

Фотохимическая стабильность PbI_2 и PbBr_2 компонентов перовскитных солнечных элементов: оптические и XPS спектры и DFT расчеты

И.С. Жидков, А.И. Кухаренко, А.И. Потеряев, А.Ф. Акбулатов¹, П.А. Трошин¹,
Э.З. Курмаев

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург

¹Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

Фотохимическая деградация галогенидов свинца PbI_2 и PbBr_2 , используемых при синтезе перовскитных солнечных элементов исследовалась методами оптической и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) и первопринципных зонных расчетов. Установлено, что для PbI_2 после 200 ч светового облучения наблюдается значительное снижение оптического поглощения и выделение металлического свинца, что указывает на фотохимическую деградацию этого галогенида вследствие разложения на Pb -металл и газообразный йод: $\text{PbI}_2 \rightarrow \text{Pb} + \text{I}_2\uparrow$. С другой стороны, обнаружено, что оптические и XPS спектры PbBr_2 не изменяются до 1000 часов воздействия видимого света. Согласно расчетам методом теории функционала плотности, энергии образования металлических и галогенидных вакансий для PbBr_2 оказались выше, чем для PbI_2 , что подтверждает его более высокую устойчивость к облучению видимым светом. Полученные результаты позволяют рекомендовать использовать избыток PbBr_2 в прекурсоры MAPbI_3 ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) не только для уменьшения плотности дефектов и увеличения времени жизни и эффективности носителей, но также для повышения фотохимической стабильности перовскитных солнечных элементов.

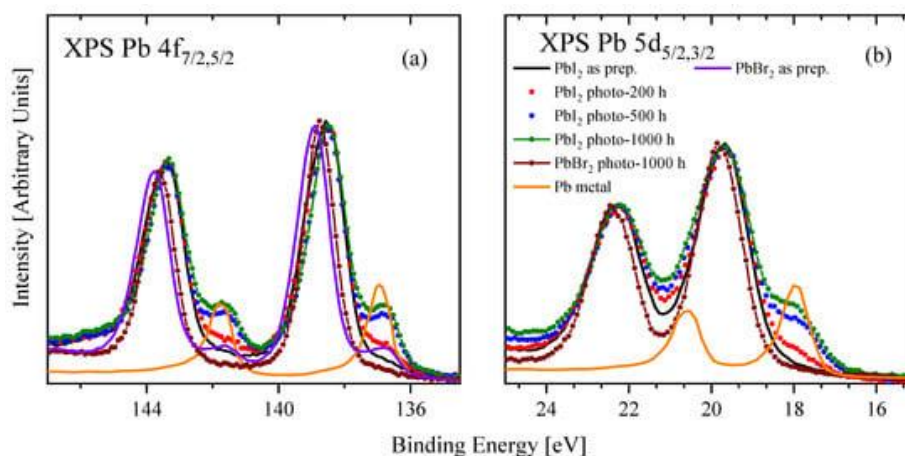


Рисунок - 1. XPS Pb 4f (a) Pb 5d (b) основных уровней PbI_2 и PbBr_2 до и после облучения видимым светом в течение 1000 часов, демонстрирующий исчезновение фотохимической деградации для PbBr_2 .

Публикации:

[The Photochemical Stability of \$\text{PbI}_2\$ and \$\text{PbBr}_2\$: Optical and XPS and DFT Studies](#) [Текст] / Ivan S. Zhidkov, Azat F. Akbulatov, Alexander I. Poteryaev, Andrey I. Kukharenko, Alexandra V. Rasmetyeva, Lyubov A. Frolova, Pavel A. Troshin, Ernst Z. Kurmaev // *Coatings*. — 2023. — V. 13. — P. 784—791. I.F.=2.236. Q2.