juarez-Perez EJ, Frontera C, Roiati V, Garcia-Andrade L, Colella S, Rizzo A, Ortiz P, Mora-Sero I. Effect of mesostructured layer upon crystalline properties and device performance on perovskite solar cells. The Journal of Physical Chemistry Letters. 2015 May 7;6(9):1628-37.

[34] Nakhaee B, Zarandi MB, Zadeh NJ. Deciphering the role of antisolvent on the structural and optical properties of $CH_3NH_3PbI_3$ film and its impacts on the performance and stability of nip perovskite solar cells. Optical Materials. 2023 Feb 1;136:113421.

[35] Yang Z, Niu Y, Zhang X, Zhang Z, Hu L. Efficiency improvement of semi-transparent perovskite solar cells via crystallinity enhancement. Journal of Materials Chemistry A. 2023;11(6):3070-9.

[36] Nakhaee B, Borhani Zarandi M, Jahanbakhshi Zadeh N. Optical and structural engineering of $CH_3NH_3PbI_3$ film via CB-antisolvent for efficient and stable perovskite solar cells. Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2023 May;34(13):1094.

[37] Lei Y, Xu Y, Wang M, Zhu G, Jin Z. Origin, influence, and countermeasures of defects in perovskite solar cells. Small. 2021 Jul;17(26):2005495.

[38] Listorti A, Juarez-Perez EJ, Frontera C, Roiati V, Garcia-Andrade L, Colella S, Rizzo A, Ortiz P, Mora-Sero I. Effect of mesostructured layer upon crystalline properties and device performance on perovskite solar cells. The Journal of Physical Chemistry Letters. 2015 May 7;6(9):1628-37.

[39] Jahanbakhshi Zadeh N, Borhani Zarandi M, Nakhaee B. Changing the Antisolvent and Its Effect on the Structural and Optical Properties of the Perovskite Layer in Mesoporous Perovskite Solar Cells. Nanomeghyas. 2025 May 22;12(1):25-34.

[40] Qaid SM, Ghaithan HM, Al-Asbahi BA, Aldwayyan AS. Solvent effects on the structural and optical properties of $MAPbI_3$ perovskite thin film for photovoltaic active layer. Coatings. 2022 Apr 19;12(5):549.

[41] Wang T, Daiber B, Frost JM, Mann SA, Garnett EC, Walsh A, Ehrler B. Indirect to direct bandgap transition in methylammonium lead halide perovskite. Energy & Environmental Science. 2017;10(2):509-15.

[42] Witt C, Schotz K, Kohler A, Panzer F. Understanding method-dependent differences in Urbach energies in halide perovskites. The Journal of Physical Chemistry C. 2024 Apr 8;128(15):6336-45.

[43] 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.

[44] Subedi B, Li C, Chen C, Liu D, Junda MM, Song Z, Yan Y, Podraza NJ. Urbach energy and open-circuit voltage deficit for mixed anion–cation perovskite solar cells. ACS Applied Materials & Interfaces. 2022 Feb 7;14(6):7796-804.

[45] Tian S, Huang T, Han F, Wang F, Tan ZA, Bai Y. Optimization of tail state Urbach energy enables efficient organic solar cells and perovskite/organic tandem solar cells. Organic Electronics. 2023 Feb 1;113:106714.

[46] El-naggar AM, Mohamed MB, Osman MM, Heiba ZK, Kamal AM, Aldhafiri AM, Alotaibi LF. Comparative study of the optical and structure characteristics of $CH_3NH_3PbI_3$: DMSO perovskite films with and without chlorobenzene. Results in Physics. 2021 Sep 1;28:104642.

Nanomeghyas
www.nanomeghyas.ir
نانومقیاس

Sol-Gel Synthesis of Aluminum Oxide Nanoparticles and Investigation of the Effect of α- and γ-Al_2O_3 Phases as a Mesoporous Layer on the Structural, Optical, and Photovoltaic Properties of Perovskite Solar Cells

N. Jahanbakhshi Zadeh[1*], M. Borhani Zarandi[2], M. B. Askari[1], M. Sani[3], M. Shojaeifar[4]

[1*]Department of Semiconductor, Institute of Science and High Technology and Environmental Sciences, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran.

[2]Department of Physics, Yazd University, Yazd, Iran.

[3]Department of Fiber Optic, Institute of Science and High Technology and Environmental Sciences, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran.
[4]Department of Laser, Institute of Science and High Technology and Environmental Sciences, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran

Received: 2026-06-06 Revised: 2026-07-28 Accepted: 2026-08-20

Abstract: In this study, α-Al_2O_3 and γ-Al_2O_3 nanoparticles were synthesized via the sol–gel method and employed as mesoporous layer in perovskite solar cells with the structure of FTO/Compact TiO_2/Mesoporous Al_2O_3/$CH_3NH_3PbI_3$/$CuInS_2$/Au. The aim of this study was to investigate the effect of the crystalline phase of aluminum oxide on the structural, optical, and photovoltaic properties of the $CH_3NH_3PbI_3$ perovskite layer. The structural characteristics of the samples were evaluated using XRD and SEM. The results revealed that the γ-Al_2O_3 scaffold improved the crystallization of the perovskite layer and increased the perovskite crystallite size from 44.29 to 45.82 nm. Moreover, the average grain size of the perovskite layer increased from 410 nm for the α-Al_2O_3-based sample to 470 nm for the γ-Al_2O_3-based sample, indicating enhanced crystal growth and reduced grain boundaries in the perovskite layer. Optical investigations demonstrated that the perovskite layer grown on the γ-Al_2O_3 scaffold exhibited higher light absorption and improved optical quality. The direct band gaps for the α-Al_2O_3 and γ-Al_2O_3-based samples were determined to be 1.566 and 1.533 eV, respectively, while the indirect band gaps were 1.521 and 1.488 eV, respectively. The 0.045 eV difference between the direct and indirect band gaps was attributed to the Rashba effect. Furthermore, the reduction of the Urbach energy from 0.186 eV for the α-Al_2O_3-based perovskite to 0.170 eV for the γ-Al_2O_3-based sample indicated decreased structural disorder and electronic defects. The improved structural and optical properties of the perovskite layer on the γ-Al_2O_3 scaffold enhanced the photovoltaic performance of the corresponding solar cell, increasing the power conversion efficiency from 6.01% for the α-Al_2O_3-based device to 6.81% for the γ-Al_2O_3-based device. These results demonstrate that γ-Al_2O_3 as a mesoporous scaffold can effectively improve the performance of perovskite solar cells by enhancing crystal growth, reducing defects, and increasing light absorption in the perovskite layer.

Keywords: Perovskite Solar Cell, Aluminum Oxide, Optical Properties, Structural Properties, Substrate

Corresponding Author. Email: n_jahanbakhshi@yahoo.com

How to Cite This Article:

Jahanbakhshi Zadeh N., Borhani Zarandi M., Askari M. B., Sani M., Shojaeifar M. Sol-Gel Synthesis of Aluminum Oxide Nanoparticles and Investigation of the Effect of α- and γ-Al_2O_3 Phases as a Mesoporous Layer on the Structural, Optical, and Photovoltaic Properties of Perovskite Solar Cells. Nanomeghyas. 2026;():e738952 (In Persian). doi: 10.22034/ns.2026.2091857.1435

This is an open access article under the CC-BY license (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)