

## Resum

Des de fa una dècada s'està investigant intensament la forma de millorar l'eficiència de conversió d'energia (PCE) de les cèl·lules solars de silici (Si) i reduir els seus preus. No obstant això, tot i les millores obtingudes, la fabricació de cèl·lules solars de Si segueix sent costosa i pot rebaixar-se usant materials en forma de capa fina. Per això la recerca de materials absorbents alternatius, no tòxics, abundants en la naturalesa i amb bons rendiments de conversió s'ha intensificat en els últims anys. Entre els diferents materials absorbents, el sulfur d'estany (SnS), amb una banda prohibida de 1.3 eV propera a l'òptima, és un candidat adequat per a la conversió fotovoltaica. Però per a cèl·lules experimentals de SnS el rendiment assolit fins ara és de 4.6%, que és molt menor que el PCE per a dispositius de silici, mentre que entre altres cèl·lules híbrides (orgàniques-no orgàniques) com la perovskita de metilamonio de plom i iode (MAPbI<sub>3</sub>) es demostra que és un candidat adequat amb PCE que arriba a un valor del 23%. A part de l'estabilitat, un dels problemes per a la comercialització de cèl·lules de MAPbI<sub>3</sub> és la naturalesa tòxica del plom (Pb). Per aquest motiu, s'ha utilitzat l'anàlisi numèrica per revisar els paràmetres de disseny de les cèl·lules solars de perovskita híbrida substituint l'absorbent MAPbI<sub>3</sub> per MASnI<sub>3</sub> i estudiar l'efecte de la resta de paràmetres de disseny en el rendiment d'estes cèl·lules solars. Hi ha diversos programaris de simulació disponibles que s'utilitzen per a l'anàlisi numèric de cèl·lules solars. En aquest treball hem fem servir un programari anomenat "A Solar Cell Capacitance Simulator" (SCAPS), està disponible de forma gratuïta i és molt popular entre la comunitat científica i tecnològica. Per aconseguir un disseny efectiu per a una cèl·lula solar eficient, es va proposar una aproximació numèrica basada en la millora de la PCE d'una cèl·lula solar experimental. Això es va fer reproduint els resultats per a la cèl·lula solar dissenyada experimentalment en un entorn SCAPS amb estructura p-SnS / n-CdS amb una eficiència de conversió de l'1,5%. Després de reproduir els resultats experimentals, el rendiment del dispositiu es va optimitzar ajustant el gruix de la capa absorbent y de la capa tampó, el temps de vida dels portadors minoritaris, la concentració del dopatge en les capes absorbent, tampó i en la capa finestra. Mitjançant l'optimització gradual dels paràmetres del dispositiu, es va assolir un valor de 14.01% en PCE de cèl·lules solars dissenyades experimentalment en SCAPS amb arquitectura p-SnS / n-CdS / n-ZnO. A partir de l'anàlisi, es va trobar que la PCE d'una cèl·lula solar depèn en gran mesura de la concentració de dopatge de la capa absorbent, el gruix de la capa absorbent i els defectes de la interfície. D'altra banda, es va realitzar una anàlisi per

determinar l'efecte de la recombinació de la interfície en el rendiment de les cèl·lules solars i com es pot controlar. Per realitzar aquesta tasca, es va realitzar una anàlisi per a la selecció de la capa tampó adequada per a la cèl·lula solar de perovskita de metilamoni d'estany i iode ( $\text{MASnI}_3$ ) i es va trobar que el PCE de la cèl·lula solar també depèn de l'alineació de la banda entre l'absorbidor i la capa de tampó.