

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ТАНДЕМНЫХ ПЕРОВСКИТ/КРЕМНИЕВЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ПРОСЛОЙКОЙ ИЗ ЧЕРНОГО КРЕМНИЯ

Г.Е. АЙВАЗЯН^{1*}, Л.М. ЛАХОЯН¹, А. USMAN²

¹Национальный политехнический университет Армении, Ереван, Армения

²King Mongkut's University of Technology Thonburi, Bangkok, Thailand

*e-mail: agagarm@gmail.com

(Поступила в редакцию 17 сентября 2025 г.)

Методом численного моделирования в программной среде SCAPS-1D исследовано влияние прослойки черного кремния (black silicon, b-Si) на фотоэлектрические характеристики tandemных перовскит/кремниевых солнечных элементов. Показано, что нанотекстурированная прослойка b-Si толщиной 640 нм повышает КПД моделируемого элемента от 27.17 до 28.97%. Основной вклад в прирост КПД связан с увеличением плотности тока короткого замыкания, обусловленным исключительно низким коэффициентом отражения и улучшенным светоулавливанием в нижнем кремниевом субэлементе. Показано качественное согласие результатов моделирования с экспериментом и доминирующий вклад оптических эффектов в наблюдаемое улучшение характеристик. Методом параметрического анализа определена оптимальная толщина прослойки b-Si (~530 нм), обеспечивающая согласование токов субэлементов и максимальный КПД на уровне 29%.

1. Введение

Широко распространенные однопереходные солнечные элементы на основе кристаллического кремния (Si) вплотную приблизились к теоретическому пределу эффективности Шокли–Квайссера (Shockley–Queisser), составляющему ~29.4% [1]. Перспективным направлением для его преодоления является создание tandemных структур, объединяющих поглотители с комплементарными ширинами запрещенных зон E_g [2–4]. В частности, двухпереходные tandemные элементы на основе верхнего перовскитного ($E_g=1.5–1.8$ эВ) и нижнего кремниевых ($E_g=1.12$ эВ) субэлементов демонстрируют сертифицированный КПД (Power Conversion Efficiencies, PCE), превышающий 33% [5].

Оптические потери, особенно на границе раздела между субэлементами, остаются одной из основных проблем tandemных перовскит/Si солнечных элементов. Стандартное микронное текстурирование Si подложек в форме пирамид или V-образных канавок недостаточно эффективно снижает отражение и затрудняет последующее осаждение высококачественных перовскитных слоев [6–8]. Альтернативой является нанотекстурированный черный кремний (black silicon, b-Si), который демонстрирует исключительно низкое отражение благодаря градиентному профилю показателя преломления [9].

Несмотря на успешное применение антиотражающего слоя b-Si в однопереходных солнечных элементах [10–12], его интеграция в tandemные структуры изучена недостаточно. В предыдущих работах мы экспериментально продемонстрировали возможность осаждения однородного перовскита на кремниевую подложку со слоем b-Si [13, 14] и на основе метода переноса матриц разработали оптическую модель, предсказывающую значительное снижение отражения в структуре перовскит/b-Si/Si [15]. Однако для оценки итогового вклада в PCE tandemного солнечного элемента необходимо проведение комплексного электрического моделирования, которое позволило бы связать оптические преимущества прослойки b-Si с фотоэлектрическими характеристиками устройства.

Программная среда Solar Cell Capacitance Simulator (SCAPS) широко используется для численного моделирования процессов генерации, переноса, рекомбинации и экстракции носителей заряда в солнечных элементах, позволяя получать их вольт-амперные характеристики (ВАХ). Ряд исследований, включая наши предыдущие работы [16, 17], применял SCAPS для оптимизации однопереходных и tandemных солнечных элементов, исследуя влияние ширины запрещенной зоны, плотности дефектов и толщины составляющих слоев [18–21]. Однако анализ, связывающий оптические преимущества прослойки b-Si с прогнозируемыми фотоэлектрическими характеристиками tandemного устройства, до сих пор не проводился.

Целью данной работы является численное моделирование фотоэлектрических характеристик tandemных солнечных элементов конфигурации перовскит/b-Si/Si с использованием программного пакета SCAPS. Результаты моделирования сопоставляются с экспериментальными данными для верификации предложенной модели и определения оптимальной толщины прослойки b-Si.

2. Экспериментальные образцы и методика моделирования

На рис.1 представлено схематическое изображение структуры исследуемых tandemных солнечных элементов. Верхний субэлемент включает перовскитный фотопоглотитель с электронно/дырочно-транспортными слоями (ETL/HTL). Нижний субэлемент выполнен в виде гетероперехода на основе аморфного Si (a:SiH), сформированного на кремниевой подложке с нанотекстурированным поверхностным слоем b-Si. Электрическое соединение между субэлементами

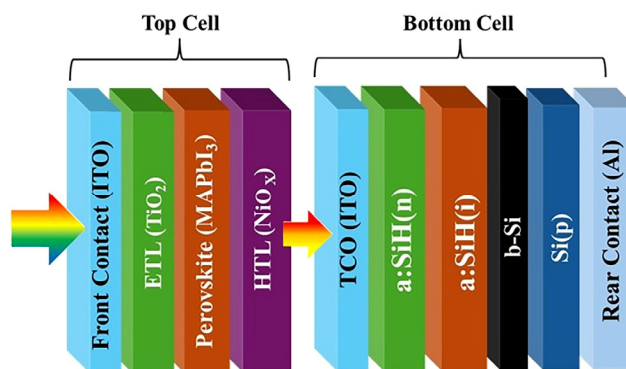


Рис.1. Структура tandemного солнечного элемента с прослойкой черного кремния.

обеспечивает прозрачный проводящий оксидный (TCO) рекомбинационный слой. Контактная система включает прозрачный фронтальный электрод (ITO) и тыльный алюминиевый (Al) контакт.

Для изготовления нижних субэлементов использовались кремниевые подложки p -типа с ориентацией (100) и удельным сопротивлением 3.0–5.0 Ом·см. Наноструктурирование поверхности проводили методом реактивно-ионного травления в режиме, оптимизированном для однопереходных солнечных элементов [14]. В результате формировался массив конических нанопил с периодом ~150, диаметром основания ~100 и высотой ~640 нм. Слои собственного/легированного аморфного Si [a-Si:H(i)/a-Si:H(n)] осаждали методом PECVD. Тыльный контакт формировали термическим испарением Al, а рекомбинационный слой наносили с помощью метода магнетронного распыления ITO. Затем подложки разделяли лазерным скрайбированием на отдельные элементы размером 1.1×1.1 см².

Для формирования перовскитного субэлемента на поверхность нижнего субэлемента напыляли слой NiO_x (HTL), затем осаждали слой смешанного галогенидного перовскита CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl_x (MAPbI_{3-x}) методом совместного испарения прекурсоров PbI₂ и CH₃NH₃Cl_x [13]. В качестве ETL использовали напыленный слой TiO₂, на котором затем формировали фронтальный контакт из ITO. Для сравнительного анализа также были изготовлены образцы с планарной конфигурацией (без прослойки b-Si).

В качестве платформы численного моделирования использовалось одномерное программное обеспечение SCAPS-1D. Программа основана на решении системы уравнений Пуассона и непрерывности. Первое описывает распределение электростатического потенциала в зависимости от плотности пространственного заряда (1), а уравнения непрерывности определяют поведение электронов (2) и дырок (3) [16]:

$$\nabla^2 \psi = -q/\varepsilon(p - n + N_D - N_A), \quad (1)$$

$$\nabla J_n - q \frac{\partial n}{\partial t} = +qR, \quad (2)$$

$$\nabla J_p - q \frac{\partial p}{\partial t} = -qR, \quad (3)$$

где ψ – электростатический потенциал, N_A и N_D – концентрации акцепторной и донорной примесей, ε – диэлектрическая проницаемость материала, q – элементарный заряд, R – скорость рекомбинации носителей заряда, J_n и J_p – плотности токов электронов и дырок, соответственно.

Моделирование выполнялось в три этапа. На первом этапе были смоделированы фотоэлектрические характеристики перовскитного субэлемента при стандартном спектре освещения (AM1.5G, 1000 Вт/м², 25°C). Затем моделировали нижний кремниевый субэлемент при спектре, отфильтрованном перовскитным субэлементом, в соответствии с формулой:

$$S_f(\lambda) = S_i(\lambda) \exp\left(\sum_{i=1}^4 -a_{mi}(\lambda)d_{mi}\right), \quad (4)$$

где $S_f(\lambda)$ – интенсивность света отфильтрованного спектра, $S_i(\lambda)$ – интенсивность падающего спектра, λ – длина волн света, a_{mi} и d_{mi} – коэффициент поглощения и толщина i -го слоя, $i = 1, 2, 3, 4$ относится к слоям ITO, TiO₂, перовскита и NiO_x, соответственно).

На заключительном этапе была смоделирована tandemная конфигурация при электрически последовательном соединении составляющих субэлементов. При этом плотность тока короткого замыкания J_{sc} tandemного элемента ограничивалась наименьшим значением фототока среди субэлементов, а напряжение холостого хода V_{oc} равнялось сумме напряжений обоих субэлементов. Коэффициент заполнения FF и PCE рассчитывали на основе смоделированной ВАХ.

В табл.1 представлены параметры, использованные в моделировании. Из них единственным переменным является толщина слоя b-Si (средняя высота наноигл). Основные физические параметры (E_g , энергия сродства к электрону χ_e , диэлектрическая проницаемость ϵ_m , эффективные плотности состояний в валентной зоне и зоне проводимости N_V и N_C , подвижность электронов и дырок μ_n и μ_p , плотность дефектов N_t) для верхнего субэлемента, гетеропереходных слоев и Si были взяты из литературных источников [16, 18, 21]. Остальные параметры (N_A и N_D , d_m) соответствовали параметрам экспериментальных образцов. Параметры прослойки b-Si были определены в соответствии с оптической моделью [15], согласно которой этот материал рассматривался как однородная эффективная среда с электронными свойствами, идентичными свойствам объемного Si. Комплексный показатель преломления слоя b-Si, промежуточный между значениями для перовскита и Si, был определен с использованием приближения эффективной среды Бруггемана (Bruggeman).

Табл.1. Параметры моделирования

Параметр	ITO	TiO ₂	NiO _x	Si(p)/ b-Si	a:SiH(i)/ a:SiH(n)	MAPbI ₃
d_m , nm	40	30	30	240/200- 1200	5	600
E_g , эВ	3.5	3.2	3.6	1.12	1.7	1.57
χ_e , эВ	4.0	4.26	2.0	4.05	3.9	3.9
ϵ_m	8.9	9	12.0	6.5	11.9	6.5
N_C , см ⁻³	2.2×10^{18}	2.0×10^{18}	2.5×10^{19}	3.2×10^{19}	2.5×10^{20}	2.2×10^{17}
N_V , см ⁻³	1.8×10^{19}	2.0×10^{18}	2.5×10^{19}	1.8×10^{19}	2.5×10^{20}	1.8×10^{19}
μ_n , см ² /Вс	20	20	0.01	1500	20	2
μ_p , см ² /Вс	10	10	0.01	450	5	2
N_A , см ⁻³	0	0	10^{17}	10^{16}	0	0
N_D , см ⁻³	10^{17}	2.1×10^{19}	0.0	0.0	$0/10^{20}$	10^{17}
N_t , см ⁻³	10^{16}	10^{15}	10^{15}	10^{14}	10^{14}	10^{13}

3. Результаты и их обсуждение

На рис.2 представлены смоделированные ВАХ tandemных перовскит/Si солнечных элементов и составляющих субэлементов для планарной и нанотекстурированной конфигурации при толщине прослойки b-Si 640 нм. В табл.2 обобщены смоделированные и экспериментальные фотоэлектрические параметры. Кроме tandemных солнечных элементов также исследовались соответствующие одиночные кремниевые солнечные элементы, измеренные до формирования перовскитного субэлемента. Измерения проводили с использованием солнечного имитатора и тестовой системы $I-V$ (Ossila) в

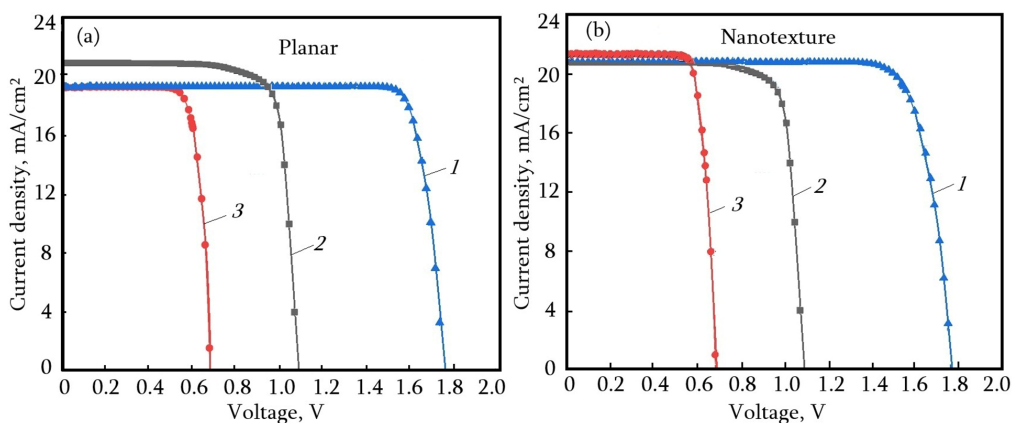


Рис.2. Смоделированные ВАХ tandemных солнечных элементов (1), перовскитных (2) и кремниевых (3) субэлементов для планарной (а) и нанотекстурированной (б) конфигураций.

стандартных условиях испытаний (AM 1.5G).

Результаты моделирования наглядно демонстрируют значительное преимущество конфигурации с прослойкой b-Si. Наличие нанотекстуры приводит к повышению PCE от 27.17 до 28.97%, что соответствует относительному приросту на 6.6%. Основной вклад в этот увеличение вносит существенный рост J_{sc} от 19.81 до 21.12 мА/см², обусловленный исключительно низким отражением и улучшенным светоулавливанием в нижнем субэлементе. Значения V_{oc} и FF остаются практически неизменными на уровне ~1.77 В и 77% для обеих конфигураций. Это согласуется с принятым в модели допущением об идентичной плотности дефектов ($N_t = 10^{14} \text{ см}^{-3}$) в слое b-Si и объемного Si, что указывает на отсутствие значительных дополнительных рекомбинационных потерь, вносимых прослойкой.

Из представленных результатов следует, что смоделированные фотоэлектрические параметры нижнего кремниевого субэлемента оказались

Табл.2. Смоделированные и экспериментальные фотоэлектрические параметры планарных и нанотекстурированных tandemных солнечных элементов

Образец	V_{oc} , мВ	J_{sc} , мА/см²	FF, %	PCE, %
Моделированный b-Si/Si	679	21.54	80.31	11.74
Экспериментальный b-Si/Si (одиночный)	661	33.24	80.66	17.72
Моделированный перовскит/Si	1772	19.81	77.42	27.17
Моделированный перовскит/b-Si/Si	1772	21.12	77.18	28.97
Экспериментальный перовскит/Si	1773	19.02	78.02	26.31
Экспериментальный перовскит/b-Si/Si	1752	20.55	77.34	27.84

существенно ниже, чем у экспериментальных одиночных (single) солнечных элементов на основе b-Si. Это объясняется тем, что при моделировании учитывалось освещение нижнего субэлемента спектром, отфильтрованным перовскитным верхним субэлементом. Кроме того, при расчетах использовался эффективный показатель преломления для слоя b-Si, промежуточный между значениями для перовскита и Si, тогда как в одиночных элементах он определяется показателями преломления воздуха и Si. Расхождение могло бы быть еще более значительным, поскольку в модели предполагалось, что процесс нанотекстурирования не приводит к значительным дополнительным рекомбинационным потерям в слое b-Si. В реальности большая площадь поверхности b-Si может способствовать повышению плотности дефектов и, как следствие, к нежелательному увеличению скорости рекомбинации носителей заряда, что ухудшает спектральный отклик и электрические характеристики элементов. В нашем случае данный эффект частично компенсируется использованием сверхтонкого слоя a-Si:H(i), который служит хорошим пассивирующим покрытием для слоев b-Si [22, 23].

Результаты моделирования tandemных солнечных элементов качественно согласуются с экспериментальными данными (табл.2), что подтверждает доминирующую роль оптических преимуществ прослойки b-Si в наблюдаемом росте PCE. Расхождение в абсолютных значениях между моделью и экспериментом, вероятно, обусловлено факторами, не полностью учтенными в одномерной модели: проблемы с латеральной проводимостью в слоях ИТО, неидеальность рекомбинационного контакта, высокая плотность дефектов и неоднородность покрытия перовскитом нанотекстуры. С другой стороны, прослойка b-Si может способствовать увеличению полезного поглощения в верхнем субэлементе за счет рассеяния света, отраженного от её поверхности [14].

В tandemных солнечных элементах общий фототок ограничивается субэлементом с наименьшим J_{sc} . В планарной конфигурации лимитирующим являлся нижний кремниевый субэлемент ($J_{sc} \sim 19.81 \text{ mA/cm}^2$ против $\sim 21.12 \text{ mA/cm}^2$ у перовскитного). В нанотекстурированной конфигурации, вследствие увеличения фототока нижнего субэлемента ($\sim 21.54 \text{ mA/cm}^2$), лимитирующим становится перовскитный субэлемент. Следовательно, для оптимизации tandemного элемента необходимо точное согласование токов (current matching) субэлементов, поскольку их несоответствие приводит к накоплению носителей заряда в рекомбинационном слое и дополнительным потерям.

Для достижения согласования токов методом параметрического анализа с использованием функций Batch и Recorder в SCAPS-1D было исследовано влияние толщины прослойки b-Si в диапазоне 200–1200 нм.

На рис.3 показаны зависимости J_{sc} субэлементов и PCE tandemного элемента от толщины прослойки b-Si. С увеличением толщины слоя b-Si фототок перовскитного субэлемента остается практически неизменным, в то время для нижнего субэлемента он монотонно возрастает, демонстрируя насыщение при толщинах $\geq 900 \text{ нм}$. Условие согласования токов достигается при толщине прослойки b-Si $\sim 530 \text{ нм}$, когда оба субэлемента генерируют $J_{sc} \sim 21.12 \text{ mA/cm}^2$. Это соответствует максимальной значеную PCE tandemного элемента на уровне 29%. Дальнейшее увеличение толщины b-Si нецелесообразно, так как устройство становится ограниченным по току перовскитным субэлементом, и

дополнительное поглощение в нижнем субэлементе не приводит к росту общего фототока. Примечательно, что оптимальная толщина для одиночных b-Si/Si элементов оказывается выше (640 нм) [14], поскольку в них отсутствует ограничение, накладываемое необходимостью согласования токов в тандеме. Этот контраст подчеркивает ключевой принцип проектирования тандемных элементов: индивидуальная оптимизация субэлементов недостаточна и может привести к неоптимальным характеристикам итогового устройства.

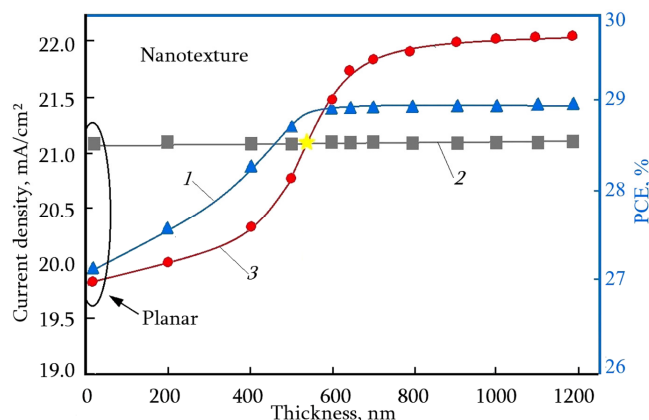


Рис.3. Зависимости PCE тандемного элемента (1), токов короткого замыкания перовскитных (2) и кремниевых (3) субэлементов от толщины прослойки b-Si.

4. Заключение

Методом численного моделирования в SCAPS-1D исследовано влияние нанотекстурированной прослойки из черного кремния (b-Si) на фотоэлектрические характеристики тандемных перовскит/кремниевых солнечных элементов. Показано, что наличие прослойки b-Si между субэлементами повышает эффективность на 1.8% преимущественно за счет увеличения плотности тока короткого замыкания, обусловленного снижением оптического отражения и улучшением светопоглощения в нижнем кремниевом субэлементе. Установлено, что в тандемной наноструктурированной конфигурации лимитирующим по току становится перовскитный субэлемент, в то время как в планарной структуре таковым являлся кремниевый субэлемент. Методом параметрического анализа определена оптимальная толщина прослойки b-Si (~530 нм), обеспечивающая согласование токов между верхним и нижним субэлементами и максимальную эффективность на уровне 29%.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке РА в рамках научного проекта № 21AG-2B011.

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Shockley, H.J. Queisser. J. Appl. Phys., **32**, 510 (1961).
2. J. Li, K. Wang, J. Liu, Y. Ye, S. Liu. Adv. Energy Mater., **15**, 202500114 (2025).
3. Y. Shi, J.J. Berry, F. Zhang. ACS Energy Lett., **9**, 1305 (2024).
4. E. Aydin, T.G. Allen, M. De Bastiani, A. Razzaq, L. Xu, E. Ugur, J. Liu, S. De Wolf. Science, **383**, 6679 (2024).

5. M.A. Green, E.D. Dunlop, M. Yoshita, N. Kopidakis, K. Bothe, G. Siefer, X. Hao, J.Y. Jiang. *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, **33**, 795 (2025).
6. D. Zhang, T. Wu, B. Li, D. Ding, R. Li, J. Wei, H. Zhang, C. Kan, Y. Yao, P. Hang, Z. Yu, Z. Ni, K. Qiu, D. Yang, X. Yu. *Nat. Commun.*, **16**, 7331 (2025).
7. Z. Ying, X. Yang, X. Wang, J. Ye. *Adv. Mater.*, **36**, 2311501 (2024).
8. L. Cojocaru, K. Wienands, T.W. Kim, S. Uchida, A.J. Bett, S. Rafizadeh, J.C. Goldschmidt, S.W. Glunz. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **10**, 26293 (2018).
9. G. Ayvazyan. *Black Silicon: Formation, Properties, and Application*. Springer, Cham, 2024.
10. J.Y.H. Chai, B.T. Wong, S. Juodkazis. *Mater. Today Energy*, **18**, 100539 (2020).
11. H. Jia, F. Xie, E. Nefzaoui, T. Bourouina, H. Jiang, X. Zhang. *Adv. Photonics*, **7**, 034004 (2025).
12. Z. Fan, D. Cui, Z. Zhang, Z. Zhao, H. Chen, Y. Fan, P. Li, Z. Zhang, C. Xue, S. Yan. *Nanomaterials*, **11**, 41 (2020).
13. G.Y. Ayvazyan, D.L. Kovalenko, M.S. Lebedev, L.A. Matevosyan, A.V. Semchenko. *J. Contemp. Phys.*, **57**, 274 (2022).
14. G. Ayvazyan, H. Dashtoyan, L. Hakhoyan. *Phys. Status Solidi RRL*, **19**, 2400235 (2025).
15. G. Ayvazyan, F. Gasparyan, V. Gasparian. *Opt. Mater.*, **140**, 113879 (2023).
16. A. Usman, T. Bovornratanaraks. *ACS Omega*, **9**, 39663 (2024).
17. A. Usman, T. Bovornratanaraks. *Sol. Energy*, **284**, 113043 (2024).
18. P.R. Jubu, Z.S. Mbalaha, E.V. Tikyaa, O.S. Obaseki, K.O. Ighodalo, O. Adedokun, A. Nathan-Abutu, M.B. Ochang, Y. Yusof, M.Z. Pakhuruddin. *Next Mater.*, **9**, 101166 (2025).
19. E. Akoto, V. Isahi, V. Odari, C. Maghanga, F. Nyongesa. *Results Opt.*, **12**, 100470 (2023).
20. R.M. Moinuddin, M. Hasan, M. Rahaman, K.S. Islam. *AIP Adv.*, **14**, 085126 (2024).
21. M. Bacha, A. Saadoune, I. Youcef. *Opt. Mater.*, **122**, 111734 (2021).
22. A.S. Gudovskikh, A.I. Baranov, A.V. Uvarov, E.A. Vyacheslavova, A.A. Maksimova, A. Salimi, D.A. Kirilenko, O. Aydın, R. Turan, H. Nasser. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **58**, 045101 (2024).
23. E. Özkol, P. Procel, Y. Zhao, et al., *Phys. Status Solidi RRL*, **14**, 1900087 (2020).

SIMULATION OF TANDEM PEROVSKITE/SILICON SOLAR CELL CHARACTERISTICS WITH A BLACK SILICON INTERLAYER

G.Y. AYVAZYAN, L.M. LAKHOYAN, A. USMAN

The influence of a black silicon (b-Si) interlayer on the photovoltaic characteristics of tandem perovskite/silicon cells was investigated by numerical modeling in the SCAPS-1D software environment. It is shown that a 640 nm thick nanotextured b-Si interlayer increases the efficiency of the modeled device from 27.17% to 28.97%. The main contribution to the efficiency gain is associated with an increase in the short-circuit current density, resulting from exceptionally low reflection and improved light trapping in the bottom silicon subcell. The qualitative agreement between the simulation results and the experiment and the dominant contribution of optical effects to the observed improvement in performance are shown. Using parametric analysis, the optimal thickness of the b-Si interlayer (~530 nm) was determined, ensuring current matching between the subcells and a maximum efficiency of 29%.