



**RIDUNAJ**  
Repositorio Institucional  
Digital UNAJ



Universidad Nacional  
**ARTURO JAURETCHE**

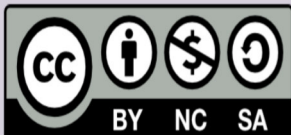
## Publicaciones Científicas

Carlos Pinzón, Nahuel Martínez, Guillermo Casas, Fernando Alvira y  
Marcelo Cappelletti

# Evaluación teórica del comportamiento de celdas solares de perovskita invertida totalmente inorgánicas

*Revista: Avances en Energías Renovables y  
Medio Ambiente, Vol. 24*

2020



Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons.  
Atribución – No comercial – Compartir igual 4.0  
<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

Documento descargado de RID - UNAJ Repositorio Institucional Digital de la Universidad  
Nacional Arturo Jauretche

Cita recomendada:

Pinzón, C., Martínez, N., Casas, G., Alvira, F. y Cappelletti, M. (2020). Evaluación teórica del comportamiento de celdas solares de perovskita invertida totalmente inorgánicas. *Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente*, 24, 139-148. <https://portalderevistas.unsa.edu.ar/index.php/averma/article/view/1970>

## EVALUACIÓN TEÓRICA DEL COMPORTAMIENTO DE CELDAS SOLARES DE PEROVSKITA INVERTIDA TOTALMENTE INORGÁNICAS

**Carlos Pinzón<sup>1</sup>, Nahuel Martínez<sup>1,2</sup>, Guillermo Casas<sup>1</sup>, Fernando Alvira<sup>1</sup>, Marcelo Cappelletti<sup>3,4</sup>**

<sup>1</sup>Universidad Nacional de Quilmes, Dpto de Ciencia y Tecnología, Laboratorio de BioNanotecnología (LBN), Roque Saenz Peña 352, (1876) Bernal, Argentina – e-mail: [cpinzonrueda@uvq.edu.ar](mailto:cpinzonrueda@uvq.edu.ar)

<sup>2</sup>CIFICEN (UNCPBA-CICPBA-CONICET), Pinto 399, (7000) Tandil, Argentina

<sup>3</sup>Grupo de Control Aplicado (GCA), Instituto LEICI (UNLP-CONICET), Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, C.C.91 (1900), La Plata, Argentina

<sup>4</sup>Programa TICAPPS, Universidad Nacional Arturo Jauretche, Av. Calchaquí 6200 (1888), Florencio Varela, Argentina

**RESUMEN:** En este trabajo se llevó a cabo, por medio de simulaciones numéricas, un estudio teórico de celdas solares de perovskita totalmente inorgánicas con estructura invertida ITO/HTL/CsPb<sub>x</sub>Br<sub>3-x</sub>/ETL/Ag, utilizando cuatro diferentes materiales como capa HTL (NiO, Cu<sub>2</sub>O, CuSCN y CuI) y tres diferentes materiales como capa ETL (ZnO, TiO<sub>2</sub> y SnO<sub>2</sub>). Fueron investigados los efectos sobre la eficiencia de conversión de energía (PCE) de los dispositivos, frente a la variación de parámetros de la capa de perovskita, tales como espesor, densidad de átomos aceptores y densidad de defectos, con el fin de determinar las condiciones óptimas de diseño para lograr mayores eficiencias que las actuales. Los resultados obtenidos muestran que la celda solar de perovskita totalmente inorgánica de estructura invertida ITO/CuI/CsPb<sub>x</sub>Br<sub>3-x</sub>/ZnO/Ag tiene la mayor PCE, alcanzando un valor óptimo teórico de 27.1% para una longitud de difusión de portadores minoritarios de 100 μm, lo que requiere una disminución drástica de la densidad de defectos en la capa de perovskita.

**Palabras clave:** Celdas solares de perovskita totalmente inorgánicas. Simulaciones numéricas. Eficiencia de conversión de energía.

### INTRODUCCIÓN

El aumento del consumo de energía promueve el empleo de nuevas tecnologías basadas en energías renovables para producir electricidad, siendo la energía solar una de las más prometedoras. En este sentido, el estudio de celdas solares, dispositivos capaces de convertir la energía proveniente del sol directamente en potencia eléctrica, es extremadamente importante hoy en día. A su vez, el estudio de las propiedades microscópicas de los materiales, conjuntamente con el avance en los procesos de fabricación de los dispositivos, ha dado paso a nuevas investigaciones y desarrollos, impensados poco tiempo atrás, con el objetivo de desarrollar nuevas tecnologías en celdas solares con mayor eficiencia de conversión de energía (PCE: *Power Conversion Efficiency*) y menor tiempo de procesamiento.

Uno de los desarrollos que ha cobrado especial relevancia en los últimos años, son las celdas solares de perovskita (CSP). Éstas conllevan una tecnología que promete revolucionar la industria fotovoltaica. Las características que hacen muy atractivos a los dispositivos basados en CSP y que los ha puesto a la vanguardia de la innovación en cuanto a las aplicaciones fotovoltaicas, son principalmente su gran coeficiente de absorción (gran capacidad para absorber la luz incidente); su alta movilidad de los portadores de carga; y sus largas longitudes de difusión. Además, a diferencia de los materiales semiconductores rígidos como el silicio que requieren de una gran cantidad de procesos para

convertirlos en celdas solares, las CSP son más económicas, son mecánicamente flexibles y tienen un proceso de fabricación más simple. Es por ello que las CSP poseen menor tiempo de retorno energético que las celdas solares de silicio, es decir el tiempo necesario para que un material genere la misma cantidad de energía que se gasta en su producción.

Las CSP, incluidas dentro de las celdas solares de película delgada de tercera generación, constan de una capa de perovskita que se encuentra en el medio entre una película semiconductor de tipo p (HTL: *Hole Transporting Layer*) y una de tipo n (ETL: *Electron Transporting Layer*). La absorción de la luz solar tiene lugar en la capa de perovskita, en la cual se generan los pares electrón-hueco. La capa HTL permite el transporte de huecos y bloquea el flujo de electrones hacia el ánodo mediante una barrera de energía en la interfaz HTL/Perovskita; mientras que la capa ETL posibilita el transporte de electrones y bloquea el flujo de huecos hacia el cátodo mediante una barrera de energía en la interfaz Perovskita/ETL.

Las CSP de estructura HTL/Perovskita/ETL, han incrementado sustancialmente su PCE desde su aparición: desde 3.8% en el año 2009 (Kojima et al, 2009) hasta 25.2% en el año 2019 (NREL, 2019). Las CSP más eficientes obtenidas hasta el momento son las denominadas híbridas, cuya capa de perovskita está basada en haluros orgánicos-inorgánicos, con estructura de la forma  $\text{MAPbX}_3$ , donde MA es el metilamonio  $\text{CH}_3\text{NH}_3^+$  y X es Cl, Br o I. Estos dispositivos compiten en eficiencia frente a tecnologías ya establecidas en el mercado mundial, tales como las celdas solares de película delgada basadas en CdTe, o en cobre-indio-galio-selenio (CIGS), o como las más utilizadas celdas solares de silicio poli-cristalino. Sin embargo, la alta volatilidad de los cationes orgánicos hidrófilos (por ejemplo  $\text{CH}_3\text{NH}_3^+$ ), conduce a que estos dispositivos tengan problemas de inestabilidad térmica, lo cual es un fuerte obstáculo para su posterior comercialización (Conings et al, 2015).

Una de las alternativas que ha comenzado recientemente a ser explorada y que ha demostrado ser efectiva para superar esta deficiencia y mejorar la estabilidad térmica de los dispositivos, son las denominadas celdas solares de perovskita totalmente inorgánicas (*All-Inorganic Perovskite Solar Cells*), donde los cationes orgánicos volátiles de la capa de perovskita son sustituidos con cesio ( $\text{Cs}^+$ ), obteniendo las perovskitas de haluro inorgánico  $\text{CsPbI}_x\text{Br}_{3-x}$ , con x en el rango de 0 a 3. En particular, las CSP de estructura invertida (del tipo p-i-n) son las que presentan mayor estabilidad. Si bien la eficiencia máxima alcanzada actualmente por este tipo de celdas es de 15.6% (Wang J et al, 2020), presentan una excelente estabilidad térmica, muy superior a las celdas solares híbridas de perovskita (Wang Y et al, 2019), lo cual las convierte en serias candidatas para su comercialización. El hecho de analizar mezclas de la forma  $\text{CsPbI}_x\text{Br}_{3-x}$  para la capa de perovskita, posibilita ajustar el valor del ancho de banda prohibida al valor óptimo, en el rango entre 1.72 eV y 2.31 eV para  $\text{CsPbI}_3$  y  $\text{CsPbBr}_3$ , respectivamente (Tao et al, 2019).

Dado que la eficiencia máxima alcanzada de 15.6% se encuentra aún por debajo del 25.2% de las CSP híbridas orgánico-inorgánicas, mayores estudios son necesarios para explorar los factores que limitan el rendimiento de las CSP totalmente inorgánicas. Las técnicas de modelado y simulación numérica constituyen herramientas fundamentales para predecir y analizar el funcionamiento de los dispositivos bajo estudio, e investigar los mecanismos físicos internos y la relación entre las propiedades del material y el rendimiento del dispositivo.

En este trabajo ha sido llevado a cabo un análisis comparativo de diferentes combinaciones de CSP totalmente inorgánicas con estructura invertida de la forma: ITO/HTL/ $\text{CsPbI}_x\text{Br}_{3-x}$ /ETL/Ag, donde para las capas HTL y ETL se utilizaron de a uno por vez uno de los siguientes materiales: NiO,  $\text{Cu}_2\text{O}$ , CuSCN y CuI (para la capa HTL) y ZnO,  $\text{TiO}_2$  y  $\text{SnO}_2$  (para la capa ETL). Se investigó sobre los efectos que tienen sobre la eficiencia de los dispositivos, la variación de parámetros de la capa de perovskita, tales como el espesor, la densidad de átomos aceptores y la densidad de defectos, con el fin de obtener las condiciones óptimas de diseño que permitirían lograr mayores eficiencias que las actuales. Los estudios fueron llevados a cabo de manera teórica, a partir de la utilización de herramientas

computacionales que posibilitan la descripción de dispositivos fotovoltaicos por medio de ecuaciones que representan su comportamiento, ofreciendo un conocimiento detallado y preciso para predecir y mejorar la respuesta de los dispositivos, a un costo muy inferior y en menor tiempo que la experimentación.

## METODOLOGÍA

Las simulaciones se realizaron con el software SCAPS-1D (Burgelman et al, 2000), ampliamente avalado por la comunidad científica relacionada con las CSP (Lin et al, 2020; Haider et al, 2019; Casas et al, 2017). Este software resuelve numéricamente las ecuaciones básicas de los semiconductores: Poisson y continuidad de portadores, de manera de poder obtener la respuesta del dispositivo bajo diferentes condiciones de diseño y de funcionamiento.

La Figura 1 muestra la configuración del dispositivo a analizar en este trabajo, el cual consiste en una estructura invertida ITO/HTL/Perovskita/ETL/Ag, donde la capa de perovskita es de la forma  $\text{CsPbI}_x\text{Br}_{3-x}$ , con  $x$  en el rango de 0 a 3; para la capa HTL se consideraron los materiales NiO,  $\text{Cu}_2\text{O}$ , CuSCN y CuI; mientras que para la capa ETL se consideraron ZnO,  $\text{TiO}_2$  y  $\text{SnO}_2$ . En las simulaciones, la radiación solar ingresa por la capa HTL. El espectro utilizado es el AM 1.5 G incluido en el SCAPS-1D, en condiciones estándar de temperatura ( $300^\circ\text{K}$ ) y potencia solar incidente de  $1000 \text{ W/m}^2$ .

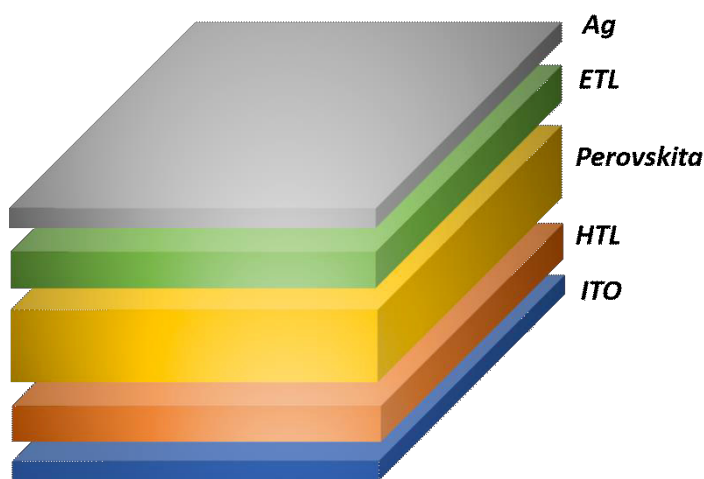


Figura 1: Arquitectura del dispositivo utilizado en las simulaciones.

Las Tablas 1-3 resumen los parámetros principales utilizados en las simulaciones para las capas de perovskita, HTL y ETL, respectivamente, donde  $N_A$  ( $N_D$ ) es la densidad de átomos aceptores (donadores);  $\epsilon_r$  es la constante dieléctrica relativa;  $\chi$  es la afinidad electrónica;  $E_G$  es el ancho de la banda prohibida;  $\mu_n$  y  $\mu_p$  son las movilidades de electrones y huecos, respectivamente;  $N_T$  es la densidad de defectos; y  $N_C$  y  $N_V$  son las densidades efectivas de estado en las bandas de conducción y valencia, respectivamente. Estos valores están basados en trabajos teóricos y experimentales reportados recientemente en la literatura (Wang J et al, 2020; Lin et al, 2020). El valor de  $2.07 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  para la densidad de defectos en la capa de perovskita, fue elegido para obtener una longitud de difusión de portadores minoritarios de  $1 \mu\text{m}$ , el cual es similar al valor utilizado en otros trabajos (Dastidar et al, 2017). El coeficiente de absorción utilizado para la capa  $\text{CsPbI}_x\text{Br}_{3-x}$  fue calculado a partir de la ley de Beer-Lambert  $\alpha = 2.303A/t$  (Krishna et al., 2015), donde  $A$  y  $t$  son la absorbancia y el espesor ( $350 \text{ nm}$ ), respectivamente, obtenidos de Wang J et al. (Wang J et al., 2020). La Figura 2 muestra la curva del coeficiente de absorción en función de la longitud de onda. Las funciones trabajo del contacto frontal y posterior son  $4.7 \text{ eV}$  (ITO) y  $4.26 \text{ eV}$  (Ag), respectivamente (Behrouznejad et al, 2016).

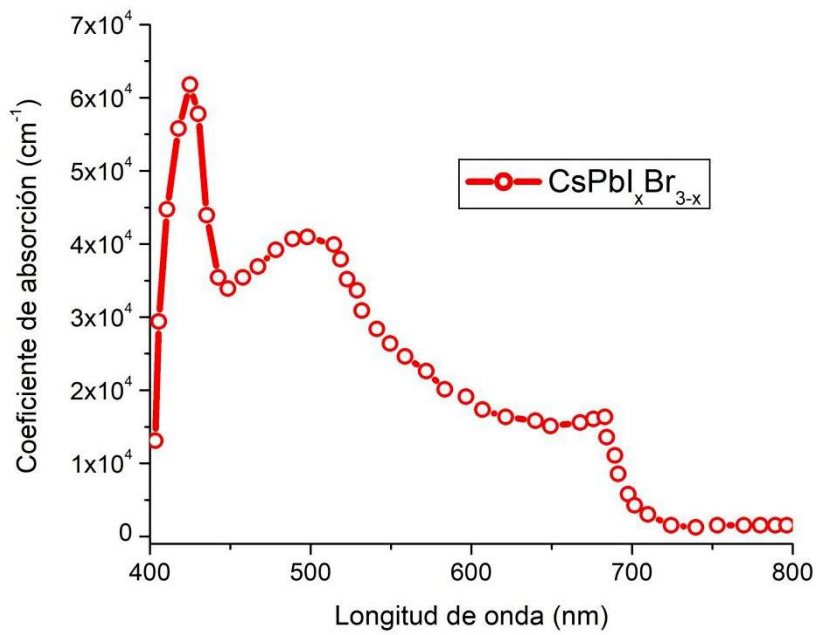


Figura 2: Coeficiente de absorción ( $\alpha$ ) como una función de la longitud de onda para la capa de perovskita  $\text{CsPbI}_x\text{Br}_{3-x}$ .

Parámetros	$\text{CsPbI}_x\text{Br}_{3-x}$
Espesor (nm)	350
$N_A$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$1 \times 10^{15}$
$N_D$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	—
$\epsilon_r$	6
$\chi_j$ (eV)	3.95
$E_G$ (eV)	1.78
$\mu_n$ ( $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ )	16
$\mu_p$ ( $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ )	16
$N_T$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$2.07 \times 10^{14}$
$N_C$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$1.1 \times 10^{20}$
$N_V$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$8 \times 10^{19}$

Tabla 1: Parámetros físicos utilizados en las simulaciones para la capa de perovskita.

Parámetros	NiO	$\text{Cu}_2\text{O}$	$\text{CuSCN}$	CuI
Espesor (nm)	25	25	25	25
$N_A$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$3 \times 10^{18}$	$3 \times 10^{18}$	$3 \times 10^{18}$	$3 \times 10^{18}$
$N_D$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	—	—	—	—
$\epsilon_r$	11.7	7.11	10	6.5
$\chi_j$ (eV)	1.46	3.2	1.9	2.1
$E_G$ (eV)	3.8	2.17	3.4	3.1
$\mu_n$ ( $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ )	2.8	200	$2 \times 10^{-4}$	100
$\mu_p$ ( $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ )	2.8	80	$2 \times 10^{-1}$	44
$N_t$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$1 \times 10^{17}$	$1 \times 10^{17}$	$1 \times 10^{17}$	$1 \times 10^{17}$
$N_C$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$2.5 \times 10^{20}$	$2.5 \times 10^{20}$	$1.7 \times 10^{19}$	$2.8 \times 10^{19}$
$N_V$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$2.5 \times 10^{20}$	$2.5 \times 10^{20}$	$2.5 \times 10^{21}$	$1 \times 10^{19}$

Tabla 2: Parámetros físicos utilizados en las simulaciones para los materiales HTL.

Parámetros	ZnO	TiO <sub>2</sub>	SnO <sub>2</sub>
Espesor (nm)	25	25	25
N <sub>A</sub> (cm <sup>-3</sup> )	—	—	—
N <sub>D</sub> (cm <sup>-3</sup> )	3 × 10 <sup>18</sup>	3 × 10 <sup>18</sup>	3 × 10 <sup>18</sup>
ε <sub>r</sub>	9	9	9
χ <sub>i</sub> (eV)	4	4	4
E <sub>g</sub> (eV)	3.16	3.2	3.5
μ <sub>n</sub> (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	100	20	20
μ <sub>p</sub> (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	25	10	10
N <sub>t</sub> (cm <sup>-3</sup> )	1 × 10 <sup>17</sup>	1 × 10 <sup>17</sup>	1 × 10 <sup>17</sup>
N <sub>C</sub> (cm <sup>-3</sup> )	4.5 × 10 <sup>18</sup>	1 × 10 <sup>21</sup>	4.36 × 10 <sup>18</sup>
N <sub>V</sub> (cm <sup>-3</sup> )	1 × 10 <sup>18</sup>	2 × 10 <sup>20</sup>	2.52 × 10 <sup>19</sup>

Tabla 3: Parámetros físicos utilizados en las simulaciones para los materiales ETL.

En la Figura 3 se ilustran los valores del Mínimo de la Banda de Conducción (MBC) de la capa ETL y del Máximo de la Banda de Valencia (MBV) de la capa HTL, respecto del nivel de vacío, para los materiales utilizados en la simulación. También se observan los valores de MBC y MBV para la capa de perovskita totalmente inorgánica.

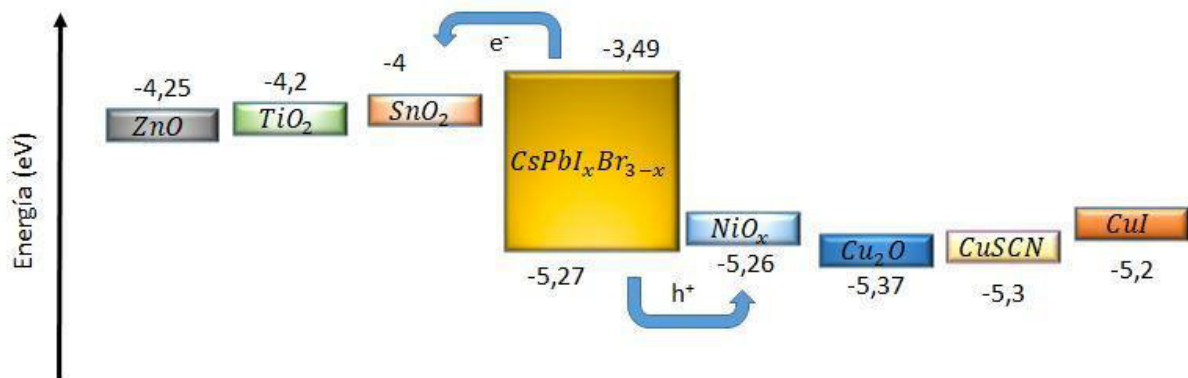


Figura 3: Diagrama de niveles de energía para los materiales utilizados referidos al nivel de vacío.

## RESULTADOS

En primer lugar, se llevó a cabo un análisis de las doce diferentes combinaciones posibles de CSP en base a los materiales utilizados y a los valores presentados en las Tablas 1-3. La Figura 4 grafica los valores obtenidos de eficiencia de conversión de energía (PCE) para estos dispositivos. El espesor de 350 nm utilizado para la capa de perovskita fue elegido con el propósito de comparar los resultados teóricos obtenidos con los resultados experimentales presentados en Wang J et al. para la combinación ZnO / NiO (Wang J et al., 2020). El valor de 11.77% obtenido con el SCAPS-1D para esta combinación de materiales, puede considerarse como una buena primera aproximación a los resultados experimentales de dicho trabajo. Si bien en Wang J et al. se menciona un PCE de 13.9%, en el material suplementario de tal artículo, se muestra un histograma para 32 dispositivos similares, para los cuales, los valores de PCE se encuentran aproximadamente entre 11.5% y 13.9%.

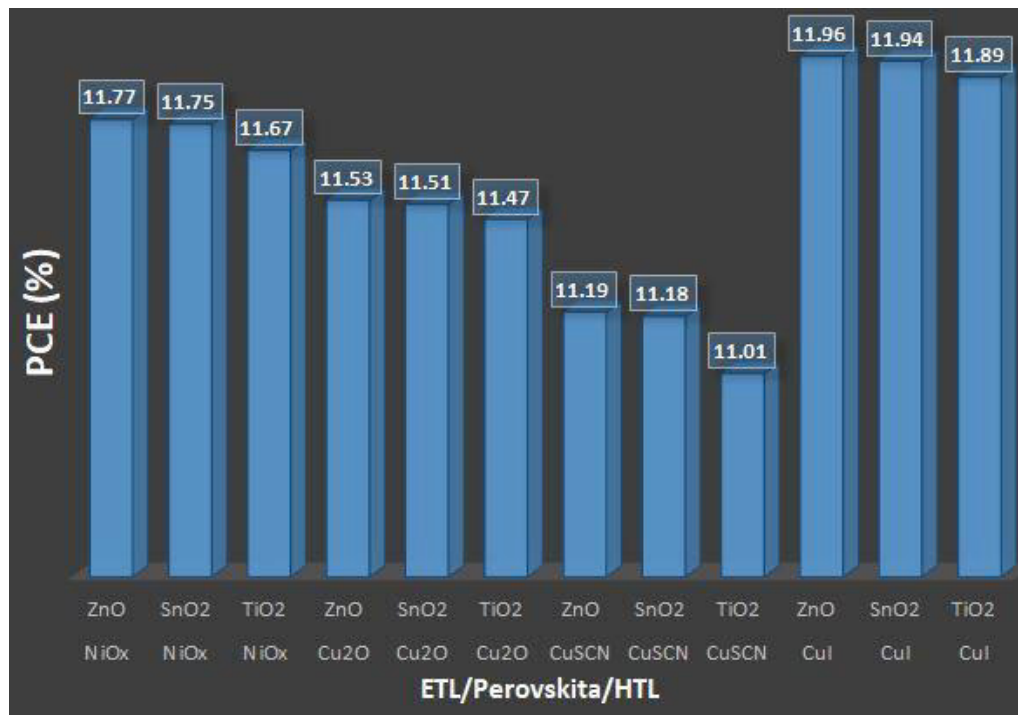


Figura 4: Eficiencia de conversión de energía para las doce estructuras de CSP totalmente inorgánicas estudiadas en este trabajo.

Adicionalmente, la Tabla 4 resume los resultados presentados en la Figura 4, incorporando también los parámetros de salida tales como corriente de cortocircuito ( $J_{sc}$ ), tensión de circuito abierto ( $V_{oc}$ ) y factor de llenado (FF).

ETL / HTL	$J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$V_{oc}$ (V)	FF (%)	PCE (%)
ZnO / NiO	13.44	1.13	77.55	11.77
SnO <sub>2</sub> / NiO	13.42	1.13	77.55	11.75
TiO <sub>2</sub> / NiO	13.44	1.12	77.24	11.67
ZnO / Cu <sub>2</sub> O	12.98	1.13	78.44	11.53
SnO <sub>2</sub> / Cu <sub>2</sub> O	12.97	1.13	78.44	11.51
TiO <sub>2</sub> / Cu <sub>2</sub> O	12.98	1.12	78.49	11.47
ZnO / CuSCN	13.44	1.14	73.25	11.19
SnO <sub>2</sub> / CuSCN	13.42	1.14	73.26	11.18
TiO <sub>2</sub> / CuSCN	13.44	1.13	72.24	11.01
ZnO / CuI	13.46	1.13	78.61	11.96
SnO <sub>2</sub> / CuI	13.45	1.13	78.61	11.94
TiO <sub>2</sub> / CuI	13.46	1.12	78.50	11.89

Tabla 4: Comparación del desempeño de los dispositivos con las diferentes alternativas HTL / ETL.

El factor de llenado y la eficiencia de conversión de energía son calculados mediante las ecuaciones (1) y (2), respectivamente, donde  $P_{MPP}$  es la potencia máxima que puede entregar la celda y  $P_{TOT}$  es la potencia total que recibe la misma.

$$FF(\%) = \frac{P_{MPP}}{V_{oc} \cdot J_{sc}} \cdot 100 \quad (1)$$

$$PCE(\%) = \frac{P_{MPP}}{P_{TOT}} \cdot 100 = \frac{V_{OC} \cdot J_{SC} \cdot FF}{P_{TOT}} \cdot 100 \quad (2)$$

Se puede observar en la Tabla 4 que mientras los valores de  $J_{SC}$  y  $V_{OC}$  se mantienen casi inalterables, el FF es el parámetro que más varía (aproximadamente un 9% entre su valor mínimo 72.24 y su valor máximo 78.61). Las tres estructuras que poseen al CuSCN como HTL presentan los menores valores de FF y de PCE, debido a la baja movilidad de los portadores en este material. Por el contrario, las tres combinaciones con CuI como HTL muestran los mayores valores de FF y de PCE. En particular, la CSP totalmente inorgánica de estructura ITO/CuI/CsPb<sub>x</sub>Br<sub>3-x</sub>/ZnO/Ag mostró tener la mayor eficiencia entre todas las configuraciones estudiadas. Es importante mencionar que si bien los resultados teóricos presentados en la Tabla 4 fueron obtenidos utilizando un espesor de 350 nm para la capa CsPb<sub>x</sub>Br<sub>3-x</sub>, las mismas conclusiones son extraídas para espesores mayores.

Por lo tanto, a continuación se seleccionó la celda solar de estructura ITO/CuI/CsPb<sub>x</sub>Br<sub>3-x</sub>/ZnO/Ag para investigar los efectos que ocasionan en ella, la variación de parámetros de la capa de perovskita, tales como el espesor, la densidad de átomos aceptores y la densidad de defectos. El estudio se centró en esta región dado que es la capa que mayor influencia tiene en el rendimiento de las CSP, al ser quien absorbe la luz para generar los portadores fotogenerados.

En la Figura 5 se ha graficado la curva corriente-tensión de la celda solar para tres diferentes espesores de la capa CsPb<sub>x</sub>Br<sub>3-x</sub>: 350 nm, 750 nm y 1050 nm. Puede verse que en comparación con la celda analizada originalmente (espesor 350 nm), los dispositivos con mayores espesores reducen levemente su  $V_{OC}$  pero incrementan de manera significativa su  $J_{SC}$ . Este resultado puede ser confirmado a partir de la Figura 6, en la cual se muestra la variación de los parámetros eléctricos PCE,  $V_{OC}$  y  $J_{SC}$  en función del espesor de la capa de perovskita CsPb<sub>x</sub>Br<sub>3-x</sub>. Los valores presentados en esta figura están normalizados con respecto a sus valores máximos, los cuales son 16.06%, 1.15 V y 23.79 mA/cm<sup>2</sup>, para PCE,  $V_{OC}$  y  $J_{SC}$ , respectivamente. Se aprecia además un fuerte incremento de PCE con el aumento del espesor desde 250 nm hasta 750 nm. Mientras que para espesores superiores a 750 nm los valores de PCE prácticamente se saturan, pudiendo considerarse a este valor de 750 nm como un espesor cercano al óptimo.

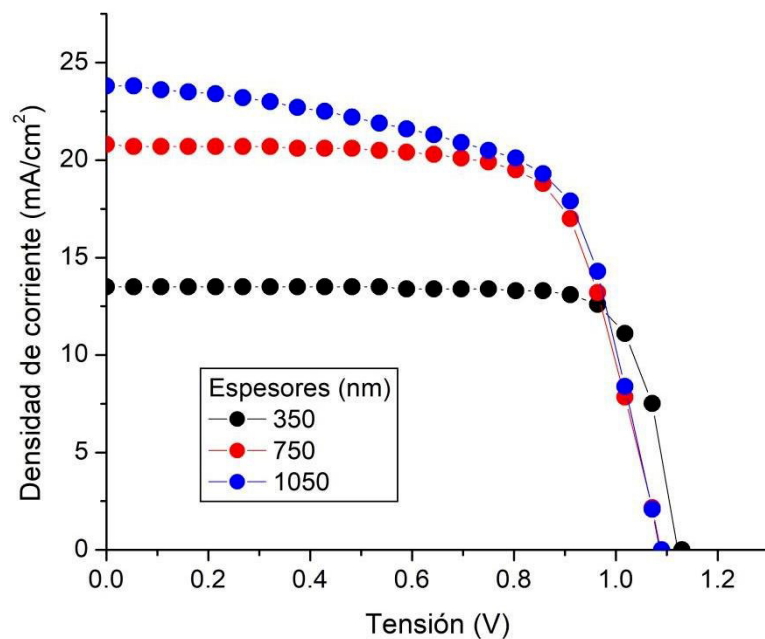


Figura 5: Curva J-V para tres valores diferentes de espesores en la capa de perovskita.

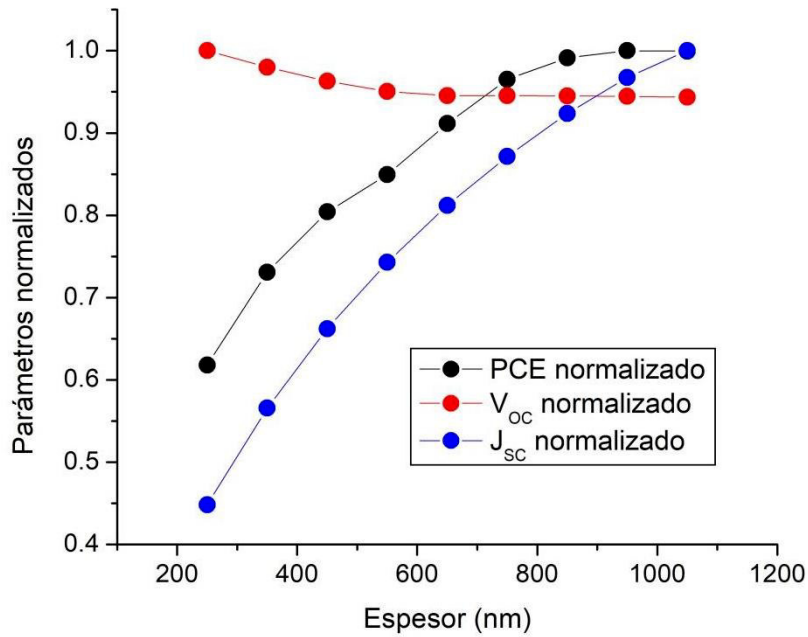


Figura 6: Valores de PCE,  $V_{OC}$  y  $J_{SC}$  normalizados respecto a sus valores máximos, para diferentes espesores de la capa de perovskita.

Por su parte, la Figura 7 muestra la variación de PCE como una función de la densidad de átomos aceptores en la capa de perovskita, tomando un espesor de 750 nm. Se observa aquí, para el rango de valores analizados, una disminución de la eficiencia de la celda cuando  $N_A$  se incrementa.

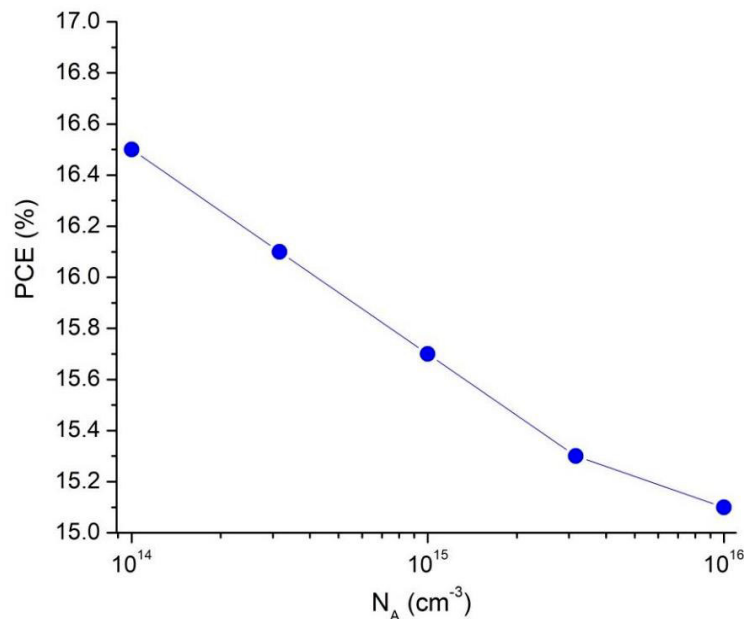


Figura 7: Variación de PCE para diferentes densidades de átomos aceptores de la capa de perovskita.

A partir de los valores óptimos obtenidos en este trabajo, de espesor (750 nm) y de  $N_A$  ( $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ), se realizó la comparación entre estas nuevas condiciones de diseño con la celda originalmente analizada (de espesor 350 nm y de  $N_A = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ). Al respecto, la Figura 8 muestra la variación de PCE en función de la densidad de defectos en la capa de perovskita. Para la condición de longitud de difusión de portadores minoritarios de  $1 \mu\text{m}$  ( $N_T = 2.07 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ), el valor de PCE se incrementa desde 11.96% hasta 16.34%. En esta figura se observa también la notable mejora que podría obtenerse en el desempeño de las CSP totalmente inorgánicas en el caso que pudiera aumentarse la longitud de difusión. Específicamente, para el caso extremo de  $N_T = 2.07 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  ( $100 \mu\text{m}$  de longitud de difusión) la eficiencia óptima teórica alcanzada es de 27.1%.

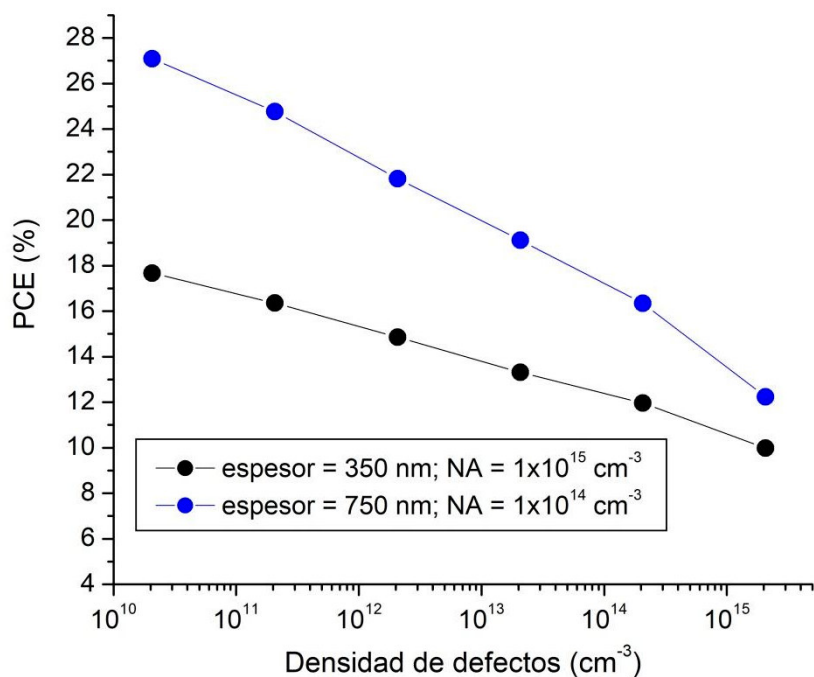


Figura 8: Variación de PCE para diferentes densidades de defectos en la capa de perovskita.

## CONCLUSIONES

Los resultados teóricos obtenidos serán de gran utilidad para la fabricación y caracterización de CSP totalmente inorgánicas. Teniendo en cuenta que los resultados presentados en este trabajo representan una predicción del comportamiento de los dispositivos analizados, la posibilidad de reproducir experimentalmente una predicción prometedora, va a depender tanto de la madurez de la tecnología como de poder tener un control preciso sobre las características de los materiales involucrados.

La optimización del diseño de las CSP como las estudiadas en este trabajo, puede servir también para mejorar la eficiencia de las celdas solares tándem perovskita/perovskita totalmente inorgánicas, las cuales se conforman por dos o más subceldas con diferentes ancho de banda prohibida, apiladas una encima de la otra, con el propósito de favorecer la captación de rangos de energía más amplios del espectro solar, mejorando el rendimiento en comparación con las celdas individuales separadas.

## REFERENCIAS

- Behrouznejad F, et al. (2016). J. Mater. Chem. A, 4,13488-13498.  
 Burgelman M, et al. (2000). Thin Solid Films 361-362, 527-532.  
 Casas G, et al. (2017). Superlattices and Microstructures, Elsevier. 107, 136-143.  
 Conings B, et al. (2015). Adv. Energy Mater. 5, 1500477.  
 Dastidar S, et al. (2017). ACS Energy Lett. 2, 2239–2244.  
 Haider S, et al. (2019). Phys. Status Solidi A 216, 1900102.  
 Kojima A, et al. (2009). J. Am. Chem. Soc. 131 (17), 6050.  
 Krishna et al. (2015). Applied Surface Science 352, 10-15.  
 Lin L, et al. (2020). Solar Energy 198, 454–460.  
 NREL, 2019. Best Research-Cell Efficiency Chart (<https://www.nrel.gov/pv/assets/pdfs/best-research-cell-efficiencies.20191104.pdf>)  
 Tao S, et al. (2019). Nature Commun. 10, 2560.  
 Wang J, et al. (2020). Nature Commun. 11, 177.  
 Wang Y, et al. (2019). Science 365, 591.

**ABSTRACT**

In this work, a theoretical study of all inorganic perovskite solar cells with inverted structure ITO/HTL/CsPbI<sub>x</sub>Br<sub>3-x</sub>/ETL/Ag, has been performed by means of computer simulation, using four different materials as HTL (NiO, Cu<sub>2</sub>O, CuSCN and CuI) and three different materials as ETL (ZnO, TiO<sub>2</sub> and SnO<sub>2</sub>). The effects on the power conversion efficiency (PCE) of the devices were investigated, compared to the variation of parameters of the perovskite layer, such as thickness, acceptor density and defect density, in order to determine the optimal design conditions to achieve greater efficiencies than the previously reported. The results obtained show that the all inorganic perovskite solar cell with inverted structure ITO/CuI/CsPbI<sub>x</sub>Br<sub>3-x</sub>/ZnO/Ag has the highest PCE, reaching a theoretical optimum value of 27.1% for a minority-carrier diffusion length of 100 μm, which implies a strong decrease of the defect density in the perovskite layer.

**KEYWORDS:** All inorganic perovskite solar cells. Computer simulation. Power conversion efficiency.