

Tesis doctoral: Perovskitas híbridas para aplicaciones fotovoltaicas

Doctorando: Alexander Wyn Stewart

Resumen:

Las células solares de perovskitas de haluros (HaPSC) se han convertido en uno de los principales candidatos para la producción de dispositivos fotovoltaicos de nueva generación. Sin embargo, su comercialización exige que cumplan estrictos requisitos de rendimiento, seguridad y longevidad. Se sabe que la estabilidad intrínseca de las perovskitas de haluro está estrechamente relacionada con la química de los defectos que se producen en su interior, ya que algún defecto puede participar o iniciar procesos de degradación. Además, algunos de los defectos más comunes en estos sistemas crean estados de trampa poco profundos y electrónicamente activos, que pueden influir en procesos clave como el transporte y recombinación de cargas, lo que los convierte en fundamentales para determinar el rendimiento de los dispositivos.

La ingeniería de disolventes ha cobrado importancia como técnica para controlar la cristalización de películas delgadas de haluros de perovskita, lo que ha dado lugar a mejoras experimentalmente observables en la calidad y estabilidad de los cristales, así como a reducciones significativas en las densidades de defectos. A pesar de los importantes esfuerzos realizados recientemente para desarrollar las HaPSC, el rendimiento y la estabilidad de las composiciones con bandas prohibidas anchas han quedado rezagados con respecto a las composiciones para los dispositivos de unión única. El objetivo de esta tesis es abordar este problema desarrollando técnicas experimentales para mejorar las perovskitas inorgánicas de haluros mixtos.

Aunque la ingeniería de disolventes puede introducir, reducir o pasivar defectos electrónicamente activos (dopantes) en las perovskitas de haluro, se han realizado relativamente pocas investigaciones sobre los procesos físicos que se producen en los sistemas dopados. Además, las químicas activas de estos sistemas, que aún se están investigando, pueden dar lugar a comportamientos transitorios o a la activación de procesos complejos, lo que complica los esfuerzos experimentales. En esta tesis, estos problemas se superan empleando simulaciones por ordenador para investigar el origen y los factores que dan lugar a niveles óptimos de dopaje en las HaPSCs.

Esta tesis doctoral se compone de tres artículos que han sido publicados en revistas indexadas. Dos de ellos desarrollan técnicas experimentales para controlar la cristalización de la película y la estabilidad de las perovskitas de bandas prohibidas anchas. El tercer artículo investiga el papel que desempeñan los dopantes electrónicos en el rendimiento de los dispositivos y cómo pueden aprovecharse para producir HaPSC superiores. En conjunto, estos resultados aportan nuevos conocimientos y técnicas a los experimentadores que trabajan con dispositivos de alto rendimiento.