

Кристаллохимия структурных дефектов светопоглощающих слоев перовскитных солнечных элементов и их связь с физическими свойствами

Бучинский Владимир Витальевич

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: buchinskiy.vova@gmail.com

На сегодняшний день гибридные галогениды свинца с перовскитоподобной структурой являются одними из наиболее интенсивно изучаемых полупроводниковых материалов. Их общая формула - $APbX_3$, где A^+ - метиламмоний, формамидиний, Cs^+ ; X^- - I, Br, Cl. Эти материалы используют в качестве светопоглощающих слоев при создании солнечных элементов. Однако, несмотря на сравнительно простой (растворный) метод их получения, при кристаллизации таких фаз в различных диапазонах температуры нередко образуются побочные фазы, так называемые дельта-политипы, значительно снижающие технические характеристики устройств солнечных элементов. По литературным данным, присутствие в перовскитном слое прекурсоров $MACl$ или $FACl$ (которые добавляют при синтезе тонких пленок гибридных перовскитов) в примесных количествах ингибирует образование нежелательных дельта-политипов [1,2]. Настоящая работа посвящена исследованию кристаллохимической роли хлоридов $MACl$ или $FACl$ при взаимодействии с перовскитным слоем. Проведены теоретические расчеты энергий смешиваемости ряда твердых растворов $APbI_3$ - $APbCl_3$, а также моделирование твердых растворов, с упорядоченными и разупорядоченными анионными позициями. Прделанная работа будет полезна при изучении кристаллизации нежелательных фаз в пленках гибридных перовскитов, влияющих на стабильность и ширину запрещенной зоны светопоглощающего перовскитного слоя, и, как следствие, КПД конечного продукта - солнечного элемента.

Источники и литература

- 1) Lee B. et al. Microstructural evolution of hybrid perovskites promoted by chlorine and its impact on the performance of solar cell //Scientific reports. – 2019. – Т. 9. – №. 1. – С. 4803.
- 2) Ye F. et al. Roles of $MACl$ in sequentially deposited bromine-free perovskite absorbers for efficient solar cells //Advanced Materials. – 2021. – Т. 33. – №. 3. – С. 2007126.