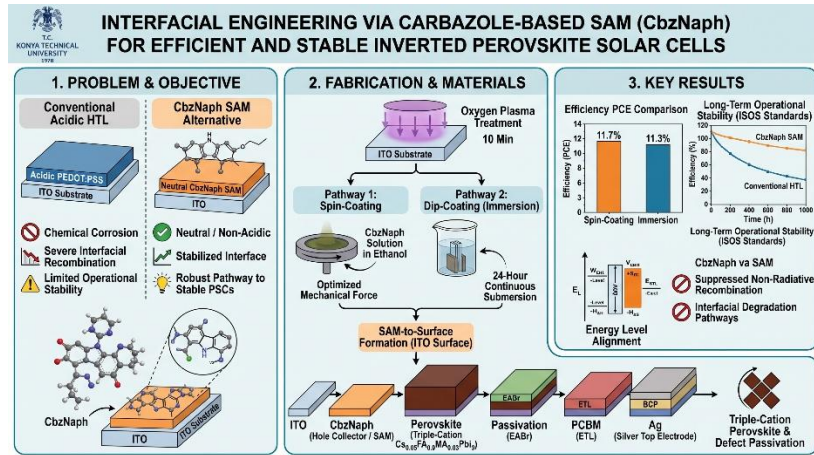




## Interfacial Engineering via Carbazole-Based Self-Assembled Monolayers (CbzNaph) for Efficient and Stable Inverted Perovskite Solar Cells

Esma YENEL DEMİR, Ahmet DÖNERTAŞ

### Abstract:

Inverted (*p-i-n*) perovskite solar cells (PSCs) hold great promise for commercial deployment due to their negligible hysteresis, low-temperature processability, and compatibility with tandem configurations. However, conventional hole transport layers (HTLs) like acidic PEDOT:PSS often induce chemical corrosion on the transparent conductive oxide (ITO) substrate, leading to severe interfacial recombination and limited operational stability. To address these interfacial degradation pathways, self-assembled monolayers (SAMs) have emerged as an exceptional non-corrosive alternative.

In this work, we systematically investigate the interfacial engineering of ITO/perovskite heterojunctions using a novel carbazole-derivative SAM molecule, **CbzNaph**, as a hole-selective contact. Two distinct deposition protocols—**spin-coating** and **dip-coating (immersion)** with a custom back-to-back substrate configuration—were comparatively evaluated. Over the modified ITO/CbzNaph substrates, triple-cation perovskite active layers ( $\text{Cs}_{0.05}\text{FA}_{0.9}\text{MA}_{0.05}\text{PbI}_3$ ) were deposited and surface-passivated with ethylammonium bromide (EABr) to minimize defect density. The fabricated inverted devices (ITO/CbzNaph/perovskite/EABr/PCBM/BCP/Ag) demonstrated remarkable photovoltaic performance. Spin-coated CbzNaph devices achieved a champion power conversion efficiency (PCE) of **11.7%** with an open-circuit voltage ( $V_{oc}$ ) of **1000 mV**, a short-circuit current density ( $J_{sc}$ ) of **19.07 mA/cm<sup>2</sup>**, and a fill factor (FF) of **0.61**. In comparison, the immersion-derived SAM devices delivered a competitive PCE of **11.3%** ( $V_{oc}$  = 950 mV,  $J_{sc}$  = 18.70 mA/cm<sup>2</sup>, FF = 0.64), validating its potential for large-area, scalable fabrication.

The incorporation of CbzNaph successfully suppressed non-radiative recombination and established well-aligned energy levels between the ITO work function and the perovskite valence band. These findings highlight the efficacy of carbazole-based SAMs in replacing conventional acidic HTLs, providing a robust pathway toward efficient, stable, and chemically intact perovskite photovoltaics.

**Keywords:** Perovskite Solar Cells, Self-Assembled Monolayers (SAM), CbzNaph, Interface Engineering, Inverted Architecture (*p-i-n*), Defect Passivation.

## Türkçe Bildiri Özeti

**Başlık:** Ters Perovskit Güneş Hücrelerinde Karbazol Türevli Kendiliğinden Düzenlenen Tek Katmanlar (CbzNaph) ile Arayüz Mühendisliği ve Fotovoltaik Performans Analizi

### Özet:

Ters (*p-i-n*) mimariye sahip perovskit güneş hücreleri (PGH), düşük sıcaklıkta üretilebilirlikleri ve tandem mimarilere uyumlulukları sayesinde yoğun ilgi görmektedir. Buna karşın, geleneksel delik taşıyıcı tabaka (HTL) olarak yaygın biçimde kullanılan asidik PEDOT:PSS malzemesinin ITO elektrot üzerinde yol açtığı kimyasal ve yapısal korozyon, arayüzey yük rekombinasyonunu artırarak cihaz kararlılığını sınırlandırmaktadır.

Bu çalışmada, ITO/perovskit arayüzünü iyileştirmek ve korozyon kaynaklı bozulmaları önlemek amacıyla karbazol türevli kendiliğinden düzenlenen tek katman (**CbzNaph SAM**) yapısı delik seçici kontak olarak uygulanmıştır. CbzNaph tabakasının yüzey modifikasyonu **döngüsel kaplama (spin-coating)** ve özel olarak tasarlanan düzenekle yürütülen **daldırma (immersion)** yöntemleri üzerinden karşılaştırmalı olarak optimize edilmiştir. Modifiye edilen yüzeyler üzerine üçlü katyon ( $\text{Cs}_{0.05}\text{FA}_{0.9}\text{MA}_{0.05}\text{PbI}_3$ ) aktif tabakası biriktirilmiş ve etilamonyum bromür (EABr) ile arayüz pasivasyonu gerçekleştirilmiştir. Tamamlanan ITO/CbzNaph/Perovskit/EABr/PCBM/BCP/Ag mimarisindeki hücrelerde, döngüsel kaplama ile hazırlanan cihazlar **%11,7 verimlilik** ( $V_{oc} = 1000 \text{ mV}$ ,  $J_{sc} = 19,07 \text{ mA/cm}^2$ ,  $\text{FF} = 0,61$ ) sergilerken; daldırma yöntemiyle hazırlanan cihazlar **%11,3 verimlilik** ( $V_{oc} = 950 \text{ mV}$ ,  $J_{sc} = 18,70 \text{ mA/cm}^2$ ,  $\text{FF} = 0,64$ ) elde etmiştir. Sonuçlar, CbzNaph SAM modifikasyonunun enerji seviyesi uyumunu optimize ettiğini, rekombinasyon kayıplarını baskıladığını ve asidik arayüz sorununu ortadan kaldırarak yüksek kararlılıklı PGH'ler için güçlü bir alternatif sunduğunu kanıtlamaktadır.

**Anahtar Kelimeler:** Perovskit Güneş Hücreleri, Kendiliğinden Düzenlenen Tek Katman (SAM), CbzNaph, Arayüz Mühendisliği, Ters Mimari (*p-i-n*), Yüzey Pasivasyonu.