

UO‘K537.9

**Ibragimova Nilufarxon G‘anijon qizi**

Namangan davlat universiteti tayanch doktoranti

**Sharibayev Nosir Yusufjanovich**

Namangan davlat texnika universiteti professori

[sharibayev.niti@gmail.com](mailto:sharibayev.niti@gmail.com)

**Ibragimov Raximjon Xasanboy o‘g‘li**

Namangan davlat universiteti o‘qituvchisi

[raximjon2018@gmail.com](mailto:raximjon2018@gmail.com)

**QO‘RG‘OSHINSIZ PEROVSKITLAR ASOSIDAGI KO‘P KOMPONENTLI  
YARIMO‘TKAZGICHLARNING TAQIQLANGAN ZONA KENGLIGIGA  
TA’SIRLARNI NAZARIY TAHLILI**

**Annotatsiya:** Mazkur tadqiqotda qo‘rg‘oshinsiz perovskit materiali –  $\text{CsSnI}_3$  ning taqiqlangan zona kengligi ( $E_g$ ) ning harorat va konsentratsiyaga bog‘liqligi nazariy jihatdan tahlil qilindi. Harorat oshishi bilan  $E_g$  qiymatining pasayishi kristall panjaraning kengayishi, energiya sathlarining siljishi va fononlar sonining ortishi bilan izohlanadi. Bu holat tajribada 60–130 °C oralig‘ida kuzatilgan rang va faza o‘zgarishlari bilan mos keladi. Konsentratsiyaning o‘zgarishi esa Vegard qonuni asosida tushuntirilib,  $E_g$  qiymatining minimumi  $\text{SnCl}_2$  ning 40–60% oralig‘ida ekanligi aniqlanadi. Bu natijalar  $\text{Cs}_{0,4}\text{Sn}_{0,6}\text{I}_3$  tarkibining fotodetektorlar va quyosh elementlari uchun optimal variant bo‘lishini ko‘rsatadi. Tadqiqot natijalari  $\text{CsSnI}_3$  ni barqaror va ekologik toza quyosh elementi sifatida nazariy asoslashga xizmat qiladi.

**Kalit so‘zlar:**  $\text{CsSnI}_3$ , perovskit, taqiqlangan zona kengligi, harorat ta’siri, Vegard qonuni, bowing effekti,  $\text{SnCl}_2$  konsentratsiyasi, fotodetektor, quyosh elementi, ekologik toza material.

**Ибрагимова Нилуфархон Ганиджон кизи**

Намангандского государственного университета Исследователь

**Шарипбаев Носир Юсупджанович**

Намангандского государственного технического университет профессор

[sharibayev\\_niti@gmail.com](mailto:sharibayev_niti@gmail.com)

**Ибрагимов Рахимжон Хасанбой угли**

Намангандского государственного университета преподаватель

[raximjon2018@gmail.com](mailto:raximjon2018@gmail.com)

## **ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ НА ШИРИНУ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ ПЕРОВСКИТОВ БЕЗ КОРРОЗИИ**

**Аннотация:** В данной работе теоретически проанализирована зависимость ширины запрещённой зоны ( $E_g$ ) бессвинцового перовскитного материала  $\text{CsSnI}_3$  от температуры и концентрации. Уменьшение значения  $E_g$  с ростом температуры объясняется расширением кристаллической решетки, смещением энергетических уровней и увеличением числа фононов. Это поведение соответствует экспериментально наблюдаемым изменениям цвета и фазы в диапазоне температур 60–130 °C. Изменение концентрации интерпретируется на основе закона Вегарда, при этом минимальное значение  $E_g$  достигается при концентрации  $\text{SnCl}_2$  в пределах 40–60%. Полученные результаты показывают, что состав  $\text{Cs}_{0,4}\text{Sn}_{0,6}\text{I}_3$  является оптимальным для применения в фотодетекторах и солнечных элементах. Работа служит теоретическим обоснованием использования  $\text{CsSnI}_3$  как стабильного и экологически чистого материала для солнечной энергетики.

**Ключевые слова:**  $\text{CsSnI}_3$ , перовскит, ширина запрещенной зоны, температурный эффект, закон Вегарда, эффект изгиба, концентрация  $\text{SnCl}_2$ , фотодетектор, солнечный элемент, экологически чистый материал.

**Ibragimova Nilufarxon Ganijon kizi**

PhD student at Namangan State University

**Sharibayev Nosir Yusupjanovich**

Professor at Namangan State Technical University

[sharibayev.niti@gmail.com](mailto:sharibayev.niti@gmail.com)

**Ibragimov Rakhimjon Khasanboy ugli**

Teacher at Namangan State University

[raximjon2018@gmail.com](mailto:raximjon2018@gmail.com)

**THEORETICAL ANALYSIS OF THE EFFECTS ON THE BANDGAP  
OF MULTICOMPONENT SEMICONDUCTORS BASED ON LEAD-FREE  
PEROVSKITES**

**Annotation:** *This study theoretically analyzes the dependence of the band gap energy ( $E_g$ ) of the lead-free perovskite material  $\text{CsSnI}_3$  on temperature and concentration. The decrease in  $E_g$  with increasing temperature is explained by lattice expansion, energy level shifts, and an increase in phonon numbers. This behavior corresponds with experimental observations of color and phase changes in the 60–130°C range. The variation in concentration is interpreted based on Vegard's law, and the minimum  $E_g$  value is found at 40–60%  $\text{SnCl}_2$  concentration. These findings suggest that the composition  $\text{Cs}_{0.4}\text{Sn}_{0.6}\text{I}_3$  is optimal for use in photodetectors and solar cells. The results provide a theoretical basis for utilizing  $\text{CsSnI}_3$  as a stable and environmentally friendly solar energy material.*

**Key words:**  $\text{CsSnI}_3$ , perovskite, band gap, temperature effect, Vegard's law, bowing effect,  $\text{SnCl}_2$  concentration, photodetector, solar cell, environmentally friendly material.

## **Kirish**

Zamonaviy quyosh fotoelementlari, detektorlar va optoelektronika qurilmalarida ishlatiladigan materiallarga bo'lgan ehtiyoj tobora ortib bormoqda. Shu jihatdan perovskit tipidagi yarimo'tkazgich materiallar, xususan  $\text{CsSnI}_3$  kabi qo'rg'oshinsiz iorganik birikmalar, ekologik xavfsizligi, yuqori yutilish koeffitsiyenti, taqiqlangan zonani sozlash imkoni va oddiy ishlab chiqarish texnologiyasi bilan alohida ahamiyat kasb etadi. Shuningdek  $\text{Sn}^{2+}$  ionining barqaror emasligi va oksidlanishga moyilligi sababli ushbu materialning xossalarini barqarorlashtirish, Egni moslashtirish maqsadida dopand ionlari masalan,  $\text{Bi}^{3+}$  yoki  $\text{Sb}^{3+}$  - bilan qisman almashtirishdolarb yo'nalishga aylandi. Ammo bu dopirovkaning ta'sirini tajriba orqali o'rganish har doim ham o'rganish imkoniyatiga ega emas. Shunday sharoitda nazariy modellashtirish usullari, xususan material xossalarining konsentratsiya va haroratga bog'liqligini tahlil qilishda samarali vosita bo'lib xizmat qiladi.

## **Adabiyotlar tahlili**

Qo'rg'oshinsiz perovskite materiallar uchun taqiqlangan zonaning tashqi sharoitlarga bog'liqligi nazariy asosda ko'rib chiqilishi va bu bog'liqlik empirik modellar orqali chuqur matematik tahlil qilishdir.

Perovskit tuzilmasiga ega materiallar orasida ( $\text{ABX}_3$ , bu yerda A – 12 ta X anion bilan koordinatsiyalanadigan organik yoki noorganik kation; B – 6 ta X anion bilan koordinatsiyalanadigan ikki valentli metall; X – galogen ion [1]),  $\text{FAPbI}_3$ ,  $\text{MAPbI}_3$ ,  $\text{CsPbI}_3$  va boshqa qo'rg'oshinli perovskitlar so'nggi tadqiqotlarda yaxshi samaradorlik ko'rsatgan. Biroq, tarkibida toksik qo'rg'oshin mavjudligi bizni B pozitsiyasini boshqa element bilan almashtirish haqida o'ylashga majbur qiladi, bu esa perovskitning taqiqlangan zonasiga (band gap) kuchli ta'sir ko'rsatmaydi. Quyosh elementlarining aylantirish samaradorligi materiallarning yorug'likni yutish xususiyatlariga bog'liq bo'lib, bu esa o'z navbatida taqiqlangan zona kengligiga kuchli bog'liqdir. Ma'lumki,  $\text{CsSnX}_3$  oilasiga mansub galogen perovskitlar yorug'likni maksimal darajada yuta olish xususiyatiga ega bo'lgan nomzod material

bo'lishi mumkin. Biroq perovskit matritsasidagi qalay mavjudligi bu materiallarni oddiy sharoitga yaqin haroratlarda termik jihatdan beqaror qiladi. Qalay tarkibidagi eng barqaror perovskitlar –  $\text{CsSnCl}_3$  va  $\text{CsSnF}_3$  – keng taqiqlangan zonaga ega, shuning uchun haqiqiy vazifa bu –  $\text{CsSnI}_3$ ,  $\text{CsSnBr}_3$  yoki boshqa galogenli kombinatsiyalarga ega barqaror perovskitlarni sintez qilish va barqarorlashtirishning yangi usullarini ishlab chiqishdir.

### **Tadqiqot metodologiyasi**

$\text{CsSnI}_3$  ning  $E_g$  qiymati harorat oshishi bilan chiziqli ravishda ortadi (0,35meV/K), bu ko'pchilik yarimo'tkazgichlardan farqli xatti-harakatdir.[2] Cu bilan ligerlash  $E_g$  ni kamaytiradi va to'g'ridan to'g'ri taqiq zonani bilvosita taqiq zonaga aylantiradi, bu esa optoelektron xossalarga sezilarli ta'sir ko'rsatadi[3], Burstein-Moss effekti legirlash natijasida  $E_g$ ni sun'iy ravishda oshiradi bu esa boshqa materiallardan farqli xususiyatdir va qurilma samaradorligiga ta'sir qiladi.[4].

Taqiqlangan zona kengligini harorat va konsentratsiyaga bog'liqligini aniqlovchi nazariy modellar tahlil qilishdan ko'zlangan maqsad- bu materialning optoelektron xossalarini oldindan bashorat qilish imkonini yaratishdir. Amaliy tajribalarni o'tkazish qimmat va murakkab bo'lgan sharoitlarda nazariy modellashtirish asosida  $E_g$ ning o'zgaruvchanligini hisoblash muqobil yondoshuv sifatida katta ahamiyat kasb etadi.

| Parametr                     | Belgilanishi    | Qiymati                    | Izoh                  |
|------------------------------|-----------------|----------------------------|-----------------------|
| Tabiiy band gap              | $E_{g0}$        | $\approx 1.3\text{eV}$     | To'g'ridan-to'g'ri    |
| Kristall tuzilma             | -               | Ortorombik yoki kubik      | Haroratga bog'liq     |
| $\text{Sn}^{2+}$ ion radiusi | $r_{\text{Sn}}$ | $\approx 1.18 \text{ \AA}$ |                       |
| $\text{Cs}^+$ ion radiusi    | $r_{\text{Cs}}$ | $\approx 1.67 \text{ \AA}$ |                       |
| Lattice constant (a)         | a               | $\approx 6.2 \text{ \AA}$  | Kubik faza uchun      |
| Harorat diapazoni            | T               | 100-400 K                  | Modellashtirish uchun |

Yuqoridagi parametrlar nazariy modellar bilan ishlash uchun kerakli boshlang'ich ma'lumotlar sifatida olinadi. Zarurat tug'ilganda, ularning adabiyotlardagi o'rtacha qiymatlarini ishlatilgan.

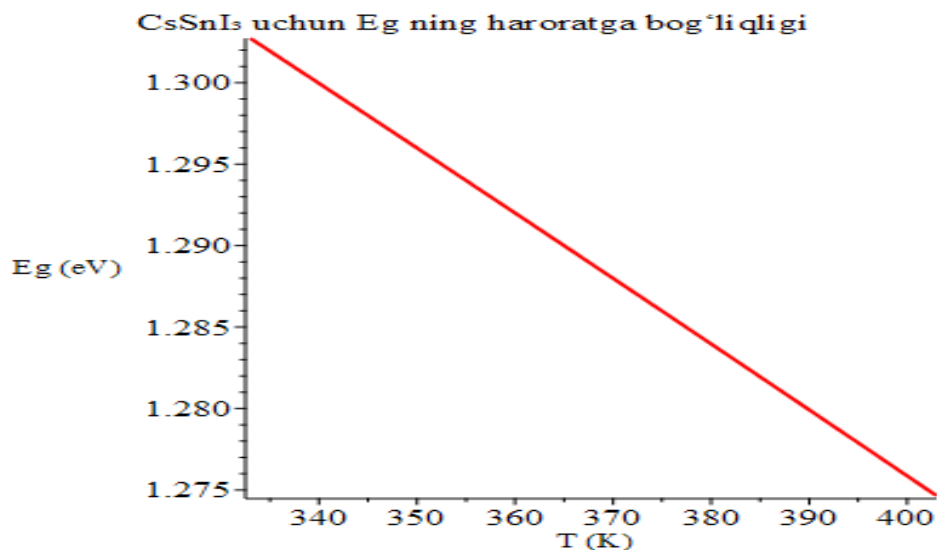
### Natijalar va ularning tahlili

Yarimo'tkazgich materiallarning taqiqlangan zona kengligi harorat oshgani sayin kamayib boradi, bu holat kristall panjaradagi fononlar sonining ortishi bilan izohlanadi. Energetik zonalarining bu haroratga bog'liq o'zgarishini ifodalovchi eng mashhur emperik model bu Varshniy modeli hisoblanadi.

Varshniy tenglamasi quyidagicha ifodalanadi:  $E_g(T) = E_{g0} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$  (1)

Bu yerda:

- $E_g(T)$  – harorat T da taqiqlangan zona kengligi [eV];
- $E_{g0}$  – absolyut nol haroratdagi ( $T=0$  K) band gap qiymati [eV]
- $\alpha$  – haroratga sezuvchanlik koeffitsiyenti (eV/K);
- $\beta$  – materialga xos empirik doimiy (K);
- $T$  – absolyut harorat [Kelvin.]



**1-rasm. CsSnI<sub>3</sub> uchun  $E_g$  ning haroratga bog'liqligi**

Parametr qiymatlarini tanlashda  $T=333\text{K}-403\text{K}$  oraliq hisoblanadi. Bu  $E_g=0,03\text{eV}$  kamayishi issiqlik ta'sirida kristall panjaraning kengayishi, energiya

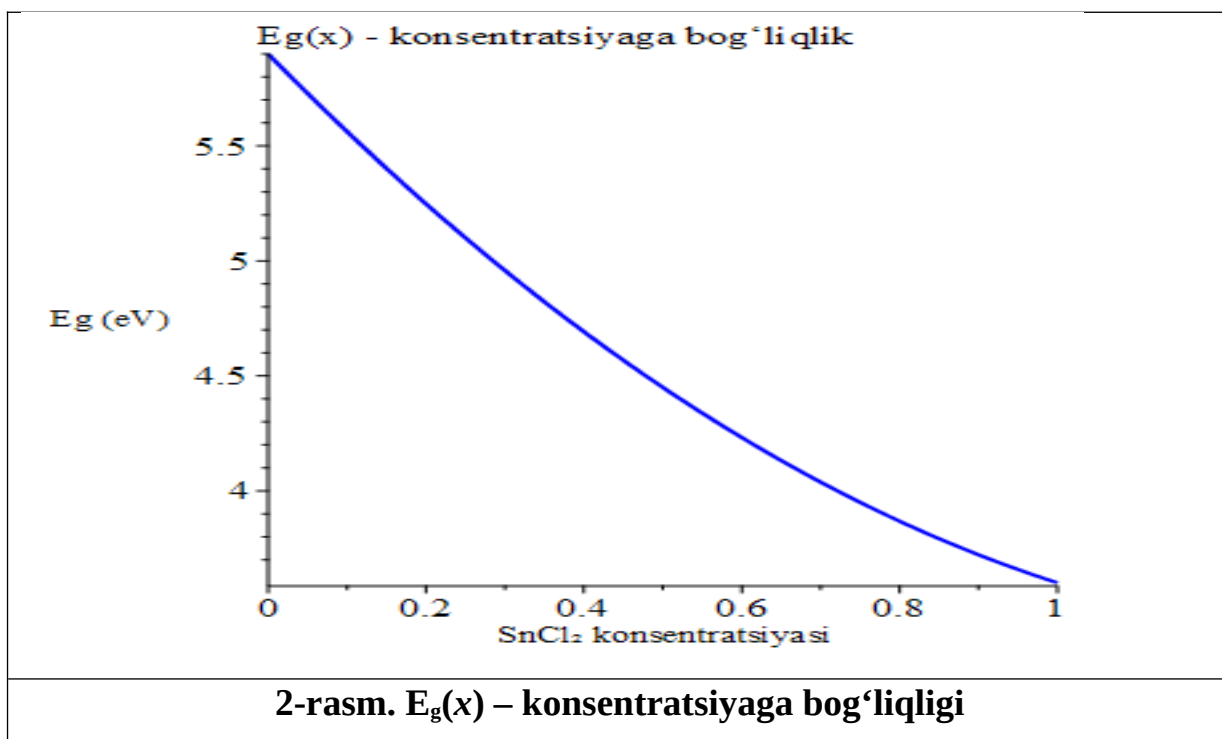
sathlarining siljishi va fononlar sonining ortishi bilan izohlanadi.  $\text{CsSnI}_3$  perovskit materialining taqiqlangan zona kengligini harorat oshishi bilan asta-sekin kamayishini nazariy jihatdan isbotlaydi. Bu holat tajribalar davomida 60-130°C haroratda kuzatilgan rang va faza o'zgarishlariga mos keladi[5].  $E_g$  qiymatining kichik farq bilan kamayishi perovskitning yorug'lik yutish spektrining qizil tomonga siljishini ko'rsatadi, bu esa uni fotodetektor va quyosh batareyalarida haroratga nisbatan sezuvchan qurilma sifatda qo'llash imkonini beradi.

Konsentratsiya o'zgarishi strukturaning notekisligini, panjara parametrlarini va defektlar sonini o'zgartiradi va buni Vegard formulasi orqali quyidagicha ifodalaymiz:

$$E_g(x) = (1-x)E_g^A + xE_g^B - bx(1-x) \quad (2)$$

Bu yerda: -  $x$  – konsentratsiya parametri (masalan  $\text{SnCl}_2$  nisbati);

$E_g^A; E_g^B$  – komponentlarning  $E_g$  qiymatlari;  $b$  – bog'liqligi parametri.



Grafikda  $E_g$  dastlab tez kamayadi, so'ngra yana biroz ko'tariladi – bu Bowing effekti tufayli,  $\text{CsI}$  va  $\text{SnCl}_3$  birikma ideal chiziqli bog'lanishda chetga chiqadi.  $E_g$  minimum  $\text{SnCl}_2 = 0,4-0,6$  konsentratsiyasida yetadi. Optimal  $E_g = 1,2 \div 1,4$  eV oraliq bu

quyosh nurlarining ko‘p qismini yutish uchun ideal diapazondir. Bu esa  $\text{SnCl}_2$  konsentratsiyasini 60% atrofida saqlash, ya’ni  $\text{Cs}_{0,4}\text{Sn}_{0,6}\text{I}_3$  kabi tarkibni tanlash samarali bo‘lishi mumkinligini ko‘rsatadi.

### **Xulosa**

Umumiy xulosa harorat va tarkib ikkalasi ham  $E_g$  ga kuchli ta’sir qiladi. Harorat ortishi  $E_g$  ni kamaytirsa,  $\text{SnCl}_2$  konsentratsiyasining o‘zgarishi oraqli uni moslashtirish mumkin. Bu yondoshuv  $\text{CsSnI}_3$  ni barqaror, qo‘rg‘oshinsiz quyosh elementi uchun mos qilishda nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi.

### **Foydalanilgan adabiyotlar**

1. Kai Shum. et al. Temperatura dependence of the band gap of perovskite semiconductor compound  $\text{CsSnI}_3$ . –Journal of Applied Physics, 2011.
2. M.N.Islam. et al. The effect of metal substitution in  $\text{CsSnI}_3$  perovskites with enhanced optoelectronic and photovoltaic properties. –Royal Social of Chemistry 2021.
3. Luo J. et al. “Perovskite solar cells with low toxicity: performance and stability optimization” – Science, 2020.
4. Dada M. et al. “Lead-free halide perovskites for photovoltaic applications: A review” – Materials Today Energy, 2023.
5. Ne’matov D. et al. “Preparation of Air-Stable Lead-Free  $\text{CsSnI}_3$  Perovskites” – Journal of Materials Nanoscience, 2024.