

Asesor: Dr. J. Oracio Cuahutémoc Barbosa García

Sinodales: Dr. Diego Solís Ibarra
(Sinodal Externo - Instituto de Investigaciones en Materiales UNAM, Secretario)

Dra. María del Rosario Galindo González
(Sinodal Externa – División de Ciencias Naturales y Exactas UGTO, Vocal)

Dr. J. Oracio Cuahutémoc Barbosa García
(Asesor de Tesis, Presidente)

Tesis: **“PELÍCULAS ORGÁNICO-INORGÁNICAS CON ESTRUCTURA PEROVSKITA COMO CAPA ACTIVA EN DISPOSITIVOS FOTOVOLTAICOS”**

Resumen:

En los últimos seis años las celdas solares híbridas basadas en el haluro organo-metálico $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ y compuestos similares, han llamado la atención en el ámbito fotovoltaico por tener elevado coeficiente de absorción (10^4 - 10^5 cm^{-1}), amplio espectro de absorción (300-800 nm), elevada movilidad intrínseca de cargas, etc. Además la eficiencia de conversión ha evolucionado exponencialmente alcanzando valores superiores al 22 %. Sin embargo, estas celdas siguen siendo objeto de investigación en laboratorios debido a que la reproducibilidad todavía no es controlada pues muchos factores afectan el rendimiento de los dispositivos. Se ha reportado que el rendimiento fotovoltaico de estos dispositivos está fuertemente relacionado con la cristalización de la película de perovskita, con obtener una película uniforme, homogénea y de grosor adecuado.

En este trabajo se reporta la fabricación de películas de perovskita ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) llevando a cabo el estudio de diferentes factores durante el depósito de las mismas tales como: atmósfera durante el depósito de películas, uso de dimetilsulfóxido (DMSO) como co-disolvente, humedad relativa durante el tratamiento térmico y lavado de películas con clorobenceno (CB). Cada uno de los factores mencionados tuvo un efecto sobre la morfología, uniformidad y cristalinidad de las películas. Se diseñaron también celdas solares de área 0.06 cm^2 , donde la estructura empleada fue: ITO/PEDOT:PSS/Perovskita/PC71BM/FM; el óxido de indio y estaño (ITO) se usó como ánodo, el poli (3,4-etilendioxitiofeno) poliestireno sulfonado comúnmente llamado PEDOT:PSS como capa transportadora de huecos, el éster de ácido metil-fenil-C71 butírico (PC71BM) como capa extractora de electrones y como cátodo el Field's Metal (FM).

Las películas presentaron diferentes morfologías y en consecuencia los dispositivos fotovoltaicos fabricados tuvieron diferentes eficiencias de conversión ya que la densidad de corriente (JSC) y el voltaje de corto circuito (VOC) presentaron variaciones y en consecuencia el factor de llenado (FF) también. En este trabajo se logró una eficiencia de conversión máxima del 5.8 % con una morfología de estructura granular, compacta y con cierta uniformidad, donde los cristales de la perovskita estaban interconectados sobre toda la superficie de la película. Esta eficiencia se logró haciendo el depósito de la película en atmósfera de N_2 , con tratamiento térmico en humedad relativa del 32-35 % y bañada con clorobenceno quien indujo una mejor cristalización.

Se determinó que el grosor óptimo de las películas de perovskita de 340 nm y presentó huecos de escala micrométrica. En la literatura se reporta que los huecos en las películas tienen un impacto significativo sobre el desempeño fotovoltaico, su presencia puede introducir fuertes desarreglos energéticos lo que impide el transporte de carga, induce la recombinación y disminuye el rendimiento fotovoltaico debido a que podría causar fugas de corriente o un contacto directo entre los electrodos generando corto circuito en el dispositivo. En este trabajo de tesis se observó que la calidad de la capa activa (perovskita) no es crucial en el rendimiento global de las celdas fotovoltaicas debido a que el cátodo empleado Field's metal (FM) en su fase líquida presenta alta

tensión superficial que evita la difusión del material a través de los huecos entre los granos de la perovskita y así puede mantenerse sobre la superficie de la capa activa.

Con la caracterización de difracción de Rayos X de las películas de perovskita se logró tener información del tipo de fase de cristalización. Los difractogramas tomados confirmaron la obtención de perovskita en fase tetragonal. Se calculó también el band gap de energía el cual fue de 1.86 eV y este valor se encuentra en el rango de los dispositivos fotovoltaicos perovskita reportados.