ҒТАМР 44.37.03 https://doi.org/10.26577/RCPh20994626

Қ.О. Тлекова[1], Г. Толеубай[1,2], А. Нұралы[1], Д.М. Шоков[1],
Қ.Н. Джумагулова[3], Е.О. Шаленов[1*]
[1]Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, Алматы, Қазақстан
[2]М. Тынышбаев атындағы ALT университеті, Алматы, Қазақстан
[3]Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан
*e-mail: shalenov.erik@physics.kz

КВАЗИ-БІРІКТІРІЛГЕН КЕРІ КОНТАКТТЫ ПЕРОВСКИТТІ КҮН ЭЛЕМЕНТТЕРІНІҢ СИПАТТАМАЛАРЫН ОҢТАЙЛАНДЫРУ

Бұл жұмыста квази біріктірілген кері контактілі (КБКК) үштік катионды полигалогенид (CsFAMAPbIBr) негізінде жасалған перовскитті қабаттан, титан-оксид (TiO_2) электрон-тасымалдаушы қабаты (ЭТҚ) мен мыс-тиоцанаты (CuSCN) кемтік-тасымалдаушы қабатынан (КТҚ) тұратын перовскитті күн элементі (ПКЭ) зерттелді. Зерттеу барысында COMSOL Multiphysics программалық пакеті көмегімен перовскитті құрылғының екі өлшемді оптоэлектрлік моделі құрылды. Екі түрлі жағдайда, яғни жарықтың ЭТҚ қабаты жағында орналасқан мөлдір сіңіргіш қабатына (төменнен) және тікелей перовскит қабатына (жоғарыдан) түсіргенде жүргізілді. Алдымен екі жағдай үшін генерация жылдамдығының таралу картасы алынды. Перовскит қабатындағы заряд тасымалдаушылардың оптикалық генерациясы электромагниттік өрістің таралуына негізделіп есептелді. Құрылым ішіндегі оптикалық энергияның таралуы мен ағыны уақыт бойынша орташаланған Пойнтинг векторымен сипатталды. Электрондар мен кемтіктер үшін дрейф-диффузия моделі құрылып, оптикалық модельдеуден алынған ұзындық бойынша орташаланған генерация мәнін пайдалана отырып ПКЭ-дегі электрлік параметрлердің әсері бағаланды. Зерттеу барысында перовскит қабаты мен электрон тасымалдаушы қабат арасындағы беттік ақау тығыздығы, перовскит қабатындағы көлемдік ақау концентрациясы және электрондардың қозғалғыштығының құрылғы тиімділігіне әсері зерттелді. Әрбір жағдай үшін вольт-амперлік сипаттамалары (J–V), қуатты түрлендіру тиімділігі есептелді. Перовскит-ЭТҚ шекарасындағы ақаулардың үлкен мәндері үшін тиімділік айтарлықтай төмендейтіндігі, жарық жоғарыдан және төменнен түскен кезде көлемдік ақау концентрациясы артқан сайын қуатты түрлендіру тиімділігі төмендейтіндігі және электрондардың қозғалғыштығы артқан сайын ПКЭ-нің тиімділігі артатындығы анықталды. Алынған нәтижелер негізінде КБКК ПКЭ-нің дефекттерге сезімталдығы мен параметрлерге тұрақтылығы, сонымен қатар жарықтың төменнен немесе жоғарыдан түсу бағытына тәуелділігі анықталды.

Түйін сөздер: перовскиттік күн элементтері, квази біріктірілген кері контактілі, CsFAMAPbIBr, дрейф–диффузия моделі, қуатты түрлендіру тиімділігі.

K.O. Tlekova[1], G.K. Toleubay[1,2], A.T. Nuraly[1], D.M. Shokov[1],
K.N. Dzhumagulova[3], E.O. Shalenov[1*]
[1]Satbayev University, Almaty, Kazakhstan
[2]Mukhametzhan Tynyshbayev ALT University,Almaty, Kazakhstan
[3]Farabi University, Almaty, Kazakhstan
*e-mail: shalenov.erik@physics.kz

Performance optimization of quasi-interdigitated back-contact perovskite solar cells

In this work, a quasi-integrated back contact (QIBC) perovskite solar cell (PSC) consisting of a perovskite layer based on a ternary cationic polyhalide (CsFAMAPbIBr), a titanium oxide (TiO2) electron-transport layer (ETL) and a copper thiocyanate (CuSCN) hole-transport layer (HTL) was

 © 2026 Al-Farabi Kazakh National University

studied. During the study, a two-dimensional optoelectric model of the perovskite device was created using the COMSOL Multiphysics software package. The experiments were conducted in two different cases, i.e., when the light was incident on a transparent absorber layer located on the ETL layer side (front-side) and directly on the perovskite layer (rear-side). First, a generation velocity distribution map was obtained for both cases. The optical generation of charge carriers in the perovskite layer was calculated based on the electromagnetic field distribution. The distribution and flow of optical energy inside the structure were described by a time-averaged Poynting vector. A drift-diffusion model for electrons and holes was developed, and the effect of electrical parameters on the PCE was evaluated using the length-averaged generation value obtained from optical simulation. During the study, the effect of the surface defect density between the perovskite layer and the electron transport layer, the bulk defect density in the perovskite layer, and the electron mobility on the device efficiency was studied. For each case, the current–voltage characteristics (J–V) and power conversion efficiency were calculated. It was found that for large values of defects at the perovskite-ETL interface, the efficiency decreases significantly, and when light is incident from above and below, the power conversion efficiency decreases with increasing volume trap density, and the efficiency of the PCE increases with increasing electron mobility. Based on the results obtained, the sensitivity of the QIBC PCE to defects and stability to parameters were determined, as well as the dependence of the direction of light incidence from below or above.

Keywords: perovskite solar cells, quasi-integrated back-contact, CsFAMAPbIBr, drift-diffusion model, power conversion efficiency.

К.О. Тлекова[1], Г.К. Толеубай[1,2], А.Т. Нуралы[1], Д.М. Шоков[1],
К.Н. Джумагулова[3], Е.О. Шаленов[1*]
[1]Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан
[2]ALT Университет имени М. Тынышпаева, Алматы, Казахстан
[3]Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан
*e-mail: shalenov.erik@physics.kz

Оптимизация характеристик квази-интегрированных тыльноконтактных перовскитных солнечных элементов

В данной работе исследовался квази-интегрированный тыльноконтактный (КИТК) перовскитный солнечный элемент (ПСЭ), состоящий из перовскитного слоя на основе тройного катионного полигалогенида (CsFAMAPbIBr), слоя переноса электронов (ETL) из оксида титана (TiO_2) и слоя переноса дырок (HTL) из тиоцианата меди (CuSCN). В ходе исследования была создана двухмерная оптоэлектрическая модель перовскитного устройства с использованием программного пакета COMSOL Multiphysics. Расчеты проводились в двух различных случаях: когда свет падал на прозрачный поглощающий слой, расположенный со стороны слоя ETL (снизу), и непосредственно на перовскитный слой (сверху). Сначала для обоих случаев была получена карта распределения скорости генерации. Оптическая генерация носителей заряда в перовскитном слое рассчитывалась на основе распределения электромагнитного поля. Распределение и поток оптической энергии внутри элемента описывались усредненным по времени вектором Пойнтинга. Была разработана дрейфово-диффузионная модель для электронов и дырок, а влияние электрических параметров на КПД оценивалось с использованием усредненного по длине значения генерации, полученного из оптического моделирования. В ходе исследования изучалось влияние плотности поверхностных дефектов между перовскитным слоем и слоем переноса электронов, концентрация объемных дефектов в перовскитном слое и подвижности электронов на эффективность устройства. Для каждого случая рассчитывались вольт-амперные характеристики (ВАХ) и КПД преобразования энергии. Было установлено, что при больших значениях дефектов на границе раздела перовскит-ETL эффективность

значительно снижается, а при падении света сверху и снизу КПД преобразования энергии уменьшается с увеличением концентрации объемных дефектов, и КПД увеличивается с увеличением подвижности электронов. На основе полученных результатов была определена чувствительность КПД КИТК к дефектам и стабильность параметров, а также зависимость от направления падения света снизу или сверху.

Ключевые слова: перовскитные солнечные элементы, квазиинтегрированный задний контакт, CsFAMAPbIBr, модель дрейфа–диффузии, эффективность преобразования энергии

Кіріспе

Қазіргі таңда әлемде энергияға деген сұраныс жыл сайын артып келеді, ал дәстүрлі қазба отынның азаюы мен экологиялық мәселелер жаңартылатын энергия көздерін дамытуды талап етеді. Осындай жаһандық мәселені шешу барысында баламалы энергия көздерін пайдалану маңызды. Қазіргі таңда баламалы энергия көздерінің ішінде күн панелдері қарқынды даму үстінде [1-3]. Фотоэлектрлік материалдар арасында органикалық-органикалық емес галогенидты ПКЭ арзан, жеңіл және икемді, реттелетін оптикалық және электрондық қасиеттері мен арзан өндеуінің арқасында керемет нәтижелерге қол жеткізді [4, 5].

ПКЭ-інің қуатты түрлендіру тиімділігі (ҚТТ) көрсеткіші қарқынды өсіп, өзінің оптоэлектронды қасиеттерінің арқасында соңғы жылдары ҚТТ 25%-дан жоғары мәнге ие [6, 7, 8]. Тиімділігі жоғары ПКЭ әдетте дәстүрлі сэндвич құрылымда болады. Алайда, қарқынды дамып келе жатқан жетістікке қарамастан, дәстүрлі сэндвич моделді ПКЭ-де бірқатар шектеулерге тап болуда, атап айтқанда заряд тасымалдаушы қабаттардағы паразиттік жұтылу мен оптикалық шығындар олардың теориялық тиімділік шегіне жетуіне кедергі жасауда. Әдеттегі сэндвич құрылымды ПКЭ-де перовскит сіңіргіш қабаты, ЭТҚ мен КТҚ арасында орналасады. Бұл күн сәулесінің белсенді қабатқа жеткенге дейін әдетте мөлдір өткізгіш оксид (МӨО) болып табылатын алдыңғы жанасу арқылы өтуін талап етеді. Бұл МӨО/ЭТҚ аралығында шағылысу, шашырау және ультракүлгін (УК) жұтуына байланысты айтарлықтай паразиттік шығындарға әкеледі [9]. Мысалы, перовскит қабаты УК-көрінетін жарықты (300–800 нм) сіңіре алса да, TiO2 негізіндегі ЭТҚ және МӨО арқылы УК-ны қарқынды сіңіруіне байланысты тек көрінетін жарық (400–800 нм) ғана абсорберге тиімді жетеді. Бұл мәселелер ПКЭ құрылғысының архитектурасын түбегейлі қайта бағалау қажеттілігін көрсетеді.

Балама ретінде кері контактілі ПКЭ құрылымды 2016 жылы У. Бах және оның әріптестері кристалды кремний күн элементтері үшін бұрын жасалған тұжырымдаманы бейімдеп ұсынады [10]. Кері контактілі құрылымда екі заряд тасымалдаушы қабат және оларға сәйкес электродтар (анод пен катод) құрылғының артқы жағында орналасады. Бұл құрылымдарға оң және теріс электродтар абсорбер қабатының бір жағында орналасқан біріктірілген кері контактілі және КБКК геометриялары кіреді. Бұл конфигурацияда түсетін фотондардың көпшілігі перовскитпен жұтылады, ал заряд тасымалдаушылар көршілес ЭТҚ және КТҚ аймақтары арқылы тиісті электродтарына қарай бүйірден алынады [11, 12]. Сандық модельдеулер кері контактілі күн элементтерінің ҚТТ 22,77%-ға қол жеткізе алатынын болжады [13]. Квази-біріктірілген-кері контактілі (КБКК) құрылымның теориялық болжалды максималды ҚТТ мәні 29,9%-ды құрайды [14].

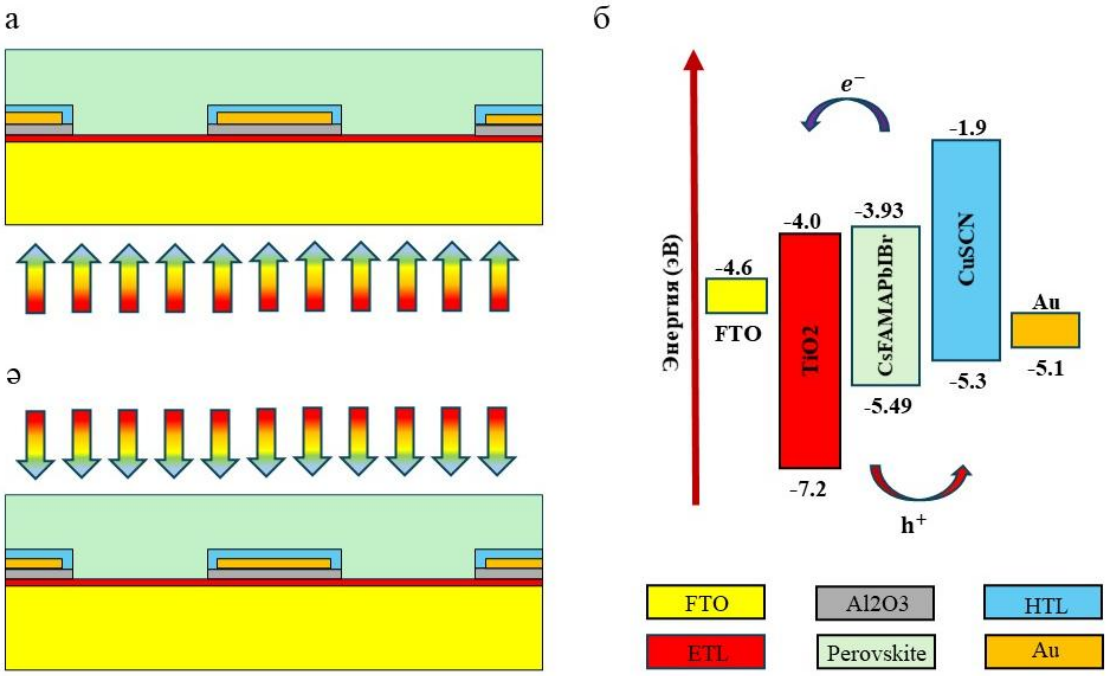
Бұл жұмыста перовскит қабаты ретінде үштік катионды полигалогенидті перовскит CsFAMAPbIBr таңдалды. Cs, FA және MA бірге қолданылуы перовскиттің құрылымдық және фазалық тұрақтылығын оңтайландырады, ал I пен Br араластыру материалдың тыйым салынған аймағын және оптикалық қасиеттерін реттеуге мүмкіндік береді. FA/MA жүйесіне бейорганикалық Cs катионын қосу ПКЭ-нің жұмысының термиялық тұрақтылығын және қайталануын жақсартуға да ықпал етеді [15]. CsFAMAPbIBr негізінде КБКК құрылымымен жасалынған зерттеулер саны шектеулі.

Бұл жұмыста КБКК құрылымды ПКЭ-не жарықты төменнен және жоғарыдан түсіріп, екі түрлі жағдайда зерттеулер жүргіземіз. Құрылғының оптикалық және электрлік сипаттамалары заряд тасымалдаушыларының генерациясына, тасымалдануына және рекомбинация процестеріне тиісті параметрлердің әсері қарастырылады, соның ішінде: перовскит/ЭТҚ интерфейсіндегі ақау тығыздығы, перовскит қабатының тұзақ тығыздығы, электрондардың қозғалғыштығы.

Теориялық тәсіл және модельдеу ерекшеліктері

Бұл зерттеуде қалыңдығы 500 нм болатын CsFAMAPbIBr перовскиті алынып отыр. ЭТҚ және КТҚ ретінде сәйкесінше 15 нм қалыңдықтағы TiO2 қабаты және 100 нм қалыңдықтағы CuSCN қабаты пайдаланылды, олар өзара 100 нм қалыңдықтағы алюминий оксиді (Al2O3) оқшаулағыш қабатымен электрлік оқшауланған. Теріс және оң электродтар ретінде сәйкесінше 500 нм қалыңдықтағы фторланған қалайы оксиді (FTO) және алтын (Au) таңдалды. Күн элементінің құрылымы 1-суретте көрсетілген.

Бұл зерттеуде COMSOL Multiphysics бағдарламасы заряд тасымалдаушылардың қозғалысын, олардың генерациясы мен жоғалу механизмдерін модельдеу арқылы күн элементінің ішкі процестерін зерттеу үшін қолданылады. Бағдарлама құрылғы ішіндегі заряд тасымалдаушылардың әрекетін және әртүрлі физикалық параметрлердің құрылғының сипаттамаларына қалай әсер ететінін визуалды түрде талдауға мүмкіндік береді. Осы сандық модельдеу тәсілі арқылы күн элементінің тиімділігі мен сенімділігін дәл талдауға және оңтайландыруға болады. Моделдеуде біз екі түрлі жағдайды қарастырамыз, Бірінші жағдайда, 1-а суретте жарық құрылғының төменгі бөлігінен, яғни FTO жағынан түсіріледі. Екінші жағдайда жарық тікелей перовскит (CsFAMAPbIBr) қабатына түсіріледі (ә сурет), ал (б) суретте ПКЭ-ндегі сәйкес қабаттар үшін энергия деңгейлері көрсетілген. Бұл жерде бізде екі электрод арасы 2 мкм және есептеу барысында ПКЭ-нің ұзындығы 8 мкм-ге тең болды. Перовскит пен ЭТҚ арасындағы аралық қабаттың қалыңдығы 10нм деп алынды.



Сурет 1 - Кері контактілі күн элементінің а) жарық төменнен және ә) жарық жоғарыдан түскендегі құрылымы б) энергия деңгейлері

Дәстүрлі ПЭК-нде заряд тасымалдауды моделдеу бірөлшемді (1D) моделді қолдану арқылы жүзеге асады және фотогенерация тасымалдаушысының таралуын сипаттау үшін қарапайым біркелкі таралу немесе Ламберт-Бер моделі қолданылады. Алайда КБКК ПКЭ тәрізді қондырғыларда КБКК қондырғының артқы байланыс электроды екі өлшемді болғандықтан, зарядтарды тасымалдаушыларды тасымалдау екі өлшемді моделмен сипатталуы қажет. Сондықтан қарапайым Ламберт-Бер моделін оптикалық процесстерді-фотоактиті қабаттағы резонанс-тарды ескермегендіктен екі өлшемді қосындылар үшін заряд тасымалдаушылардың жылдамдығын есептеу үшін жеткіліксіз болып табылады. Сол себепті, 2D мен 3D жүйелерді қарастырғанда нақты заряд тасымалдаушылардың генерациясын алу үшін комплексті электромагниттік есептулерді жүргізу қажет. Сол себепті біз Ли және өзге авторлар шығарған моделді кеңістік пен

спектралді тәуелді заряд тасымалдаушылардың генерация жылдамдығы келесі теңдеумен жазамыз [16]:

$$g(x,y,z,\lambda) = \alpha(x,y,z,\lambda)\varphi(\lambda)P_s(x,y,z,\lambda), \quad (1)$$

мұндағы, $\alpha(x,y,z,\lambda)$ – жұтылу коэффициенті, $\varphi(\lambda)$- күн элементтеріне түсетін фотондар ағыны (AM1.5G), $P_s(x,y,z,\lambda)$-ағын қуатының тығыздығы. Кеңістік тәуелділік дегенміз, аталған модель қондырғының барлық заряд тасымалдаушылардың генерация жылдамдығын әрбір қабаттың оптикалық қасиеттерін ескере отырып $P_s(x,y,z,\lambda)$ келесі формуламен есептелінеді:

$$P_s(x,y,z,\lambda) = \sqrt{|P_{ox}(x,y,z,\lambda)|^2 + \left|P_{oy}(x,y,z,\lambda)\right|^2 + |P_{oz}(x,y,z,\lambda)|^2}, \quad (2)$$

мұндағы

$$P_{ox}(x,y,z,\lambda) = \frac{1}{2}Re\left(E_y H_z^* - E_z H_z^*\right), \quad (3а)$$

$$P_{oy}(x,y,z,\lambda) = \frac{1}{2}Re(E_z H_x^* - E_x H_z^*), \quad (3ә)$$

$$P_{oz}(x,y,z,\lambda) = \frac{1}{2}Re\left(E_x H_y^* - E_y H_x^*\right), \quad (3б)$$

мұнда E және H кеңістік пен жиілікке тәуелді түскен жарық есебінен туындайтын электрлік және магниттік өрістері. «Re» мен «*» таңбалары нақты және комплекс жіктелуді білдіреді.

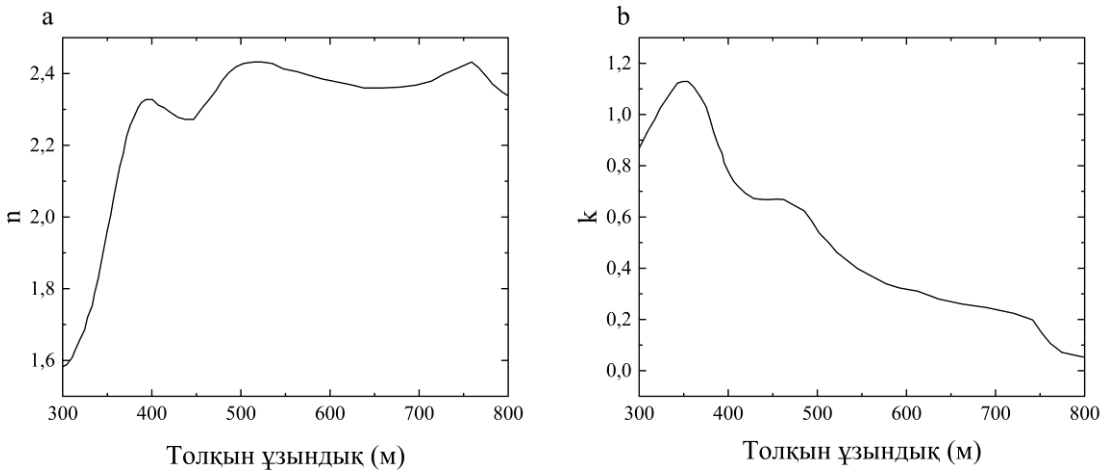
Кеңістік-тәуелділік заряд тасымалдаушылардың генерация жылдамдығы артқы перовскиттік фотоактивті қабат үшін келесі теңдеу арқылы есептелінеді:

$$G(x,y,z) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} g(x,y,z,\lambda)d\lambda. \quad (4)$$

Модельдеуде қолданылатын тиісті электрлік параметрлер, мысалы, тыйым салынған аймақ, электрондардың туыстығы, диэлектрлік өтімділік секілді негізгі параметрлер 1-кестеде келтірілген. Есептеу шығындарын азайту үшін көлденең бағытта периодты шекаралық шарттар қолданылды. Күн сәулесінің түсуі ретінде толқын ұзындығы 300-ден 800 нм-ге дейінгі стандартты AM1.5G спектрі қабылданды, бұл 1,56 эВ перовскиттік тыйым салынған аймаққа сәйкес келеді. Жұмыста жүйені стационар жағдайда қарастырамыз және генерацияны тек перовскит қабатында жүреді деп есептейміз және иондық миграцияны ескермейміз. CsFAMA қабатының толқын ұзындығынан тәуелді сыну көрсеткіші және сөну коэффициенті 2-суретте көрсетілген. Сыну көрсеткіші және сөну коэффициенті оптикалық генерацияны есептеу барысында қолданылды [15].

Кесте-1. Модельдеуде қолданылған негізгі параметрлер [17, 18]

Параметр	**ЭТҚ, TiO2**	**Перовскит, CsFAMAPbIBr**	**КТҚ, CuSCN**
Қалыңдығы, нм	15	500	100
Электрондық туыстық, χ (эВ)	4	3.93	1.9
Тыйым салынған аймақ ені, *Eg* (эВ)	3.2	1.56	3.4
Салыстырмалы диэлектрлік өтімділік, ε	46	44	10
Өткізгіштік аймақтағы эффективті күй тығыздығы, N_c (см$^{-3}$)	$4.36\cdot10^{18}$	$2.8\cdot10^{18}$	$1.7\cdot10^{19}$
Валенттік аймақтағы эффективті күй тығыздығы, N_v (см$^{-3}$)	$2.52\cdot10^{19}$	$1.8\cdot10^{19}$	$2.5\cdot10^{21}$
Донорлық қоспа концентрациясы, N_d (см$^{-3}$)	2×10^{17}	—	—
Акцепторлық қоспа концентрациясы, N_a (см$^{-3}$)	—	1×10^{13}	$5\cdot10^{18}$
Электрон/кемтік қозғалғыштығы, μ_n/μ_p (см^2/В·с)	20/10	30	0.0001/0.1
SRH өмір сүру уақыты, τ_n/τ_p (с)	$1\cdot10^{-7}/1\cdot10^{-7}$	$3.1\cdot10^{-7}$	—
Радиациялық рекомбинация коэффициенті, B_{rad} (см^3)/с)	—	$2\cdot10^{-10}$	—
Оже рекомбинация коэффициенті, A_n/A_p (см^6/с)	—	$9.9\cdot10^{-29}$	—
Қосымша акцептор концентрациясы, N_a (см$^{-3}$)	—	$1\cdot10^{20}$	—



Сурет 2 - CsFAMA қабатының толқын ұзындығынан тәуелді сыну көрсеткіші және сөну коэффициенті

Пуассон теңдеуі (1) электр зарядтарының болуына байланысты құрылғының ішіндегі электрлік потенциалдың қалай таралатынын сипаттайды. Бұл күн элементіндегі заряд тасымалдаушылардың қозғалысын басқаратын ішкі электр өрісін (E) анықтауға мүмкіндік береді [19, 20]:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{\rho}{\varepsilon_s} = -\frac{q}{\varepsilon_s}[p - n + N_D^+(x) - N_A^-(x) \pm N_t(x)], \quad (5)$$

мұнда ψ — электростатикалық потенциал, ал ρ — еркін заряд тасымалдаушылардың (p, n), иондалған қоспа атомдарының (N_D^+, N_A^-) және тұзақтағы заряд тығыздығының (N_t) әсерінен қалыптасатын жалпы заряд тығыздығы. ε_s және q параметрлері сәйкесінше жартылай өткізгіштің диэлектрлік өтімділігін және элементар зарядты білдіреді. Үздіксіздік теңдеулері (2) және (3) генерация, рекомбинация және заряд тасымалдаушылардың қозғалысы нәтижесінде олардың санының уақыт бойынша қалай өзгеретінін сипаттайды. Бұл теңдеулер жартылай өткізгіш құрылғының ішінде зарядтың сақталу заңын қамтамасыз етеді.

$$-\frac{\partial J_p}{\partial x} + G - U_p(n,p) = 0, \quad (6)$$

$$-\frac{\partial J_n}{\partial x} + G - U_n(n,p) = 0. \quad (7)$$

J_p және J_n сәйкесінше – кемтіктер мен электрондардың ток тығыздығын білдіреді, ал G — генерация жылдамдығы, $U_p(n,p)$ және $U_n(n,p)$ — сәйкесінше рекомбинация жылдам-дықтары. Бұл теңдеулер құрылғының әрбір нүктесінде заряд тасымалдаушылардың генерациясы, рекомбинациясы және тасымалдануы арасындағы тепе-теңдікті қамтамасыз етеді.

(8) және (9) теңдеулерінде берілген ток тығыздығының теңдеулері электр өрісі мен заряд тасымалдаушылар концентрациясының градиенті әсерінен электрондар мен кемтіктердің құрылғы ішінде қалай қозғалатынын сипаттайды.

$$J_p = qn\mu_p E - qD_p\frac{\partial p}{\partial x}J_p, \quad (8)$$

$$J_n = qn\mu_n E - qD_n\frac{\partial p}{\partial x}J_n, \quad (9)$$

мұнда J_p және J_n сәйкесінше электрондар мен кемтіктердің жалпы ток тығыздығын білдіреді. Бұл ток тығыздығы электр өрісі E әсерінен пайда болатын дрейфтік тасымалды және заряд тасымалдаушылар концентрациясының градиенттерінен туындайтын диффузиялық тасымалды қамтиды. q, μ және D параметрлері сәйкесінше күн элементіндегі заряд тасымалдаушылардың тасымалдануын анықтайтын зарядты, қозғалғыштықты және диффузия коэффициентін білдіреді. μ заряд тасымалдаушылардың электр өрісінің әсерінен жартылай өткізгіш арқылы қозғалу қабілетін сипаттайды. Ол электрондар мен кемтіктердің сәйкес электродтарға қаншалықты тиімді тасымалданатынын тікелей анықтайды.

Шокли–Рид–Холл (SRH) рекомбинация теңдеуі (6) заряд тасымалдаушылардың тыйым салынған аймақтағы ақаулық күйлер арқылы қалай рекомбинацияланатынын сипаттайды.

Мұндай рекомбинация заряд тасымалдаушылардың өмір сүру уақытын қысқартады. SRH рекомбинациясы электрондар мен кемтіктердің концентрацияларына, меншікті заряд тасымалдаушылар концентрациясына және олардың сәйкес өмір сүру уақыттарына тәуелді:

$$R_{SRH} = \frac{np - \gamma_n \gamma_p n_i^2}{\tau_n(p + p_i) + \tau_p(n + n_i)}. \qquad (10)$$

R_{SRH} – ақаулық күйлері арқылы жүретін рекомбинация жылдамдығын білдіреді және ол заряд тасымалдаушылардың концентрацияларына тәуелді. n_i – жартылай өткізгіштің меншікті заряд тасымалдаушылар концентрациясын білдіреді. γ_n γ_p және p_i мүшелері – материалға тән тұзақ сипаттамаларына байланысты рекомбинация жылдамдығын түзете. (11) - теңдеуде берілген өмір сүру уақытының теңдеуі заряд тасымалдаушының рекомбинацияға ұшырағанға дейін орта есеппен қанша уақыт өмір сүретінін көрсетеді. Бұл параметр рекомбинациялық шығындарды және тұтастай алғанда құрылғының жұмыс тиімділігін бағалаудағы негізгі көрсеткіштердің бірі болып табылады.

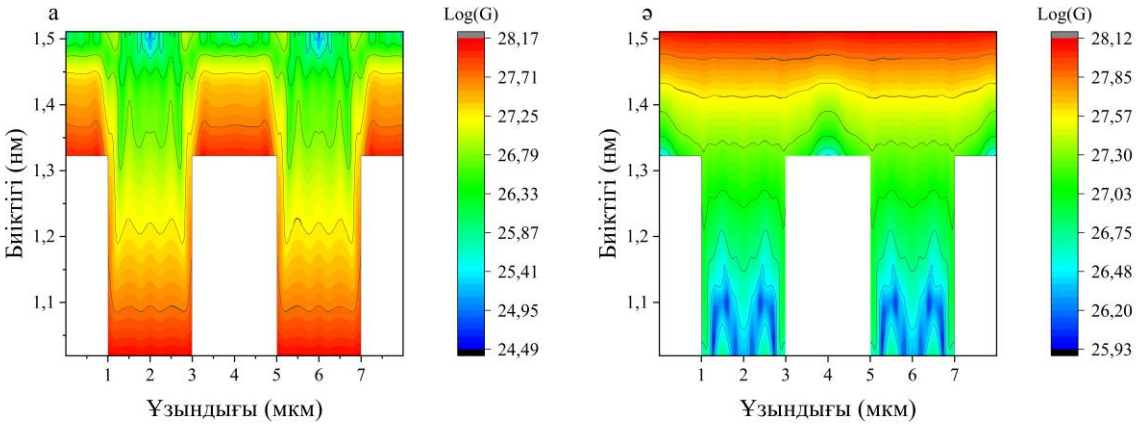
$$\tau = \frac{1}{\sigma \times N_t \times \nu_{th}}, \qquad (11)$$

τ – заряд тасымалдаушылардың өмір сүру уақытын білдіреді. Ол тұзақтардың тығыздығына N_t және қармау қимасына σ тәуелді, ал ν_{th} жылулық жылдамдықты білдіреді.

N_t жартылай өткізгіштің тыйым салынған аймағында орналасқан, заряд тасымалдаушыларды қармап, кейін оларды босата алатын ақау күйлерінің концентрациясын білдіреді. Осыған байланысты N_t рекомбинация динамикасына және құрылғының жалпы жұмыс сипаттамаларына айтарлықтай әсер етеді. Ол заряд тасымалдаушылардың тұзақтар арқылы қаншалықты жылдам қармалып, рекомбинацияланатынын сипаттайды және осылайша құрылғының жұмыс тиімділігіне әсер етеді.

Нәтижелер және талқылау

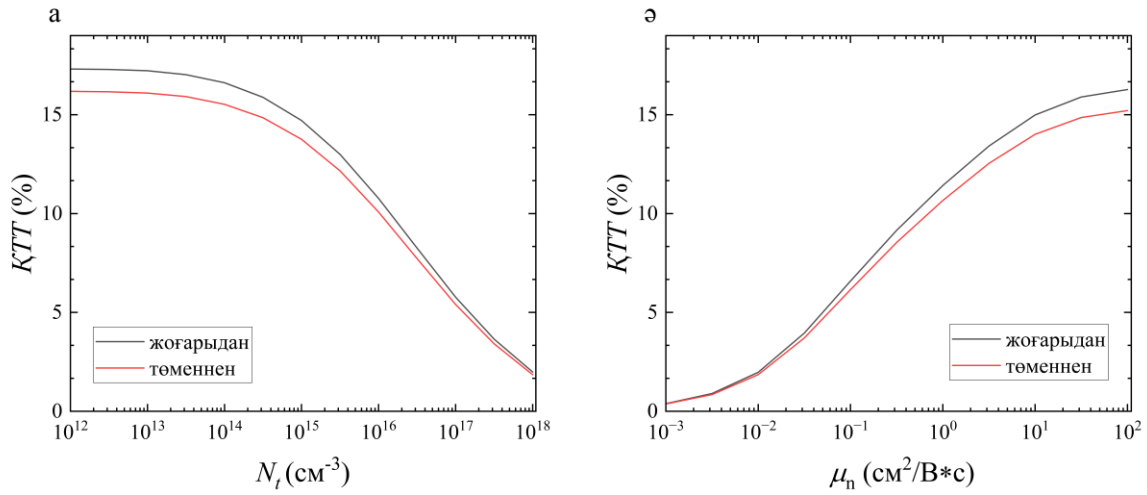
(1-4) теңдеулерді қолдана отырып, перовскит аймағындағы көлденең қимадағы тасымалдаушылардың екі жағдай үшін генерация жылдамдығы есептелінді, 3-суреттен генерацияның біркелкі емес таралуын көруге болады. Генерация жылдамдығының мәні жарық жоғарыдан түскен жағдайда үлкен, ал төменнен түскенде салыстырмалы аз екенін байқауға болады.



Сурет 3 - а) жарық төменнен ә) жарық жоғарыдан түскендегі генерация жылдамдығының таралу картасы

Есептеулер барысында алынған оптикалық генерация жылдамдығына сүйене отырып, перовскиттің электрлік өнімділігін қарастырайық. Модельдеуде перовскит қабатының толық көлемі бойынша генерация жылдамдығы G тұрақты мән алынды, екі жағдай үшін екі түрлі генерация мәнін аламыз, перовскит қабатында ұзындық бойынша орташаланған мәні жарық жоғарыдан түскенде G=2,9221·10^{27} (1/м^3·с), ал жарық төменнен түскенде 2,79132·10^{27}(1/м^3·с) тең.

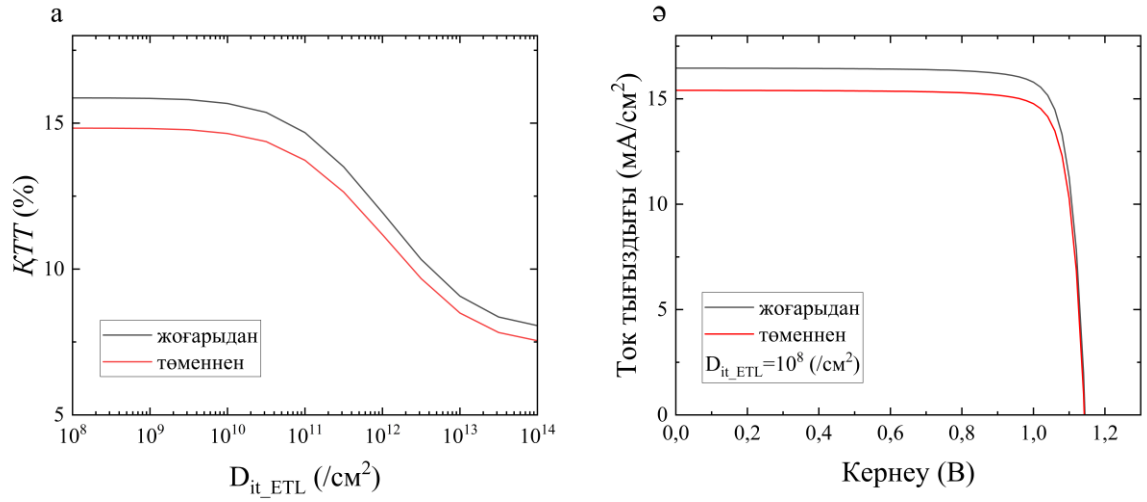
Жоғарыда айтып өткен Пуассон теңдеуінен, заряд тасымалдаушыларының үздіксіздік теңдеуінен және дрейф-диффузия немесе ток тығыздығы теңдеулерінен тұратын байланысқан жиынтық COMSOL Multiphysics программалық пакеті көмегімен шешіліп, вольт-амперлік сипаттамасы алынды.



Сурет 4 - (а) N_t тұзақ тығыздығы және (ә) μ_n электрондардың қозғалғыштығының ПКЭ тиімділігіне әсері

4(а) және 4(ә)-суреттерінде перовскит аймағындағы тұзақ тығыздығы N_t және электрондардың қозғалғыштығының μ_n ҚТТ мәндерінен тәуелділігі көрсетілген. Тұзақ тығыздығы (7) теңдеудің көмегімен есептелінді. ҚТТ шамасы жарық жоғарыдан түскенде максимум 17.31%, ал төменнен түскенде 16.18% тең болды. ПКЭ-нің тиімділігінің электрондардың қозғалғыштығына сезімталдығын зерттеу барысында электрондар мен кемтіктердің қозғалғыштығының мәні бірдей $\mu_n = \mu_p$ деп алынды, ҚТТ шамасы сәйкесінше 16.27% және 15.21% тең болды. Графиктен жарық жоғарыдан және төменнен түскенде тұзақ тығыздығы артқан сайын, қуатты түрлендіру тиімділігі төмендейтінін, керісінше электрондардың қозғалғыштығы артқан сайын, сәйкесінше ПКЭ-нің тиімділігі артатынын байқауға болады.

5(а)-суретте ЭТҚ/перовскит интерфейстеріндегі (D_{it_ETL}) ақау тығыздығының ҚТТ тәуелділігі көрсетілген, графикте ҚТТ мәні $D_{it_ETL}=10^8$-ден 10^{14} см$^{-2}$-ге дейін ұлғайған сайын D_{it_ETL} үлкен мәндері үшін тиімділік айтарлықтай төмендейді. ЭТҚ/перовскит интерфейсі маңында фотогенерацияланған тасымалдаушылардың көп мөлшері жиналады, яғни D_{it_ETL} мәні жоғары болса, онда бұл аймақта рекомбинациялық шығындар күрт өседі, соның салдарынан құрылғы тиімділігі төмендейді. 5(ә)-суретте ЭТҚ/перовскит интерфейстеріндегі (D_{it_ETL}) ақау тығыздығының ток тығыздығынан тәуелді графигі көрсетілген. Ақау тығыздығының мәні жарық жоғарыдан түскен кезде және төменнен түскен жағдайда бірдей төмендейтіндігі байқалады. $D_{it_ETL}=10^8$ тең болғанда ҚТТ шамасы төменнен түскенде 14.83 %, жоғарыдан 15.868 % тең.



Сурет 5 - (а) D_{it_ETL} мәндерінің ПКЭ тиімділігіне әсері, (ә) $D_{it_ETL}=10^8$ см$^{-2}$ тең болғанда кездегі *J-V* тәуелділігі

Қорытынды

Бұл жұмыста КБКК CsFAMAPbIBr негізінде жасалған ПКЭ зерттелді. Зерттеу барысында ПКЭ-нің КБКК құрылымы үшін COMSOL Multiphysics программалық пакетінде сандық моделі құрылды. Сандық модель екі түрлі жағдай үшін құрылып, яғни есептеулер жарық жоғарыдан және жарық төменнен түскенде жеке-жеке жүргізілді. Жергілікті генерация жылдамдығы Пойнтинг векторы арқылы алынған оптикалық қуат ағынының кеңістіктік таралуы негізінде есептелінді. Әрбір толқын ұзындығы үшін спектрлік фотогенерация анықталып, кейін 300-800 нм спектрлік аралығы бойынша интегралдау арқылы толық генерация жылдамдығы G(x,y,z) алынды. КБКК ПКЭ-нің электрлік параметрлерін қарастыру үшін сандық моделдеу дрейф-диффузия теориясына негізделіп жасалынды. Пуассон теңдеуі, тасымалдаушылардың үздіксіздік теңдеулері және ток тығыздығы теңдеулері шешілді және тасымалдаушылардың дрейф және диффузия арқылы тасымалдануы, сондай-ақ SRH, радиациялық және Оже рекомбинациялары ескерілді. Сонымен қатар ЭТҚ/перовскит интерфейстеріндегі беттік рекомбинациясы есепке алынды.

Зерттеу барысында интерфейстік ақау тығыздығы ($D_{it,ETL}$), перовскит қабатындағы көлемдік ақаулар концентрациясы (N_t) және электрондардың қозғалғыштығы (μ_n) параметрлері өзгертіліп, олардың құрылғы тиімділігіне әсері зерттелді. Әрбір жағдай үшін вольт-амперлік сипаттамалары (J–V), ҚТТ және ашық тізбектегі кернеу (Voc) есептелді. Алынған нәтижелер негізінде дефекттерге сезімталдығы мен параметрлерге тұрақтылығы анықталды.

Қорытындылай келе, осы жұмыста КБКК ПКЭ-нің тиімділігі тасымалдаушылардың генерациясы, рекомбинациясы және тасымалдау процестерінің өзара байланысы арқылы анықталатыны көрсетілді. ПКЭ-нің ҚТТ жарық төменнен түскенге қарағанда жоғарыдан түскенде жоғары болатыны анықталды, ҚТТ мәні жарық жоғарыдан бағытталғанда максимал мәні 17.31%, ал төменнен түскенде 16.18% шамасында болды. Осы зерттеудің нәтижелері жоғары тиімділікті КБКК ПКЭ-н жобалау және өндіру кезінде үлгі және әдістемелік негіз ретінде қолданылуы мүмкін.

Авторлардың үлесі

Қ.О. Тлекова: бағдарламалық код пен қолдаушы алгоритмдерді іске асыру; компьютерлік бағдарламаларды жобалау, формалды талдау, әдістемені әзірлеу, деректерді өңдеу және басқару; **Г.Қ. Толеубай:** формалды талдау, әдістемені әзірлеу, деректерді өңдеу және басқару; **А.Т. Нұралы:** мәтінді редакциялау және толықтыру, тұжырымдама жасау, жарияланған жұмысты дайындау; **Д.М. Шоков:** мәтінді редакциялау және толықтыру, тұжырымдама жасау, жарияланған жұмысты дайындау; **К.Н. Джумагулова:** әдістеме әзірлеу, зерттеу жүргізу, мәтінді редакциялау және толықтыру; **Е.О. Шаленов:** бағдарламалық код пен қолдаушы алгоритмдерді іске асыру; компьютерлік бағдарламаларды жобалау, әдістеме әзірлеу, зерттеу жүргізу, мәтінді редакциялау және толықтыру, ғылыми жетекшілік, жобаны басқару, тұжырымдама жасау, жарияланған жұмысты дайындау;

Әдебиеттер

1. N.-G. Park, Perovskite solar cells: An emerging photovoltaic technology, *Mater. Today* **18** (2), 65 (2015). https://doi.org/10.1016/j.mattod.2014.07.007
2. Q. Lin, A. Armin, R.C.R. Nagiri, P.L. Burn, and P. Meredith, Electro-optics of perovskite solar cells, *Nat. Photonics* **9** (2), 106 (2015). https://doi.org/10.1038/nphoton.2014.284
3. A. Bakar, M. Ahmed, Y. Khairy, E.O. Shalenov, M.M. Seisembayeva, and K.N. Dzhumagulova, Structural, elastic, mechanical, electronic and optical properties of TlSnX3 (X = Cl, Br, I) for sustainable energy applications, *J. Inorg. Organomet. Polym. Mater.* **35**, 166–186 (2025). https://doi.org/10.1007/s10904-024-03269-z
4. M.I. Hossain, A.K.M. Hasan, W. Qarony, Md. Shahiduzzaman, M.A. Islam, Y. Ishihawa, Y. Uraoka, N. Amin, D. Knipp, Electrical and optical properties of nickel-oxide films for efficient perovskite solar cells, *Small Methods* **4**(9), 2000454 (2020). https://doi.org/10.1002/smtd.202000454
5. Y. Rong, Y. Hu, A. Mei, H. Tan, M.I. Saidaminov, S. II Seok, M.D. MgGehee, E.H. Sargent, H. Han, Challenges for commercializing perovskite solar cells, *Science* **361**(6408), eaat8235 (2018). https://doi.org/10.1126/science.aat8235
6. J.J. Yoo, G. Seo, M.R. Chua, T.G. Park, Y. Lu, F. Rotermund, Y.-K. Kim, C.S. Moon, N.J. Jeon, J.-P. Correa-Baena, V. Bulović, S.S. Shin, M.G. Bawendi, and J. Seo, Efficient perovskite solar cells via improved carrier management, *Nature* **590**, 587 (2021). https://doi.org/10.1038/s41586-021-03285-w
7. National Renewable Energy Laboratory (NREL), Best Research-Cell Efficiency Chart, *Photovoltaic Research, NREL* (accessed July 30, 2025). https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency
8. H. Tan, A. Jain, O. Voznyy, X. Lan, F.P. García de Arquer, J.Z. Fan, R. Quintero-Bermudez, M. Yuan, B. Zhang, Y. Zhao, F. Fan, P. Li, L.N. Quan, Y. Zhao, Z.-H. Lu, Z. Yang, S. Hoogland, and E.H. Sargent, Efficient and stable

solution-processed planar perovskite solar cells via contact passivation, *Science* **355**(6326), 722 (2017). https://doi.org/10.1126/science.aai9081

9. Y. Da, Y. Xuan, and Q. Li, Quantifying energy losses in planar perovskite solar cells, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **174**, 206 (2018). https://doi.org/10.1016/j.solmat.2017.09.002

10. A.N. Jumabekov, E. Della Gaspera, Z.-Q. Xu, A.S.R. Chesman, J. van Embden, S.A. Bonke, Q. Bao, D. Vak, and U. Bach, Back-contacted hybrid organic–inorganic perovskite solar cells, *J. Mater. Chem. C* **4** (15), 3125 (2016). https://doi.org/10.1039/C6TC00681G

11. P.J. Verlinden, R.M. Swanson, and R.A. Crane, 7000 high-efficiency cells for a dream, *Prog. Photovolt. Res. Appl.* **2** (2), 143 (1994). https://doi.org/10.1002/pip.4670020209

12. D. Fu, X.L. Zhang, R.L. Barber, and U. Bach, Dye-sensitized back-contact solar cells, *Adv. Mater.* **22**, 4270 (2010). https://doi.org/10.1002/adma.201001006

13. T. Ma, Q. Song, D. Tadaki, M. Niwano, and A. Hirano-Iwata, Unveil the full potential of integrated-back-contact perovskite solar cells using numerical simulation, *ACS Appl. Energy Mater.* **1** (3), 970 (2018). https://doi.org/10.1021/acsaem.8b00044

14. Z. Yang, W. Yang, X. Yang, J.C. Greer, J. Sheng, B. Yan, and J. Ye, Device physics of back-contact perovskite solar cells, *Energy Environ. Sci.* **13** (6), 1753 (2020). https://doi.org/10.1039/C9EE04203B

15. Y. Feng, Y. Zhang, C. Duan, M. Zhao, and J. Dai, Optical properties of CsFAMA-based perovskite film and its application in the inverted solar cells with poly(methyl methacrylate) passivation layer, *Opt. Mater. Express* **12** (8), 3262 (2022). https://doi.org/10.1364/OME.463437

16. X. Li, N.P. Hylton, V. Giannini, K.-H. Lee, N.J. Ekins-Daukes, and S.A. Maier, Multi-dimensional modeling of solar cells with electromagnetic and carrier transport calculations, *Prog. Photovolt. Res. Appl.* **21** (1), 109 (2013). https://doi.org/10.1002/pip.2159

17. P. Li, L. Lin, H. Xiong, L. Jiang, S.-Y. Lien, J. Li, W.-H. Sun, and Y. Qiu, Highly efficient and industrially feasible interdigitated back-contact perovskite solar cells with front carrier transport layers selected using two-dimensional simulation, *Solar RRL* **6** (2), 2100878 (2022). https://doi.org/10.1002/solr.202100878

18. E.O. Shalenov, K.N. Dzhumagulova, Y.S. Seitkozhanov, A. Ng, C. Valagiannopoulos, and A.N. Jumabekov, Insights on desired fabrication factors from modeling sandwich and quasi-interdigitated back-contact perovskite solar cells, *ACS Appl. Energy Mater.* **4** (2), 1093 (2021). https://doi.org/10.1021/acsaem.0c02120

19. M. Minbashi and E. Yazdani, Comprehensive study of anomalous hysteresis behavior in perovskite-based solar cells, *Sci. Rep.* **12** (1), 14916 (2022). https://doi.org/10.1038/s41598-022-19194-5

20. M.A. Nalianya, C. Awino, H. Barasa, V. Odari, F. Gaitho, B. Omogo, and M. Mageto, Numerical study of lead-free CsSn0.5Ge0.5I3 perovskite solar cell by SCAPS-1D, *Optik* **248**, 168060 (2021). https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.168060

Авторлар туралы мәлімет:

Қуаныш Тлекова – докторант, Қ.И. Сәтбаев ат. Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті (Алматы, Қазақстан, e-mail: kuanysh.tlekova@gmail.com).

Гүлназ Толеубай – докторант, Қ.И. Сәтбаев ат. Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті (Алматы, Қазақстан, e-mail: gulnaz_97b@mail.ru).

Асхат Нұралы – докторант, Қ.И. Сәтбаев ат. Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті (Алматы, Қазақстан, e-mail: askhat.nuraly.98@gmail.com).

Дидар Шоков – оқытушы, Қ.И. Сәтбаев ат. Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті (Алматы, Қазақстан, e-mail: didar.shokov@gmail.com)

Карлыгаш Джумагулова – физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан, e-mail: dzhumagulova.karlygash@gmail.com)

Ерик Шаленов (корреспондент автор) – PhD, қауымдастырылған профессор, Қ.И. Сәтбаев ат. Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті (Алматы, Қазақстан, e-mail: shalenov.erik@physics.kz).

Information about authors:

Kuanysh Tlekova – PhD student, Satbayev University (Almaty, Kazakhstan, e-mail: kuanysh.tlekova@gmail.com)

Gulnaz Toleubay– PhD student, Satbayev University (Almaty, Kazakhstan, e-mail: gulnaz_97b@mail.ru).

Askhat Nuraly – PhD student, Satbayev University (Almaty, Kazakhstan, e-mail: askhat.nuraly.98@gmail.com).

Didar Shokov – lecturer, Satbayev University (Almaty, Kazakhstan, e-mail: didar.shokov@gmail.com)

Karlygash Dzhumagulova - doctor of physical and mathematical sciences, professor, Farabi University (Almaty, Kazakhstan, e-mail: dzhumagulova.karlygash@gmail.com)

Erik Shalenov (corresponding author) – PhD, Assoc. Prof., Satbayev University (Almaty, Kazakhstan, e-mail: shalenov.erik@physics.kz).

Информация об авторах:

Куаныш Тлекова – докторант, Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева (Казахстан, Алматы, e-mail: kuanysh.tlekova@gmail.com).

Гульназ Толеубай – докторант, Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева (Казахстан, Алматы, e-mail: gulnaz_97b@mail.ru).

Асхат Нұралы – докторант, Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева (Казахстан, Алматы, e-mail: askhat.nuraly.98@gmail.com).

Дидар Шоков – преподаватель, Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева (Казахстан, Алматы, e-mail: didar.shokov@gmail.com)

Карлыгаш Джумагулова – докт. физ.-мат.наук, проф., Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Казахстан, Алматы, e-mail: dzhumagulova.karlygash@gmail.com)

Ерик Шаленов (автор корреспондент) – PhD, ассоц. профессор, Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева (Казахстан, Алматы, e-mail: shalenov.erik@physics.kz).

***Мақала тарихы**: түсті: 04 шілде 2026; түзетілді: 10 құргүйек; қабылданды: 05 қазан 2026.*

***Article history:** received: 04 July 2026; revised: 10 September; accepted: 05 October 2026.*

***История статьи:** поступила: 04 июля 2026; после доработки: 10 сентября; принята: 05 октября 2026.*