



# UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

---

---

INSTITUTO DE INGENIERÍA  
MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS E INGENIERÍA

*“Desarrollo de una Metodología para el Análisis y Diseño de  
Dispositivos Fotovoltaicos Orgánicos con Estructura  
Vidrio/Ti/PEDOT:PSS/PEROVSKITE/Pt”*

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

***MAESTRO EN INGENIERÍA***

PRESENTA:

***CARLOS TAMAYO BELLO***

DIRECTORES DE TESIS:

***DR. CARLOS VILLA ANGULO***

## **DEDICATORIA**

Para mi Hijo Abi Andrés, a mis padres que me dieron la oportunidad de vivir, al viejo que me cuidó con lo mejor a su alcance siempre te recuerdo y te extraño, a mi esposa por darme el motivo y la oportunidad para intentar ser un buen padre, hijo tu puedes.

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a las instituciones que hicieron posible el proporcionarme la oportunidad de cumplir esta meta, a CONACYT (Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología) por la beca otorgada, Al Instituto de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Baja California, proporcionándome la oportunidad de Incrementar los conocimientos necesarios a través de mis maestros que me impartieron clase en el instituto. Al Dr. Carlos Villa Angulo Director de Tesis que finco los retos y la guía adecuada en mi proceso de aprendizaje y su paciencia. Al Dr. Nicola Nayev por lograr que sus clases fueran amenas provocando interés de conocimiento, con su asertiva elocuencia un modelo a replicar en el análisis de situaciones y problemas que involucren el área de conocimiento. Al Dr. Rogelio Irigoyen por compartir sus conocimientos y ayuda en su laboratorio. Al Dr. Rafael Villa Angulo por su tiempo y ayuda en momentos que requerí de asesoramiento y apoyo. A todos mis compañeros de laboratorio que compartieron su experiencia y me honran con su amistad siempre los tendré presentes y estaré agradecido, a mis amigos de toda la vida, Rubén Darío, Francisco Valenzuela, Alfredo, Tony, con quienes compartí la hora de la comida muchas tardes, y forman parte del grupo de amigos del camino de vida, gracias.

Finalmente no será suficiente lo que debo agradecerle a ti DIOS el darme la oportunidad, de lograr esta meta, para lograr expresar y darte gracias pediré prestado palabras de quienes antes que yo han agradecido con mejor elocuencia, sencillez y humildad la bondad de un dios que nunca vemos ni escuchamos cuando nos va bien. Por todo doy gracias, y tendré fe y perseverancia; puesto que la fe no es una negación de la ciencia muy por lo contrario la fe, entendida en este caso, como confianza humana ante lo no demostrable o comprobable, es de hecho una experiencia cotidiana de todo científico que indaga. ¡MUCHAS GRACIAS!

<b>ÍNDICE DE FIGURAS</b>	<b>Página</b>
Figura 1.1. Estado del arte en eficiencia y desarrollo de celdas solares orgánicas.	3 cap.1
Figura 1.2 Estructura básica de la celda unitaria diseñada.	4 cap.1
Figura 1.3 Estructura de un dispositivo fotovoltaico orgánico. (a) Estructura convencional (OPV), (b) estructura invertida.	5 cap.1
Figura 1.4 Compuestos para síntesis de Perovskita.	6 cap.1
Figura 1.5 a) ABX <sub>3</sub> cristal de un Perovskite orgánico (triyoduro metilamonio de plomo); b) estructura cubica extendida de Perovskite.	6 cap.1
Figura 1.6 Estructura básica de un dispositivo fotovoltaico con Perovskite (a) y (b).	7 cap.1
Figura 1.7. Distribución del campo eléctrico dentro de la estructura/dispositivo.	8 cap.1
Figura 1.8 Diagrama esquemático multicapa de un PVD usado para calcular el campo eléctrico óptico que se propaga hacia adelante y hacia atrás.	10 cap.1
Figura 1.9 perfil de distribución simulado de la amplitud del campo eléctrico óptico normalizado al cuadro dentro del PVD usando el formalismo TMM, para una longitud $\lambda=600$ nm.	12 cap.1
Figura 1.10 Gráficas características de corriente-voltaje de las celdas solares de BHJ (a) lineal y (b) en la representación semilogarítmica.	17 cap.1
Figura 2.1 Irradiación solar en el territorio Mexicano (2300KW/cm <sup>2</sup> )	19 cap.2
Figura 3.1 Estructura de la celda solar a diseñar.	21 cap.3
Figura 3.2 Estructura multicapa del dispositivo a diseñar.	22 cap.3
Figura 3.3 Taza de generación excitones en capa activa PEROVSKITE.	28 cap.3
Figura 3.4 secuencia iterativa implementada para satisfacer el algoritmo de Gummel.	29 cap.3
<i>Figura 3.5 Diagrama energético PEDOT: PSS/PEROVSKITE.</i>	30 cap.3
Figura 3.6 muestra la secuencia paso a paso implementada para encontrar V <sub>0</sub> .	32 cap.3
Figura 3.7 pasos para el cálculo de las características de desempeño del dispositivo diseñado.	34 cap.3
Figura 3.8 Gráfica de J vs V, Valores obtenidos con ayuda de matlab.	36 cap.3
Figura 3.9 Gráfica de ubicación de parámetros a máxima potencia con ayuda del programa matlab.	37 cap.3
Figura 3.10 Imagen de la estructura final y dimensionamiento del dispositivo diseñado.	39 cap.3
Figura 3.11 Ejemplo de la conexión serie y paralelo de los dispositivos unitarios.	40 cap.3
Figura 4.1 Gráfica de J vs V.	42 cap.4
Figura 4.2 Imagen de la estructura final y dimensionamiento del dispositivo diseñado.	42 cap.4

## ÍNDICE DE TABLAS

## Página

Tabla 3.1. Valores para Inicio de cálculo de $G(x)$ .	22 cap.3
Tabla 3.2. Valores calculados de Propagación.	28 cap.3
Tabla 3.3 Parámetros fundamentales del PEDOT:PSS/PEROVSKITE	29 cap.3
Tabla 3.4 Constantes utilizadas en los cálculos.	30 cap.3
Tabla 3.5 Resultados obtenidos en la ejecución del algoritmo de Gummel.	34 cap.3
Tabla 3.6 Variables fundamentales y parámetros calculados necesarios para calcular las características de desempeño del dispositivo diseñado $\lambda=350-800$ .	35 cap.3
Tabla 3.7 Resumen de los parámetros de desempeño calculados.	39 cap.3
Tabla 4.1 Resumen de los parámetros de desempeño calculados.	41 cap.4
Tabla 4.2 Resultados obtenidos de mediaciones por Masatoshi Yanagida y colaboradores.	43 cap.4
Tabla 4.3 Resultados obtenidos de mediaciones por Christian Wehrenfennig y colaboradores.	43 cap.4

## RESUMEN

En este trabajo de tesis se presenta el desarrollo de una metodología para el análisis y diseño de dispositivos fotovoltaicos con capa activa de material orgánico (OPV). La estructura del OPV considerada en este trabajo es de tipo Vidrio/Ti/PEDOT: PSS/Perovskite/Pt. El diseño teórico está basado en los tres procesos básicos de análisis y diseño de dispositivos fotovoltaicos; el cálculo de la tasa de generación de excitones  $G(x)$  utilizando la técnica de la matriz lineal de transferencia óptica en un solo eje, el cálculo de las concentraciones de carga  $n(x)$  y  $p(x)$  en la capa activa a través del cálculo de auto consistencia entre la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de cargas (algoritmo iterativo de Gummel) y la caracterización del desempeño del OPV para una irradiación solar promedio de  $100 \text{ mW/cm}^2$  (estándar AM 1.5G), mediante el cálculo de la curva de densidad de corriente-voltaje ( $JV$ ), el voltaje de circuito abierto ( $V_{oc}$ ), la densidad de corriente de corto circuito ( $J_{sc}$ ), el factor de llenado ( $FF$ ) y la eficiencia de conversión ( $PCE$ ) utilizando las ecuaciones básicas para dispositivos de unión  $pn$ . Los resultados teóricos obtenidos en este trabajo fueron comparados con mediciones prácticas reportadas por diferentes autores en los últimos años.

En el **capítulo uno** se encuentra la descripción general del estado del arte de dispositivos fotovoltaicos fabricados con material orgánico e inorgánico así como una reseña de la teoría básica necesaria para entender los diferentes temas que se abordan en el desarrollo de este trabajo de tesis.

En el **capítulo dos** se encuentra descrita la justificación planteada para la realización de este trabajo, los objetos generales y particulares así como la hipótesis.

En el **capítulo tres** se describe la metodología desarrollada para el análisis y diseño de dispositivo fotovoltaico orgánico con estructura Vidrio/Ti/PEDOT:PSS/PEROVSKITE/Pt. La metodología desarrollada se describe implementando de manera detallada, a través de un ejemplo con cálculos numéricos, los pasos necesarios para la simulación de los principales fenómenos presentes en este tipo de dispositivos.

En el **capítulo cuatro** se describen los resultados teóricos obtenidos en la implementación de la metodología desarrollada y se comparan estos resultados con resultados medidos de implementaciones prácticas reportados por diferentes autores en los últimos años.

En el **capítulo cinco** se describen las conclusiones más relevantes obtenidas en el desarrollo de este trabajo y se establece un conjunto de trabajos futuros que complementan dichos resultados.

## ABSTRACT

In this thesis, a developed methodology for the theoretical design of a photovoltaic device with active layer of organic material (OPV), is presented. The considered structure of the OVP is of type the Glass/Ti/PEDOT: PSS/ Perovskite/Pt. The theoretical design is based on the three basic processes of analysis and design of photovoltaic devices; the calculation of the generation rate of excitons  $G(x)$  using the technique of the linear matrix of optical transfer in a single axis, the calculation of the load concentrations  $n(x)$  and  $p(x)$  in the active layer through the calculation of self-consistency between the Poisson equation and the load continuity equations (Gummel's iterative algorithm) and the performance characterization of the OPV for an average solar irradiance of  $100 \text{ mW} / \text{cm}^2$  (standard AM 1.5G), by calculating the current-voltage density curve (JV), open-circuit voltage ( $V_{oc}$ ), short-circuit current density ( $J_{sc}$ ), fill factor (FF) and conversion efficiency (PCE) using the basic equations for connecting devices pn. The theoretical obtained results were compared with practical measurements obtained by different authors in the last years.

In **chapter one** it is described the state of the art of photovoltaic devices fabricated with organic and inorganic material as well as a review of the necessary basic theory needed to understand the different topics that are addressed in the development of this work.

In **chapter two** it is described the justification for the realization of this work, the general and particular objectives as well as the hypothesis.

In **Chapter three** it is described the developed methodology for the analysis and design of an organic photovoltaic device with structure of type Glass/Ti/PEDOT:PSS/PEROVSKITE/Pt. The developed methodology is described by implementing in detail, through an example with numerical calculations, the necessary steps for the simulation of the main phenomena present in this type of devices.

In **Chapter four** it is described the obtained theoretical results in the implementation of the developed methodology and also these results are compared with practical implementations obtained from similar devices reported by different authors in recent years.

In **Chapter five** it is describes the most relevant obtained conclusions from the development of this work and establishes a set of future works that can complement these results.

# ÍNDICE

DEDICATORIA	i
AGRADECIMIENTOS	ii
ÍNDICE DE FIGURAS	iii
ÍNDICE DE TABLAS	iv
RESUMEN	v
ABSTRAC	vi
INDICE	vii
Capítulo 1 INTRODUCCIÓN	
1.1    Estado del arte de los dispositivos fotovoltaicos orgánicos	1
1.2    Estructura básica de un dispositivo fotovoltaico	4
1.3    Estructura de dispositivo fotovoltaico orgánico	5
1.4    Dispositivo fotovoltaico basado en Perovskite	6
1.5    Espaciador óptico	8
1.6    Modelado óptico	9
1.6.1    Matriz de transferencia	9
1.6.2    Perfil del campo eléctrico dentro de la estructura	11
1.6.3    Perfil del la taza de generacion de excitones	12
1.7    Modelado eléctrico	13
1.7.1    Sistema de ecuaciones en estado estable para el DPV	13
1.7.2    Razón de disociación de excitones	14
1.8    Parámetros de un dispositivo fotovoltaico	15
1.8.1    Parámetros que caracterizan un dispositivo fotovoltaico	15
Capítulo 2 JUSTIFICACION Y OBJETIVOS	
2.1    Justificación del problema	18
2.2    Objetivos	19

2.2.1	Objetivo general	19
2.2.2	Objetivos específicos	19
2.3	Hipótesis	20
Capítulo 3 DESARROLLO DE METODOLOGIAS Y TECNICAS DE SIMULACION Y DISEÑO		
3.1	Metodología para el análisis y modelado óptico	21
3.1.1	Cálculo de los coeficientes de transmisión y reflexión en capa perovskite	22
3.1.2	Cálculo del campo eléctrico en la capa de Perovskite	26
3.1.3	Cálculo de la disipación del campo eléctrico en la capa de Perovskite	27
3.1.4	Cálculo de la tasa de generación de excitones en la capa de Perovskite	27
3.2	Metodología para el análisis y modelado eléctrico	28
3.2.1	Implementación del algoritmo de Gummel	28
3.3	Metodología para análisis y cálculo de las características de desempeño	34
3.3.1	Dimensionamiento del dispositivo fotovoltaico diseñado	38
3.3.2	Arreglo serie-paralelo para el diseño del dispositivo de 3 mA	40
Capítulo 4 ANALISIS DE RESULTADOS		
4.1	Resumen de los resultados obtenidos en el diseño teórico	41
4.2	Comparación de los resultados obtenidos con los resultados publicados	41
Capítulo 5 CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO		
5.1	Conclusiones	45
5.2	Trabajo Futuro	45
REFERENCIAS		
ANEXO I Abreviaturas y/o Acrónimos		
ANEXO II Índice de Refracción complejo del Ti		
ANEXO III Índice de Refracción complejo del PEDOT:PSS		
ANEXO IV Índice de Refracción complejo del PEROVSKITE		
ANEXO V Índice de Refracción complejo del PT		
ANEXO VI Tabla de irradiación $E_0$ por longitud de onda		
ANEXO VII Ecuaciones utilizadas		

# CAPÍTULO 1.

## INTRODUCCIÓN

### 1.1 Estado del Arte de los dispositivos fotovoltaicos orgánicos.

Las energías renovables son consideradas aquellas que se generan a partir de procesos naturales y que pueden ser reintegrados en forma continua. La forma de producir energía eléctrica de una forma más directa es por captación de energía solar, que ofrece ventajas tales como la cantidad ilimitada de energía disponible y ausencia de emisión de gases, entre otras. Para proporcionar energía eléctrica a partir de energía solar se utilizan los dispositivos fotovoltaicos. El principio fundamental de operación de un dispositivo fotovoltaico es el efecto fotoeléctrico, en el cual la energía de un fotón de luz incidente cede su energía a los electrones que están en la banda de valencia (BV) de un semiconductor elevando su estado energético provocando que salten a la banda de conducción (BC). La energía fotovoltaica es un campo de investigación aplicada que ha ganado popularidad gracias a la idea de que esta puede contribuir significativamente a la generación de electricidad en todo el mundo mediante la conversión de la luz solar en energía eléctrica. La energía fotovoltaica es la más prometedora entre las tecnologías emergentes de energía renovable debido a su gran potencial teórico. [1] Se estima que este potencial es 6000 veces mayor que la demanda actual de energía primaria de 11,000 millones de toneladas equivalentes de petróleo (Potencia media de 14TW).

El primer dispositivo fotovoltaico (de silicio) fue desarrollado y construido en los laboratorios Bell en los estados unidos de américa en el año 1953 y no supero el 4% de eficiencia. Seis años después William B. Shockley, Walter H. Brattain y John Bardeen descubrieron la unión *pn*. Gracias a esto, cinco años más tarde se inventó el primer dispositivo fotovoltaico que posteriormente fue llamado celda solar. En la actualidad se requiere mucho menos esfuerzo y energía al producir celdas solares usando semiconductores orgánicos que al producirlas usando semiconductores inorgánicos. Esto es debido a que en la fabricación de celdas orgánicas se pueden utilizar técnicas más sencillas de procesamiento a temperaturas mucho más bajas. Por ejemplo, las celdas solares electroquímicas que usan dióxido de titanio junto con un colorante orgánico y un electrolito líquido [2] se pueden fabricar sin equipo sofisticado de crecimiento de materiales superando eficiencias de conversión de energía del 6%. Estas han ingresado al mercado comercial gracias a sus costos de producción relativamente bajos. Se pronosticaba que para el año 2017 alcanzarían una eficiencias del 24%, lo que se cumplió.

Otra alternativa en la fabricación de celdas orgánicas es la utilización de polímeros semiconductores, que combinan las propiedades optoelectrónicas de semiconductores convencionales con las excelentes propiedades mecánicas y de procesamiento de materiales polímeros o plásticos. Estos pueden procesarse a temperatura ambiente en sustratos flexibles utilizando métodos de deposición simples y económicos como el recubrimiento

por centrifugado o “spin-coating”. La ventaja de las celdas fotovoltaicas poliméricas en comparación con las celdas electroquímicas es la ausencia de un electrolito líquido, que genera problemas con el sellado frente al aire, pero también la posibilidad de una producción aún más económica usando dispositivos de gran área.[3] La principal diferencia entre los semiconductores orgánicos y los semiconductores inorgánicos (atómicos) es que en los orgánicos existe la presencia de moléculas, que mantienen la mayoría de sus características en todo el sólido. La existencia de moléculas impacta en las propiedades ópticas como la absorción y la luminiscencia y las propiedades eléctricas como el ancho de la banda prohibida y la localización del transportador de carga. Estas últimas están conectadas al hecho de que las películas delgadas orgánicas son principalmente amorfas o nanocristalinas. El término de semiconductor orgánico se refiere a semiconductores donde el principal elemento es el Carbono (C) que en la tabla de los elementos químicos tiene 6 electrones incluidos 4 electrones de Valencia.

Uno de los principales requisitos actuales de los dispositivos fotovoltaicos es la necesidad de que cuenten con una alta eficiencia de conversión de potencial. En la Figura 1.1 se muestra el estado del arte de la eficiencia de conversión lograda por celdas fabricadas con material inorgánico y orgánico, desde su aparición en los años 1970 hasta la proyección 2020. En esta figura se observa que las celdas solares con mayor eficiencia son las fabricadas con material inorgánico, pero también se observa que la pendiente de incremento de eficiencia es lenta con respecto al tiempo. Por lo contrario, las celdas solares fabricadas con material orgánico tienen una pendiente de crecimiento mayor con respecto al tiempo. La eficiencia teórica de una celda solar fabricada con material inorgánica es 33.7% para una sola unión *pn* con un ancho de zona prohibida de 1.34 eV. Una celda solar de silicio tiene un límite de eficiencia de aproximadamente 29%, sin embargo, en condiciones prácticas; tal valor se degrada por medio de diferentes mecanismos de pérdida. Los principales fenómenos de pérdida, son tanto ópticos como eléctricos.

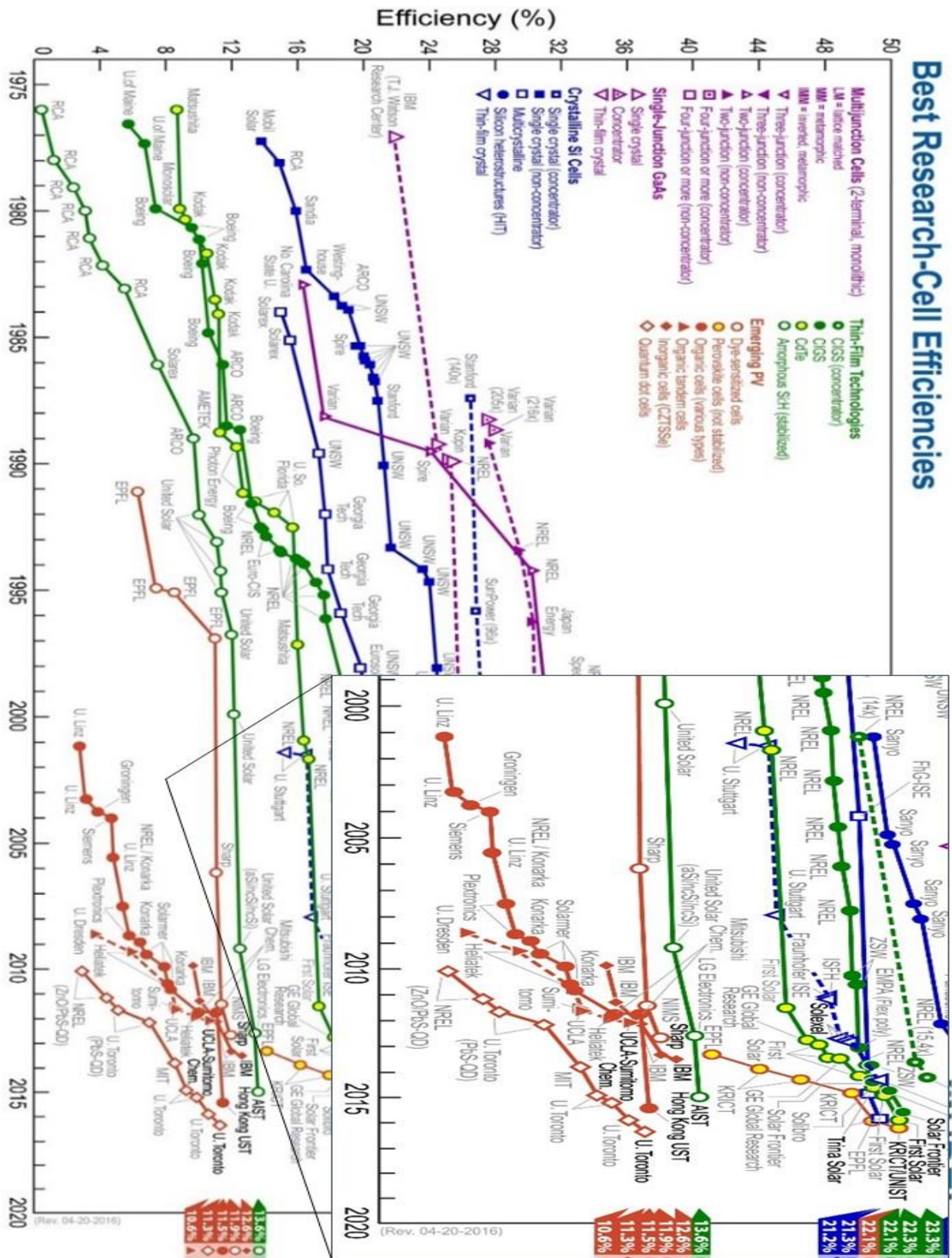


Figura 1.1. Estado del arte en eficiencia y desarrollo de celdas solares orgánicas.

## 1.2 Estructura básica de un dispositivo fotovoltaico.

A la unidad básica de diseño se le denomina dispositivo fotovoltaico unitario. Tal como se muestra en la Figura 1.2, es básicamente un fotodiodo formado por una unión pn entre dos contactos metálicos que sirven como electros de conexión a la carga. Utilizando múltiples celdas solares unitarias se establecen conexiones en serie y paralelo para satisfacer una demanda de corriente y voltaje de diseño. En este capítulo se describe el procedimiento seguido para el diseño teórico de la celda unitaria, así como el procedimiento para el diseño de un panel de (n x m) celdas unitarias.

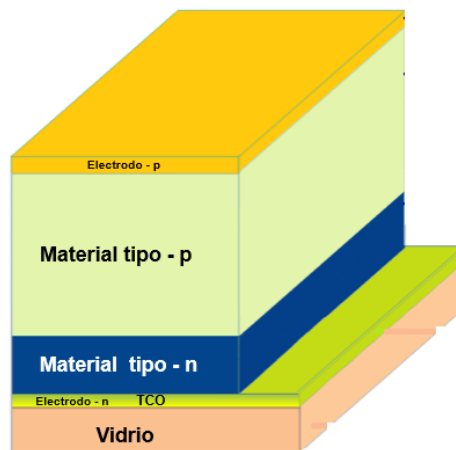


Figura 1.2 Estructura básica de la celda unitaria diseñada.

La estructura de la figura 1.2, consiste de un sustrato de vidrio soda-lima, también conocido como sustrato de vidrio común, una capa de óxido conductor transparente (TCO) llamada electrodo tipo n, una capa de material tipo n, una capa de material tipo p y una capa de material metálico llamada electrodo tipo p. El sustrato de vidrio soda-lima, también conocido como vidrio común, es muy utilizado para la fabricación de celdas solares gracias a su gran transparencia al espectro de irradiación solar y su bajo costo en producciones masivas. Su función es servir como soporte mecánico de la celda haciendo la función de sustrato de anclaje. El electrodo tipo n (TCO, óxido Conductor Transparente) tiene la función de servir como contacto frontal de la celda sin atenuar la irradiación solar que la impacta. El material tipo n también llamado material ventana es uno de los dos materiales que forman la región activa de la unión pn de la celda. Su función principal es formar parte de la unión pn sin atenuar o absorber demasiado la irradiación solar que lo atraviesa permitiendo que esta llegue en su mayoría a la capa activa principal. El material tipo p también llamado capa activa es el segundo material que forma parte de la unión pn de la celda. Este material tiene la función principal de absorber la mayoría de los fotones provenientes en la irradiación solar generando los excitones (par electrón-hueco) que participaran en la generación de la corriente. Por último, el electrodo tipo p tiene la función de servir como contacto trasero de la celda el cual se conecta directamente a la carga asignada.

### 1.3 Estructuras de un dispositivo fotovoltaico orgánico.

Existen dos tipos de estructuras generales para el desarrollo de celdas solares orgánicas, la estructura convencional y la estructura invertida. La Figura 1.3(a) muestra la estructura de una celda solar convencional (OPV), posee una capa activa absorbidora de fotones formada por dos materiales conjugados; un fullereno aceptor de cargas y un polímero donador de cargas. Esta capa activa esta insertada por un lado entre una capa selectora de electrones y un electrodo de metal llamado cátodo. La capa selectora de electrones mejora la interface entre el fullereno y el cátodo. En el otro lado de la capa activa esta una capa selectora de huecos y un electrodo de metal llamado ánodo. La capa selectora de huecos mejora la interface entre el polímero donador el ánodo. En operación, la estructura es irradiada con la luz solar, los fotones son absorbidos por la capa activa, los electrones del nivel orbital molecular ocupado más alto de los materiales donantes (HOMO) se excitan a un nivel de energía más alto, y los excitones individuales se forman dentro de los materiales del donante. Estos excitones se difunden a la interfaz entre el material donante y el material aceptor (LUMO) dentro de sus tiempos de vida. En la interfaz, los excitones se disocian en electrones y huecos como resultado de la diferencia de potencial entre el fullereno y el polímero. Luego, los electrones y los huecos se mueven hacia el cátodo y el ánodo, donde se recolectan para formar un flujo de corriente entre los contactos metálicos. Por el contrario, en un dispositivo fotovoltaico invertido (IOPV), como se muestra en Figura 1.3 (b), la posición de la capa selectora de electrones y el fullereno se intercambia por la capa selectora de huecos y el polímero. En esta disposición, los electrones fotogenerados en la capa activa son recolectados por el cátodo, mientras que los huecos fotogenerados son recolectados por el ánodo. Esta celdas solares orgánicas se describen como invertidas porque los electrones fluyen en una dirección opuesta a la de las estructuras convencionales.

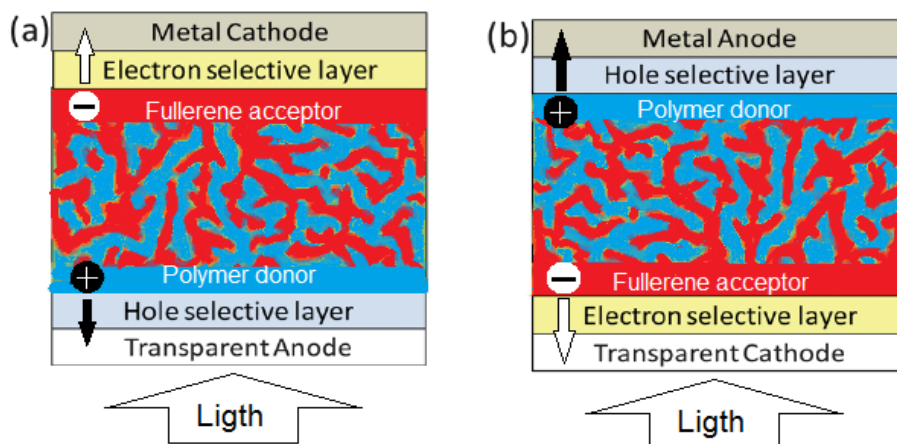


Figura 1.3 Estructura de un dispositivo fotovoltaico orgánico. (a) Estructura convencional (OPV), (b) estructura invertida

## 1.4 Dispositivos fotovoltaicos basados en Perovskite.

Un Perovskite es un cristal con estructura molecular en celda cúbica y fórmula química  $ABX_3$  donde A y B son cationes de diferentes tamaños que se acomodan en las esquinas del cubo y en el centro del mismo, respectivamente; mientras que X es un anión situado en las caras. El ion A puede ser un alcalino lantánido, B es normalmente un metal de transición y X es un halógeno o un oxígeno [4]. Muchos Perovskites presentan propiedades interesantes como piezoelectricidad, ferroelectricidad, superconductividad y efecto fotovoltaico. En los últimos años se ha propuesto para sintetizar diferentes tipos de Perovskites con aplicación en dispositivos fotovoltaicos 13 aminas, 21 metales divalentes y 8 especies aniónicas, tal como se muestra en la Figura 1.4, lo que da un resultado de 600 posibles tipos, muchas de las cuales aún no se han sintetizado en su totalidad. Sin embargo, en aplicaciones fotovoltaicas, la base para la síntesis de Perovskites orgánicos gira en torno al metilamonio de yoduro de plomo,  $CH_3NH_3PbI_3$ , conocido como MAPI o  $MAPbI_3$ , cuya estructura se ilustra en la Figura 1.5.

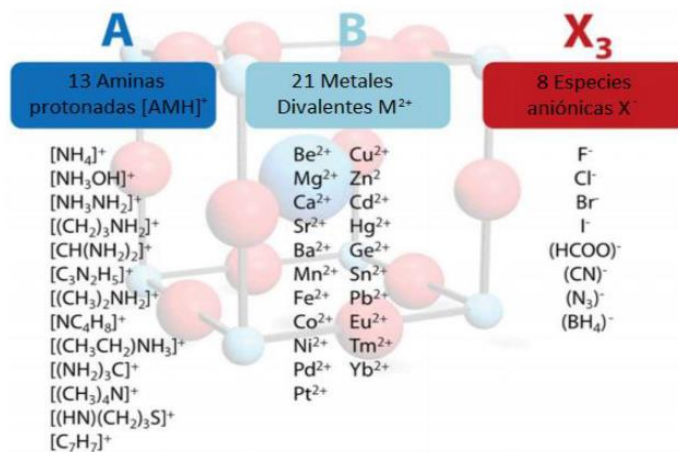


Figura 1.4 Compuestos para síntesis de Perovskita.

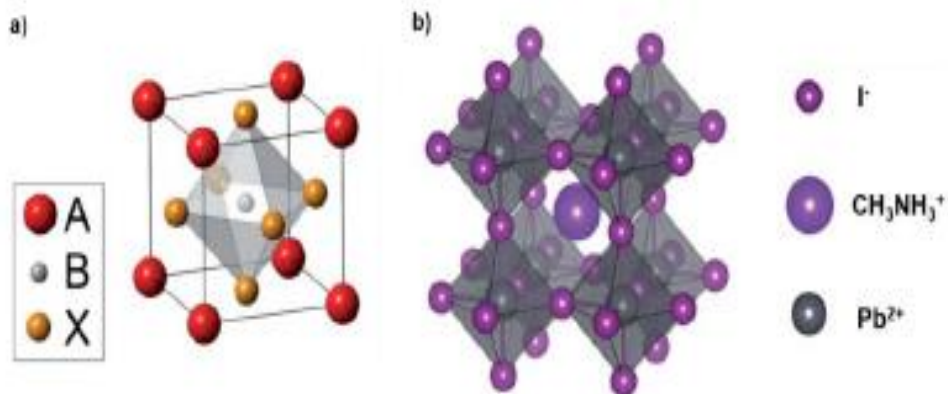


Figura 1.5 a)  $ABX_3$  cristal de un Perovskite orgánico (triyoduro metilamonio de plomo); b) estructura cubica extendida de Perovskite.

Los perovskite tienen propiedades de transporte de carga ambipolar, es decir conducen tanto electrones como huecos, son de band gap directo que varía en un rango de 1.2-2.3 eV, dependiendo de su composición [4]. Es posible modificar el band gap, ver Figura 1.6 (b), para ampliar el espectro de absorción, por ejemplo, si se cambia el catión orgánico de MA por FA el band gap se reducirá alrededor de 0.07 eV o bien si el Pb es sustituido por Sn el band gap se aumentara a 1.17 eV. Los Perovskite se caracterizan también por tener grandes longitudes de difusión de portadores de carga; en el caso del compuesto metil amonio de yoduro de plomo (MAPbI<sub>3</sub>) la longitud de difusión de los electrones y los huecos es de 130 y 110 nm respectivamente mientras que para el compuesto MAPbI<sub>3</sub>-XCIX la longitud de difusión se incrementa desde 130 a más de 1000 nm. El efecto fotovoltaico con Perovskite funciona diferente al convencional en celdas solares de uniones pn, este es conocido como efecto fotovoltaico de bulto, donde asociada a la polarización del cristal, se tiene un campo eléctrico el cual permite la separación de los portadores de carga generados. Para describir la estructura de un dispositivo fotovoltaico con Perovskite se partirá de la primera capa que tendrá el contacto con la luz de sol y se avanzará con las capas restantes apiladas de acuerdo a Figura 1.6 (a).

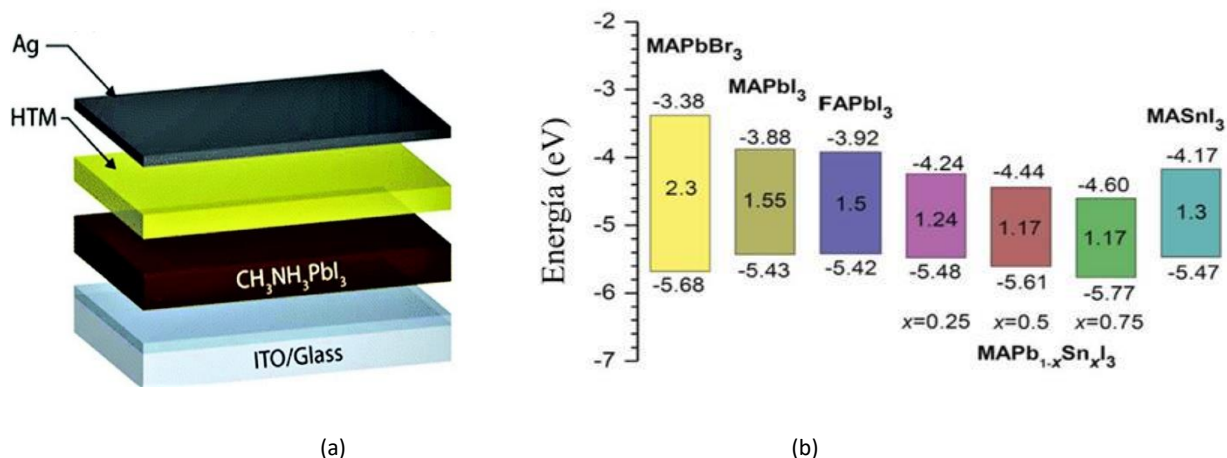


Figura 1.6 Estructura básica de un dispositivo fotovoltaico con Perovskite.

La primera capa es un conductor transparente, generalmente óxido de indio-estaño, conocido como ITO (*indium tin oxide*), o bien óxido de estaño dopado con flúor, FTO (*fluor tin oxide*), depositado sobre vidrio. Ésta sirve como electrodo y al mismo tiempo permite el paso de los fotones provenientes de la luz solar. La segunda capa, que también permite el paso de los fotones, es la conductora de electrones, la cual se encuentra en contacto directo con el Perovskite. Normalmente la capa está conformada por una película de TiO<sub>2</sub> continua y sobre ésta una mesoporosa, que tiene la finalidad de favorecer el intercambio electrónico y el paso de fotones al Perovskite y cuya estructura y morfología juega un papel fundamental en la captación de electrones. Una vez que los fotones han interactuado con el Perovskite y generado pares electrón-hueco, los electrones generados

son transportados a la capa de TiO<sub>2</sub> y de ahí al conductor transparente. Cabe mencionar que dependiendo de los materiales utilizados y sus características se han reportado eficiencias de entre el 3% y hasta un 18% sólo considerando las características de la capa conductora de electrones y el Perovskite. Comúnmente se manejan espesores entre los 200 y 400 nm, con tamaños de poros menores a los 50 nm y una fase cristalina anatasa para el TiO<sub>2</sub>. La siguiente capa es la de Perovskite, y después la conductora de huecos, la cual puede ser desde un simple electrolito hasta una enorme gama de materiales metálicos y polímeros [5]. El problema con el uso de electrolitos es que al entrar en contacto con el Perovskite terminan degradándola de manera rápida, dando un promedio de vida media de sólo horas o minutos. Esta capa de transporte de huecos, o por sus siglas en inglés HTM (*hole transmission material*), tiene la función de facilitar la transferencia de los huecos. Finalmente, la última capa es un electrodo, comúnmente de oro (Au) o plata (Ag), el que tiene la finalidad de recibir a los huecos generados y servir como contra electrodo para cerrar el circuito de la celda solar.

### 1.5 Espaciador Óptico

La absorción de la luz dentro de la capa activa de película delgada puede ser incrementada al cambiar la distribución espacial del campo eléctrico óptico dentro del dispositivo. La Figura 1.7 muestra una representación esquemática de la distribución parcial de la intensidad al cuadrado del campo eléctrico óptico. Así, una fracción de la capa activa está en una zona muerta (valor cero del campo eléctrico) en el cual una foto generación de portadores es reducida significativamente. Este "efecto de interferencia óptica" es especialmente importante para estructuras de película delgada donde el espesor es comparable con la profundidad de absorción y la longitud de onda de luz incidente, como es el caso de dispositivos de polímero [6]. Para solucionar esta situación, una solución simple sería incrementar el espesor de la capa activa para que absorba más luz, pero la baja difusión no permitiría una colección de carga.

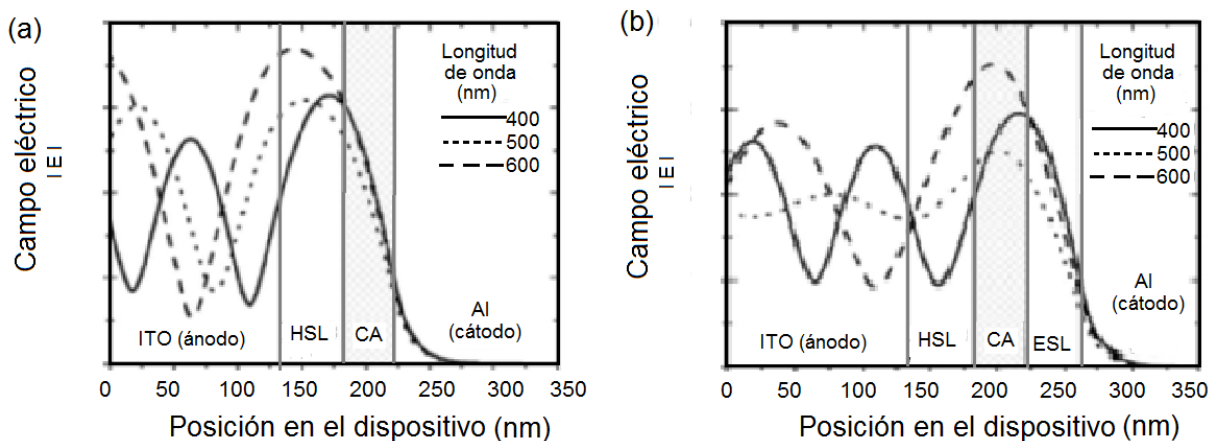


Figura 1.7. Distribución del campo eléctrico dentro de la estructura/dispositivo.

Insertando una capa transparente extra transportadora de electrones entre la capa activa y el electrodo metálico puede poner la capa activa en condiciones favorables para el campo eléctrico, obteniendo así un espaciador óptico. Para un OPV, insertar un espaciador óptico entre la capa activa y el electrodo refractivo resulta en una redistribución del campo eléctrico óptico. Además de ser un buen selector de electrones o huecos según sea el caso, debe tener una banda de conducción más baja en energía que el LUMO de fullereno; su nivel LUMO debe estar arriba o cercano al nivel de Fermi del electrodo metálico colector (Al); debe ser transparente a la luz en el espectro solar. El espaciador óptico puede ser de beneficio cuando se considera todo el rango de longitudes de onda de la absorción óptica en la capa activa del material.

El análisis teórico para el modelo óptico es el elemento clave para el entendimiento y predicción de los efectos ópticos en las OPV, con los cual se utiliza el formalismos de matriz de transferencia. La absorción, transmisión, reflexión y corrimiento de fase puede ser descrito por las partes real e imaginaria del índice de reflexión complejo de cada material considerado en la estructura de la celda. El campo eléctrico en cada posición puede ser calculado con el resultado de la matriz de transferencia del sistema. Para cuantificar el efecto del tipo de material y su espesor en el dispositivo se determinan los parámetros que caracterizan a las celdas ( $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF, PCE) con el estándar de iluminación AM1.5. No siempre al incluir un material como espaciador óptico resulta en una mejora en la eficiencia de conversión fotovoltaica, solo en el caso que el espesor elegido este separado del máximo local de la disipación de potencia óptica puede la disipación ser aumentada por el espaciador óptico. Si la geometría y el espesor se eligen para dar una disipación de potencia óptica, tal ventaja no es viable.

## 1.6 Modelado óptico

### 1.6.1 Matriz de transferencia

Para considerar la distribución del campo eléctrico total dentro de la película delgada de la estructura, usamos la teoría de la matriz de transferencia óptica. Esta teoría sirve para modelar la variación de la intensidad del campo eléctrico óptico cuando atraviesa las diferentes capas del dispositivo, tal como se muestra en la Figura 1.8. El dispositivo consiste en un conjunto de capas entre sustrato y aire, cada una es descrita por el espesor  $d$  de cada capa junto con su índice de refracción complejo  $\tilde{n}(\lambda) = \bar{n}(\lambda) + i\bar{k}(\lambda)$ , donde  $\bar{n}$  el índice de refracción y  $\bar{k}$  es el coeficiente de extinción de cada capa.

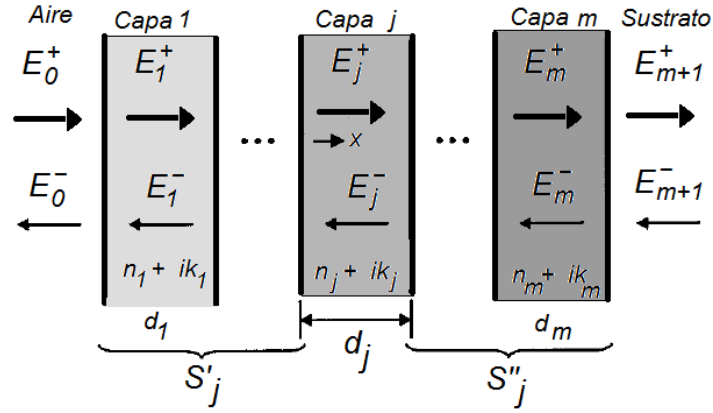


Figura 1.8 Diagrama esquemático multicapa de un PVD usado para calcular el campo eléctrico óptico que se propaga hacia adelante y hacia atrás.

Considerando la luz como una onda plana que incide normalmente en el sustrato, el campo eléctrico de la luz en cualquier punto del dispositivo es una cantidad compleja con un superíndice positivo  $E^+(x)$  para ondas viajeras de izquierda a derecha y un superíndice negativo  $E^-(x)$  para ondas que viajan de derecha a izquierda. El comportamiento de la luz en cada interface entre dos capas,  $j$  y  $k$  puede ser descrito por una matriz de interface de 2x2 dada por la ecuación (1.1), que contiene los coeficientes complejos de Fresnel

$$I_{jk} = \frac{1}{t_{jk}} \begin{bmatrix} 1 & r_{jk} \\ r_{jk} & 1 \end{bmatrix} \quad (1.1)$$

Donde  $r_{jk}$  y  $t_{jk}$  son los coeficientes de reflexión y transmisión que dependen del índice de refracción complejo,  $r_{jk} = (\tilde{n}_j - \tilde{n}_k)/(\tilde{n}_j + \tilde{n}_k)$  y  $t_{ij} = 1 + r_{jk}$  respectivamente. El efecto sobre el campo eléctrico que se propaga en cada capa esta descrito por la matriz de propagación dada por la ecuación (1.2)

$$L_j = \begin{bmatrix} e^{-i\xi_j d_j} & 0 \\ 0 & e^{i\xi_j d_j} \end{bmatrix} \quad (1.2)$$

Donde  $\xi_j = 2\pi\tilde{n}_j/\lambda$  y  $\lambda$  es la longitud de onda de la luz. Las componentes del campo eléctrico dentro del sustrato (subíndice  $o$ ) están relacionadas con las del aire (subíndice  $m+1$ ) por la matriz de transferencia total  $S$

$$\begin{bmatrix} E_o^+ \\ E_o^- \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} E_{m+1}^+ \\ E_{m+1}^- \end{bmatrix} \quad (1.3)$$

Donde  $S$  es el producto de todas las matrices de interface y matrices de capas:

$$S = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} = \left( \prod_{n=1}^m I_{(n-1)n} L_n \right) I_{m(m+1)} \quad (1.4)$$

Las cantidades del campo en la ecuación (1.3) son aquellas que existen en la frontera con el conjunto de capas  $m$  que constituyen la parte activa del dispositivo. Los coeficientes de reflexión y transmisión resultan entonces  $r = E_o^-/E_o^+ = S_{21}/S_{11}$  y  $t = E_{m+1}^+/E_o^+ = 1/S_{11}$ , respectivamente. La eficiencia de absorción de una

pila de múltiples capas es entonces  $\eta_A = 1 - T - R$ , con la transmisividad como  $T = |t|^2 \bar{n}_{m+1} / \bar{n}_0$  y la reflectividad  $R = |r|^2$ , total de la estructura multicapa. La absorción de luz total en el dispositivo esta descrita por  $A = 1 - R$ , también representa el límite superior de la fracción de fotones incidentes en el dispositivo que pueden contribuir a la fotocorriente, siempre es menor a 1, donde  $T$ ,  $R$  y  $A$  dependen de la longitud de onda  $\lambda$  [21, 24, 39]. Con tal de calcular el campo eléctrico interno en la capa  $j$ , el sistema de capas puede ser dividido en dos subconjuntos, separados por la capa  $j$  anterior, indicada con ('), y un posterior indicado con (''). Así, la matriz de transferencia del sistema total puede ser escrito como

$$S = S'_j L_j S''_j \quad (1.5)$$

Con

$$S'_j = \left( \prod_{n=1}^{j-1} I_{(n-1)n} L_n \right) I_{(j-1)j} \quad (1.6)$$

Y

$$S''_j = \left( \prod_{n=j+1}^m I_{(n-1)n} L_n \right) I_{m(m+1)} \quad (1.7)$$

Donde los sistemas parciales  $S'_j$  and  $S''_j$ , tienen sus propios coeficientes de transmisión y reflexión dados por  $t'_j = 1/S'_{j11}$ ,  $t''_j = 1/S''_{j11}$ ,  $r'_j = S'_{j21}/S'_{j11}$ , y  $r''_j = 1/S''_{j11}$ , respectivamente.

### 1.6.2 Perfil de campo eléctrico dentro en la estructura.

Combinando la ecuación (1.5), (1.6) y (1.7) con sus correspondientes coeficientes, un par de coeficientes de transferencia interna que relacionan la onda plana incidente con el campo eléctrico interno propagándose en las direcciones en  $x$  positivas y negativas en la capa  $j$  en la interface  $(j-1)j$  pueden ser determinadas como

$$t_j^+ = \frac{E_j^+}{E_0^+} = \frac{t_j}{1 - r'_{j-} \cdot r''_j \cdot e^{i2d_j \xi_j}} \quad (1.8)$$

$$t_j^- = \frac{E_j^-}{E_0^+} = \frac{t_j - r''_j \cdot e^{i2d_j \xi_j}}{1 - r'_{j-} \cdot r''_j \cdot e^{i2d_j \xi_j}} = t_j^+ r''_j \cdot e^{i2d_j \xi_j} \quad (1.9)$$

Donde  $r'_{j-} = -S'_{j12}/S'_{j11}$ . Usando las ecuaciones (1.8) y (1.9), resulta el campo eléctrico total en un plano arbitrario de la capa  $j$  a una distancia  $x$  a la derecha de la frontera  $(j-1)j$  en términos de la onda plana incidente  $E_0^+$  como

$$E_j(x) = E_j^+(x) + E_j^-(x) = t_j^+ \left[ e^{i \xi_j x} + r''_j e^{i \xi_j (2d_j - x)} \right] E_0^+ \quad (10)$$

La ecuación (1.10) puede ser expresada también en términos de los elementos de la matriz de las matrices de transferencia del sistema, para  $0 \leq x \leq d_j$ , como

$$E_j(x) = \frac{S''_{j11} \cdot e^{-i \xi_j (d_j - x)} + S''_{j21} \cdot e^{i \xi_j (d_j - x)}}{S'_{j11} S''_{j11} \cdot e^{-i d_j \xi_j} + S'_{j12} S''_{j21} \cdot e^{i d_j \xi_j}} E_0^+ \quad (1.11)$$

La Figura 1.9 muestra el perfil de distribución simulado de la amplitud del campo eléctrico óptico normalizado al cuadrado dentro del PVD usando el formalismo TMM, para una longitud de onda  $\lambda = 600\text{nm}$  para todas las capas.

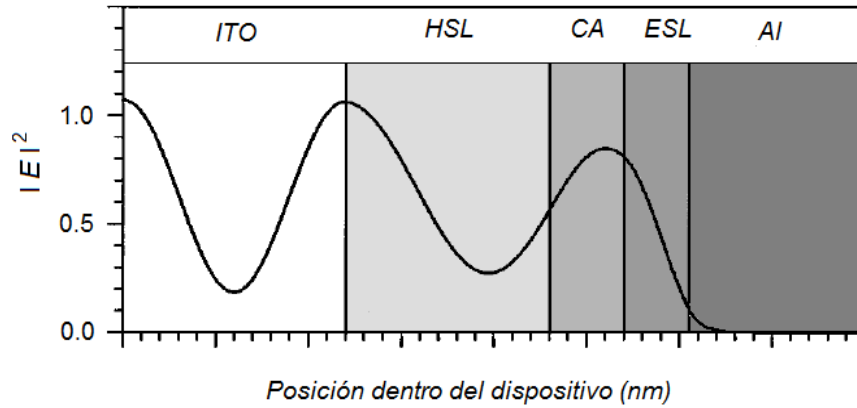


Figura 1.9 Perfil de distribución simulado de la amplitud del campo eléctrico óptico normalizado al cuadrado dentro del PVD usando el formalismo TMM, para una longitud de onda  $\lambda = 600\text{nm}$

### 1.6.3 Perfil de la tasa de generación de excitones

Dado que el número de estados excitados en una posición dada en una estructura está directamente dependiente de la energía absorbida por el material, la energía de disipación del campo electromagnético en el material es la cantidad que es de interés en el caso de dispositivos fotovoltaicos. El promedio del tiempo de la energía disipada por segundo en la capa  $j$  en la posición  $x$  en una incidencia normal  $t$  normal está dada por

$$Q_j(x, \lambda) = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \alpha_j \bar{n}_j |E_j(x)|^2 \quad (1.12)$$

Donde  $c$  es la velocidad de la luz,  $\epsilon_0$  la permitividad del espacio libre,  $\bar{n}_j$  el índice de refracción, y  $\alpha_j$  el coeficiente de absorción dado por  $\alpha_j = 4\pi \bar{k}_j / \lambda$ , donde  $\bar{k}_j$  es el coeficiente de extinción de la capa  $j$ . Así, el número de estados excitados en la capa es proporcional al número de fotones absorbidos y, por lo tanto,  $|E|^2$  versus la posición  $x$  en la capa directamente representa la producción de estados excitados en cada punto. Expandiendo la ecuación (1.12) con el uso de la ecuación (1.10), el resultado de la luz incidente de manera normal obtenemos

$$Q_j = \alpha_j T_j I_0 \left[ e^{-\alpha_j x} + \rho_j''^2 \cdot e^{-\alpha_j (2d_j - x)} + 2\rho_j'' \cdot e^{-\alpha_j d_j} \cdot \cos\left(\frac{4\pi\eta_j}{\lambda}(d_j - x) + \delta_j''\right) \right] \quad (1.13)$$

Donde  $I_0$  es la intensidad de la luz incidente,  $T_j = (\eta_j/\eta_0)|t_j^+|^2$  es la intensidad de transmitancia interna,  $\rho_j''$  es el valor absoluto y  $\delta_j''$  el argumento de los coeficientes de reflexión complejos del segundo subsistema dado por  $r_j''$ . Como se puede ver en la ecuación (1.13), la disipación de energía en una estructura de capas en cada posición en  $x$  de la capa  $j$  es descrita por tres términos. El primer término a la derecha se origina por la propagación del campo eléctrico en la dirección positiva  $x$ , (la misma dirección de propagación del campo eléctrico incidente), el segundo término es por la propagación del campo en la dirección negativa de  $x$ , y el tercer término es debido a la interferencia de las dos ondas. Una vez que  $Q_j$  es determinado, y asumiendo que un fotón se convierte en un excitón (eficiencia de conversión de foton-exitón,  $\eta = 1$ ), la proporción de generación de excitones  $G(x)$  puede ser expresada dividiendo  $Q_j$  por la energía de un fotón individual de longitud de onda  $\lambda$  y se integra sobre todo el espectro visible

$$G(x) = \eta \int_{350}^{800} \frac{\lambda}{hc} Q(x, \lambda) d\lambda \quad (1.14)$$

Donde  $h$  es al constante de Planck. La integración es realizada desde 350 hasta 800 nm, que es el rango de absorbancia del fotón desde el vidrio hasta la capa activa del polímero del dispositivo fotovoltaico.

## 1.7 Modelado eléctrico

### 1.7.1 Sistema de ecuaciones en estado estable para el PVD.

Para determinar la corriente de corto circuito en estado estacionario de los dispositivos fotovoltaicos basados en polímeros, se resuelven conjuntamente la ecuación de Poisson [ecuación (1.15)] y las ecuaciones de continuidad (ecuaciones (1.16) y (1.17)) hasta obtener auto-consistencia en las soluciones [31, 32]. Para obtener una solución auto consistente, se asume un valor inicial para el potencial y la densidad de portadores de carga. Con esta consideración, se hace una corrección a  $\delta\psi$  y un nuevo potencial es calculado desde la ecuación de Poisson.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = \frac{q}{\epsilon_r \epsilon_0} [n(x) - p(x)], \quad (1.15)$$

Este nuevo valor del potencial es usado para actualizar el valor de las densidades de portadores de carga resolviendo la ecuación de continuidad. Este proceso es repetido hasta que la convergencia es alcanzada.

$$\frac{\partial}{\partial x} J_n(x) = qU(x) \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} J_p(x) = qU(x), \quad (1.17)$$

En las ecuaciones anteriores,  $\psi(x)$  es el potencial eléctrico,  $q$  es la carga del electrón,  $n(x)$  y  $p(x)$  representan las densidades de electrones y huecos,  $J_n(x)$  and  $J_p(x)$  representan las densidades de corriente de electrones y huecos,  $\epsilon_r$  es la constante dieléctrica del material y  $U(x)$  es la proporción neta de generación de portadores libres.

En consecuencia, con la intención de resolver las ecuaciones anteriores, densidad de corriente, densidades de portadores y el potencial necesitan estar relacionados. Esto se logra en las ecuaciones (1.18) y (1.19) incorporando los portadores de difusión y deriva

$$J_n = qn\mu_n \frac{\partial}{\partial x} \psi + qD_n \frac{\partial}{\partial x} n, \quad (1.18)$$

$$J_p = qp\mu_p \frac{\partial}{\partial x} \psi + qD_p \frac{\partial}{\partial x} p, \quad (1.19)$$

Donde  $D_{n,p}$  son los coeficientes de difusión de los portadores, que se considera que sigan la relación de Einstein [13] dado por  $D_{n,p} = \mu_{n,p}V_t$ , con  $V_t$  el voltaje térmico, i.e,  $V_t = k_B T/q$ , donde  $k_B$  es la constante de Boltzman y  $T$  es la temperatura absoluta. Sin embargo, notamos que en una alta densidad de portadores el coeficiente de difusión se incrementará.

### 1.7.2 Razón de disociación de excitones

La proporción neta de generación de portadores libres  $U(x)$  se obtiene resolviendo la ecuación (1.20), donde  $R$  es la razón de recombinación biomolecular, dada por  $R = \gamma(np - n_{int}^2)$  con  $\gamma = \langle \mu \rangle q / \langle \epsilon \rangle$  siendo la fuerza de recombinación, y donde  $\langle \mu \rangle = \langle \mu_p + \mu_n \rangle$  es la suma promedio espacialmente de la movilidad de electrones y huecos, y  $\langle \epsilon \rangle$  es la constante dieléctrica promediada espacialmente [14],  $n_{int} = N_c \exp(-E_{gap}/2V_t)$ .

$$U(x) = PG - (1 - P)R \quad (2.20)$$

Donde  $G$  es la razón de generación de excitones dada por la ecuación (1.14),  $P$  es la probabilidad de disociación de electrón-hueco integrada sobre sobre la distribución de distancias de separación dada por la ecuación (1.21), con  $f(a, x)$  con una función de distribución normalizada dada por la ecuación (1.22) y  $p(x, T, F)$  es la probabilidad de disociación de electrón-hueco, para una cierta distancia de par electrón-hueco  $x$  dada por la ecuación (1.23) [22]

$$P(a, T, F) = \int_0^{\infty} p(x, T, F) f(a, x) dx \quad (1.21)$$

$$f(a, x) = \frac{4}{\sqrt{\pi}a^3} x^2 e^{-x^2/a^2} \quad (1.22)$$

$$p(x, T, F) = \frac{k_{diss}(x, T, F)}{k_{diss}(x, T, F) + k_f(T)} \quad (1.23)$$

En las ecuaciones anteriores,  $p(x, T, F)$  depende de la temperatura y el campo eléctrico  $F$ .  $k_f$  Es la razón de decaimiento del enlace electrón-hueco al estado base y  $k_{diss}$  es la razón de disociación dada por la ecuación (1.24)

$$k_{diss}(x, T, F) = \frac{3\gamma}{4\pi a^3} e^{-E_B/k_B T} \left( \frac{J_1(2 - \sqrt{-2b})}{\sqrt{-2b}} \right) \quad (1.24)$$

Donde  $E_B$  es la energía del enlace del par electrón-hueco y  $b = q^3 F / (8\pi \epsilon k_B^2 T^2)$  es el parámetro de campo y  $J_1$  es la función de Bessel de primer orden, teniendo la siguiente expresión

$$\frac{J_1(2 - \sqrt{-2b})}{\sqrt{-2b}} = \sum_{w=1}^{\infty} \frac{(2b)^w}{w! (w+1)!} \quad (1.25)$$

Resultando

$$k_{diss}(x, T, F) = \frac{3\gamma}{4\pi a^3} e^{-E_B/k_B T} (1 + b + b^2/3 + b^3/18 + b^4/180 + \dots) \quad (1.26)$$

## 1.8 Parámetros de un dispositivo fotovoltaico

### 1.8.1 Parámetros que caracterizan un dispositivo fotovoltaico

Para determinar la eficiencia de conversión de potencia (power conversion efficiency, PCE o ECE o  $\eta$ ) asociada al desempeño de un dispositivo fotovoltaico, se requiere caracterizar el dispositivo sin iluminación y bajo iluminación de donde se obtiene una curva  $JV$  la cual muestra la relación entre la densidad de corriente ( $J$ ) y voltaje ( $V$ ) generados por el dispositivo. La Figura 1.10 muestra un ejemplo de la curva  $JV$ , en esta curva es de especial importancia las intersecciones con los ejes horizontal y vertical dado que los valores de intersección se utilizan para encontrar la densidad de corriente en corto circuito (short circuit current density,  $J_{sc}$ ) y el voltaje a circuito abierto (open circuit voltage,  $V_{oc}$ ). La  $J_{sc}$  es extraída si ambos electrodos (ánodo-cátodo) están unidos (en corto circuito), el  $V_{oc}$  si los electrodos no están conectados a la carga o resistencia. La densidad de potencia (power density,  $P$ ) es el producto de  $J$  y  $V$  en cada punto de la curva, de los puntos de máxima  $J$  y máxima  $P$  se puede obtener la máxima potencia  $P_{max}$  tal como se representa en la ecuación (1.27). Al mismo tiempo esta potencia representa una forma de comparar el desempeño entre diferentes dispositivos.

$$P_{max} = J_{max} V_{max} \quad (1.27)$$

El factor de llenado (fill factor,  $FF$ ) está dado por el cociente de la potencia máxima entre el producto del voltaje de circuito abierto y la densidad de corto circuito tal como se representa en la ecuación (1.28). Este factor representa la “cuadratura” del PVD en la curva  $J$ - $V$

$$FF = P_{max} / (V_{oc} J_{sc}) \quad (1.28)$$

Con lo cual se puede reescribir  $P_{max} = FF V_{oc} J_{sc}$

La PCE es el cociente entre la  $P_{max}$  y potencia incidente (incident optical power density,  $P_i$ ) sobre el PVD, la cual es  $100 \text{ mW/cm}^2$  que corresponde a un nivel de iluminación de un sol en la tierra (AM 1.5) a  $25^\circ \text{ C}$  de temperatura, mide la conversión de potencia de incidencia de flujo incidente sobre un dispositivo (incidencia de potencia solar por área), esto es, la eficiencia de cada fotón a corriente para todos los fotones incidiendo sobre la superficie. La ecuación (1.29) se utiliza para encontrar la PCE.

$$PCE = P_{max} / P_i = (J_{max} V_{max}) / P_i = (FF V_{oc} J_{sc}) / P_i \quad (1.29)$$

La  $J_{sc}$  está directamente relacionada con la eficiencia con la absorción de la luz, la generación y la disociación de excitones, el transporte de carga y la colección de carga en los electrodos.  $V_{oc}$  está relacionado con la diferencia entre el nivel LUMO del aceptor y HOMO del donador en la BHJ.

La fotocorriente en dispositivos fotovoltaicos orgánicos generalmente no es constante, sino dependiente de voltaje, la fotocorriente alcanza la saturación no necesariamente bajo condiciones de corto circuito, pero el sesgo de voltaje negativo. Esto reduce también el factor de llenado y, finalmente, la eficiencia del PVD.

La eficiencia cuántica externa (EQE o IPCE) es una medida de la eficiencia de conversión de cada fotón a electrón para una particular longitud de onda en particular.

$$IPCE \text{ ó } EQE = h c J_{sc} / \lambda_i P_i = (1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}) * J_{sc} / \lambda_i P_i \quad (1.30)$$

Donde  $h = 4.1357 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$ ,  $c = (3 \times 10^8 \text{ m/s})$ ,  $P_i = 100 \text{ mW/cm}^2$ , también EQE es el número de electrones recolectados sobre el número de fotones incidentes ( $n_e/n_{ph}$ ).

La eficiencia cuántica interna (IQE) es el número de electrones recolectados entre número de fotones absorbidos en la capa activa, relacionando la EQE y IQE tenemos la ecuación (1.31) [16].

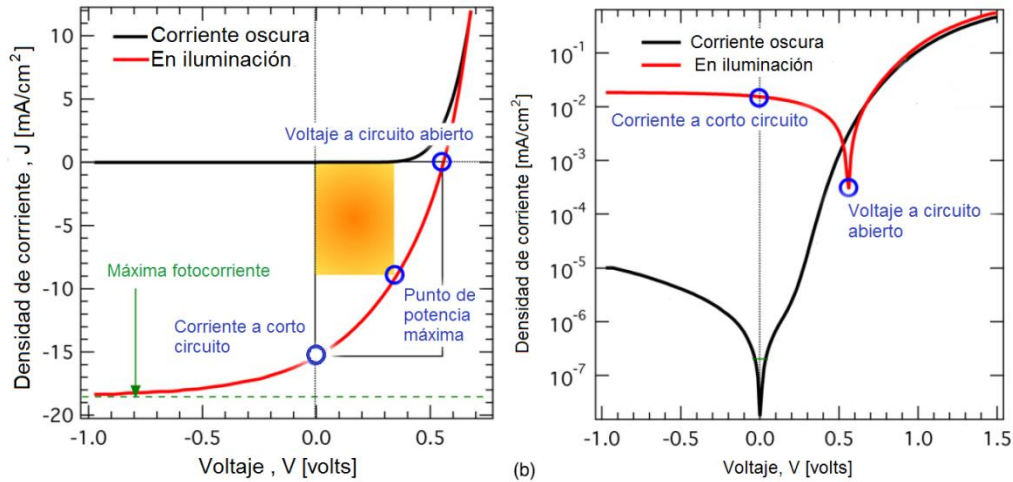


Figura 1.10 Gráficas características de corriente-voltaje de las celdas solares de BHJ en (a) lineal y (b) la representación semilogarítmica.

$$\begin{aligned}
 IQE(\lambda) &= \frac{\text{número de electrones recolectados}}{\text{número de fotones absorbidos en la capa activa}} \\
 &= \left( \frac{\text{número de electrones recolectados}}{\text{número de fotones incidentes}} \right) \left( \frac{\text{número de fotones incidentes}}{\text{número de fotones absorbidos en la capa activa}} \right) \quad (1.31) \\
 &= \frac{EQE(\lambda)}{Abs_{ca}(\lambda)}
 \end{aligned}$$

Dicho en otras palabras IQE indica la fracción de fotones absorbidos que son convertidos en electrones en el dispositivo, EQE indica la fracción de fotones incidentes que son convertidos en electrones en el dispositivo, IQE es mayor que EQE para un dispositivo debido a que la absorción en la capa activa resulta  $Abs_{ca} = A = 1 - R < 1$ .

Informes cualitativos que analizan ambas estructuras (OPV y IOPV) indican que el número de fotones absorbidos en la capa activa y el aumento de la eficiencia cuántica externa aumenta con el aumento del espesor de la capa activa como resultado de un comportamiento de interferencia en ambas estructuras [17, 18]. Sin embargo, IOPV exhiben un mejor rendimiento, a excepción de los espesores cercanos en los cuales obtienen los máximos de interferencia de OPV [19]. Por otro lado, los informes cuantitativos establece que dispositivos con estructura IOPV muestran una PCE de 9.15%, junto con  $J_{sc}$  de  $17.2 \text{ mAcm}^{-2}$ ,  $V_{oc}$  de 0.74V, y FF de 72% [20,21], mientras que los dispositivos con una estructura OPV presentan una  $J_{sc}$  mucho menor de  $15.4 \text{ mAcm}^{-2}$  [22]. Hay dos razones principales para el aumento significativo de  $J_{sc}$ , y por lo tanto el PCE, de la IOPV: contacto óhmico para la recolección de portadores de carga foto generada (debido al cambio de nivel de vacío de ITO) y la recolección óptima de fotón en la capa activa orgánica [23]. En este trabajo de tesis se calculan las curvas JV, los parámetros  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ ,  $J_{max}$ ,  $P_{max}$ , and FF para analizar el desempeño de ambas estructuras (COPV y IOPV) bajo varios escenarios/ condiciones/ características.

## CAPÍTULO 2.

### JUSTIFICACION Y OBJETIVOS

#### 2.1 Justificación del estudio

El uso de energías renovables como la luz solar y su aprovechamiento, no es una idea novedosa, ya que el ser humano ha hecho uso de ésta desde hace siglos. Sin embargo, es a partir de la década de 1970 que se ha incrementado la investigación y el desarrollo en esta alternativa buscando aumentar la eficiencia y una idealizada convivencia con la naturaleza en una perspectiva de desarrollo sustentable. Si bien este tipo de energía es abundante, universal y con un impacto ambiental bajo, la ingeniería ha encontrado grandes limitantes en su utilización, como es el hecho de su carácter oscilante e intermitente, su dispersión, su baja intensidad, las bajas eficiencias de conversión asociadas a los actuales dispositivos y su complicado almacenamiento. El esfuerzo por lograr un manejo conveniente y un adecuado uso de la energía proveniente del Sol que permita satisfacer los requerimientos de demanda energética, ha impulsado durante los últimos años importantes proyectos de desarrollo científico y técnico. Se han mantenido dos vertientes fundamentales para la utilización del recurso solar: la conversión fototérmica y la fotovoltaica.

La Figura 2, muestra la distribución de irradiación en México [7,8], que es uno de los países con una excepcional recepción de irradiación solar. En especial en el estado de Baja California la ciudad de Mexicali se distingue por ser una de las ciudades del país con más captación de irradiación solar, este hecho la convierte en un laboratorio natural para el estudio, prueba y desarrollo de dispositivos fotovoltaicos. Por tal motivo, el laboratorio de Física Aplicada del Instituto de Ingeniería perteneciente a la Universidad Autónoma de Baja California ubicado en la ciudad de Mexicali se encuentra desarrollando algoritmos de diseño de dispositivos fotovoltaicos con material orgánico e inorgánico. En el estudio del arte realizado en este trabajo se encontraron decenas de artículos referentes a dispositivos fotovoltaicos fabricados con material orgánico PEROVSKITE. Pero el 95% de estos artículos muestran resultados de caracterización de dispositivos fabricados, solo algunos presentan técnicas y procedimientos para modelar y predecir el comportamiento de dispositivos fabricados con este material orgánico. Por este motivo, este trabajo de tesis está focalizado en el desarrollo de una metodología para el análisis y diseño de dispositivos fotovoltaico con capa activa de material orgánico (OPV) y estructura de tipo Vidrio/Ti/PEDOT: PSS/Perovskite/Pt.



Figura 2.1 Irradiación solar en el territorio Mexicano (2300KW/cm<sup>2</sup>)

## 2.2 OBJETIVOS

### 2.2.1 OBJETIVO GENERAL.

El objetivo general de este trabajo de tesis es el desarrollo de una metodología para el análisis y diseño de dispositivos fotovoltaico con estructura Vidrio/Ti/PDOT:PSS/Perovskite/Pt. La metodología será desarrollada considerando los tres procesos básicos de análisis y diseño de dispositivos fotovoltaicos; el cálculo de la tasa de generación de excitones  $G(x)$  utilizando la técnica de la matriz lineal de transferencia óptica en un solo eje, la obtención de las concentraciones de carga  $n(x)$  y  $p(x)$  en la capa activa a través del cálculo de auto consistencia entre la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de cargas (Algoritmo iterativo de Gummel) y la caracterización del desempeño del OPV para una irradiación solar promedio de  $100 \text{ mW/cm}^2$  (estándar AM1.5), mediante el uso de las ecuaciones básicas para dispositivos de unión pn.

### 2.2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.

Para el logro el objetivo general de este trabajo de tesis se plantean los siguientes objetivos específicos:

1. Calcular de manera teórica la tasa de generación de excitones  $G(x)$  en el dispositivo Vidrio/Ti/PDOT:PSS/Perovskite/Pt, utilizando la técnica de la matriz lineal de transferencia óptica en un solo eje.
2. Calcular las concentraciones de carga  $n(x)$  y  $p(x)$  en la capa activa del dispositivo a través del cálculo de auto consistencia entre la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de cargas (algoritmo iterativo de Gummel).
3. Calcular de manera teórica los parámetros que caracterizan el desempeño del dispositivo, para una irradiación solar promedio de  $100 \text{ mW/cm}^2$  (estándar AM 1.5G), mediante el cálculo de la curva de

densidad de corriente-voltaje ( $JV$ ), el voltaje de circuito abierto ( $Voc$ ), la densidad de corriente de corto circuito ( $Jsc$ ), el factor de llenado ( $FF$ ) y la eficiencia de conversión ( $PCE$ ) utilizando las ecuaciones básicas para dispositivos de unión  $pn$ .

4. Realizar una comparación de las características de desempeño (curva  $JV$ , el  $Voc$ , la  $Jsc$ , el  $FF$ , y la  $PCE$ ) obtenidas en el diseño teórico con las obtenidas en las mediciones prácticas reportadas por diferentes autores.

### 2.3 HIPÓTESIS

La técnica de la matriz lineal de transferencia óptica puede ser utilizada para analizar la propagación y disipación del campo eléctrico óptico en un apilado de capas de diferentes materiales, la solución auto consistente entre la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de cargas pueden ser utilizadas para calcular las concentraciones de carga  $n(x)$  y  $p(x)$  en la capa activa (absorbedor de fotones) de estructura multicapa, y las ecuaciones básicas para caracterizar el desempeño de dispositivos de unión  $pn$  pueden ser utilizadas para caracterizar los parámetros que son base para el cálculo de eficiencias de conversión en dispositivos detectores de luz.

Por tal motivo la hipótesis de este trabajo de tesis se establece de la siguiente manera; utilizando la técnica de la matriz lineal de transferencia óptica, la solución auto consistente entre la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de cargas, las ecuaciones básicas para caracterizar el desempeño de dispositivos de unión  $pn$ . Es posible desarrollar una metodología para analizar y diseñar teóricamente dispositivos fotovoltaicos con estructura de tipo Vidrio/Ti/PDOT:PSS/Perovskite/Pt que den una correlación cercana entre las características de desempeño obtenidas en el diseño teórico y las medidas de la implementación prácticas reportada por diferentes autores.

## CAPÍTULO 3

### DESARROLLOS DE METODOLOGIAS Y TECNICAS DE SIMULACIÓN

Uno de los puntos más importantes al realizar el diseño de un dispositivo fotovoltaico es la selección de los materiales. Los materiales seleccionados deben de cumplir con los requisitos de diseño. Dentro de los requisitos de diseño más importantes para la selección de los materiales se encuentra el espectro de irradiación incidente, la potencia promedio incidente, así como la factibilidad de que los materiales seleccionados formen heterouniones de tipo pn. En este trabajo de tesis, se establecieron como requisito de diseño un espectro de irradiación incidente que va de 350nm o 800nm, una potencia promedio incidente de 1000 W/m<sup>2</sup> (estándar AM1.5 Global), así como la formación de heterouniones de tipo pn. La estructura y materiales seleccionados en este trabajo de tesis son de tipo Vidrio/Ti/PDOT:PSS/Perovskite/Pt tal como se muestran en la Figura 3.1.

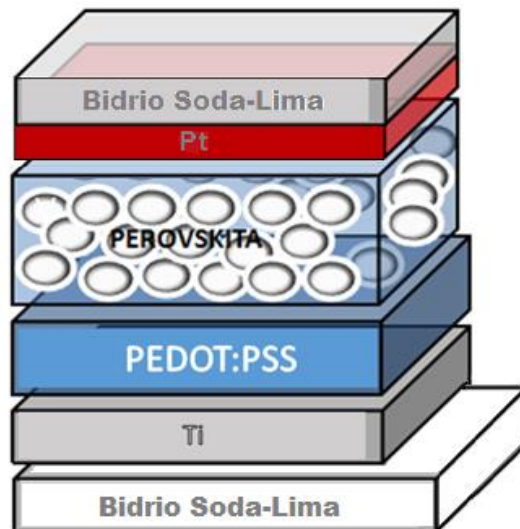


Figura 3.1 Estructura de la celda solar a diseñar.

#### 3.1 Metodología para el análisis y modelado óptico.

Tomando como referencia lo descrito anteriormente, y considerando la estructura del dispositivo a diseñar, Vidrio soda-lima/Ti/PEDOT: PSS/PEROVSKITE/Pt, como un apilado de capas tal como se muestra en la Figura 3.2 se puede asumir que cada una de las capas se encuentra descrita por su índice de refracción complejo,  $\tilde{n}=n + ik$ , donde  $n$  representa al índice de refracción y  $k$  el coeficiente de extinción, donde ambos valores dependen tanto de la longitud de onda ( $\lambda$ ) como el grosor de la capa

(d). De igual manera se puede observar como el campo electromagnético óptico incidente entra por el lado izquierdo de la estructura y viaja a través de la estructura multicapa en dirección del eje x y es reflejada justo en las interfaces dentro del dispositivo formando también ondas electromagnéticas ópticas que viajan en dirección opuesta a la de incidencia.

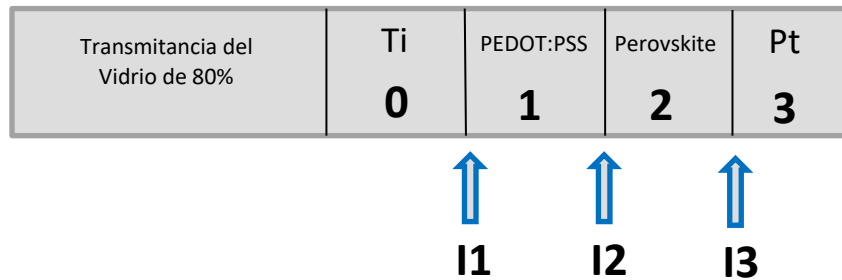


Figura 3.2 Estructura multicapa del dispositivo a diseñar.

### 3.1.1 Cálculo de los coeficientes de transmisión y reflexión en la capa de Perovskite

La capa activa de la estructura a analizar es la capa de Perovskite, por lo que como primer paso del análisis óptico se requiere calcular los coeficientes de transmisión y reflexión en esta capa. Considerando los datos característicos mostrados en la Tabla 3.1 se procede a encontrar los sistemas parciales  $S_j^i$  and  $S_j^{ii}$  descritos por las ecuaciones 1.6 y 1.7 respectivamente. Para esto se requiere previamente encontrar las matrices de interface y las matrices de propagación correspondientes a cada sistema parcial. Asumiremos que el vidrio soda-lima tiene una transmitancia del 80%. Es importante notar que los cálculos aquí presentados son solo para la longitud de onda de 350 nm en la posición  $x = 1$  nm de ancho de la capa activa y que para obtener los perfiles total del campo eléctrico, la disipación del mismo y la generación de excitones es necesario calcular para todo el espectro de análisis (de 350nm a 800nm) y todo el ancho de la capa activa.

Tabla 3.1. Valores para Inicio de cálculo de  $G(x)$ .

Variable		
Ti	$\tilde{n}=1.380+j2.43$	d=100 nm
PEDOT:PSS	$\tilde{n}=1.40+j0$	d=200 nm
PEROVSKITE	$\tilde{n}=1.71+j1.15$	d=300 nm
Pt	$\tilde{n}=1.54+j3.06$	d=500 nm
$\lambda$	350 nm	
$x=1$	(350-800)= (1-46)	
$I_c=E_o$	$0.32913 \text{ W m}^{-2} \text{ nm}^{-1}$	

Obtención de la matriz de **interface 1** para la interface entre los materiales **Ti/PEDOT:PSS**

$$\tilde{n}_1=1.380+j2.43, \tilde{n}_2=1.40+j0$$

$$r_{ij} = \frac{(1.40+j0)-(1.380+j2.43)}{(1.40+j0)+(1.380+j2.43)} = -0.4290 - 0.4991i$$

$$t_{ij} = 0.5710 - 0.4991i$$

$$I_1 = \frac{1}{0.5710 - 0.4991i} \begin{bmatrix} 1 & -0.4290 - 0.4991i \\ -0.4290 - 0.4991i & 1 \end{bmatrix}$$

$$I_1 = \begin{bmatrix} 0.9929 + 0.8679i & 0.0071 - 0.8679i \\ 0.0071 - 0.8679i & 0.9929 + 0.8679i \end{bmatrix}$$

Obtención de la matriz de **interface 2** para la interface entre los materiales **PEDOR:PSS/Perovskite**

$$\tilde{n}_1=1.40+j0, \tilde{n}_2=1.71+j1.15$$

$$r_{ij} = \frac{(1.71 + j1.15) - (1.40 + j0)}{(1.71 + j1.15) + (1.40 + j0)} = 0.2080 + j0.2929$$

$$t_{ij} = 1.2080 + j0.2929$$

$$I_2 = \frac{1}{1.2080 + j0.2929} \begin{bmatrix} 1 & 0.2080 + j0.2929 \\ 0.2080 + j0.2929 & 1 \end{bmatrix}$$

$$I_2 = \begin{bmatrix} 0.7819 - j0.1896 & 0.2181 + j0.1896 \\ 0.2181 + j0.1896 & 0.7819 - j0.1896 \end{bmatrix}$$

Obtención de la matriz de **interface 3** para la interface entre los materiales **Perovskite/Pt**

$$\tilde{n}_1=1.71+j1.15, \tilde{n}_2=1.54+j3.06$$

$$r_{ij} = \frac{(1.54 + j3.06) - (1.71 + j1.15)}{(1.54 + j3.06) + (1.71 + j3.06)} = 0.2647 + j0.2448$$

$$t_{ij} = 1.2647 + j0.2448$$

$$I_3 = \frac{1}{1.2647 + j0.2448} \begin{bmatrix} 1 & 0.2647 + j0.2448 \\ 0.2647 + j0.2448 & 1 \end{bmatrix}$$

$$I_3 = \begin{bmatrix} 0.7621 - j0.1475 & 0.2379 + j0.1475 \\ 0.2379 + j0.1475 & 0.7621 - j0.1475 \end{bmatrix}$$

Obtención de la matriz de **propagación (Ti)**

$$\tilde{n}_1=1.380+j2.43$$

$$\beta_j = \frac{2\pi d}{\lambda} n_j \cos\theta_i$$

$$e^{jx} = \cos(x) + j\text{sen}(x)$$

$$\beta_j = \frac{2\pi(200)}{350}(1.380 + j2.43) \cos(0) \left(\frac{\pi}{180}\right) = 0.0865 + j0.1523$$

$$P_1 = \begin{bmatrix} e^{j(0.0865+j0.1523)} & 0 \\ 0 & e^{-j(0.0865+j0.1523)} \end{bmatrix}$$

$$e^{j(0.0865+j0.1523)} = e^{-0.1523}(\cos(0.0865) + j\sin(0.0865))$$

$$e^{j(0.0865+j0.1523)} = 0.8555 + j0.0742$$

$$e^{-j(0.0865+j0.1523)} = e^{0.1523}(\cos(0.0865) - j\sin(0.0865))$$

$$e^{-j(0.0865+j0.1523)} = 1.1643 - j0.1006$$

$$P_1 = \begin{bmatrix} 0.8555 + j0.0742 & 0 \\ 0 & 1.1602 - j0.1006 \end{bmatrix}$$

Obtención de la matriz de **propagación (PEDOT:PSS)**

$$\tilde{n}=1.40+j0$$

$$\beta_j = \frac{2\pi(300)}{350}(1.40 + j0) \cos(0) \left(\frac{\pi}{180}\right) = 0.1315 + j0$$

$$P_2 = \begin{bmatrix} e^{j(0.1315+j0)} & 0 \\ 0 & e^{-j(0.1315+j0)} \end{bmatrix}$$

$$e^{j(0.1315+j0)} = 0.9914+j0.1311$$

$$e^{-j(0.1315+j0)} = e^0(\cos 0.1315 - j\sin 0.1315)$$

$$e^{-j(0.1315+j0)} = 0.9914 - j0.1311$$

$$P_2 = \begin{bmatrix} 0.9914 + j0.1311 & 0 \\ 0 & 0.9914 - j0.1311 \end{bmatrix}$$

Obtención de la matriz de **propagación (PT)**

$$\tilde{n}=1.54+j3.06$$

$$\beta_j = \frac{2\pi(500)}{350}(1.54 + j3.06) \cos(0) \left(\frac{\pi}{180}\right) = 0.24125 + j0.47938$$

$$e^{j(0.24125+j0.47938)} = e^{-0.47938}(\cos 0.24125 + j\sin 0.24125)$$

$$e^{j(0.24125+j0.47938)} = 0.6012 + j0.1479$$

$$e^{-j(0.24125+j0.47938)} = e^{0.47938}(\cos 0.24125 - j\sin 0.24125)$$

$$e^{-j(0.24125+j0.47938)} = 1.5682 - j0.3858$$

$$P_3 = \begin{bmatrix} 0.6012 + j0.1479 & 0 \\ 0 & 1.5682 - j0.3858 \end{bmatrix}$$

Obtención de las matrices correspondientes a cada sistema parcial  $S_j'$  and  $S_j''$  descritos por las ecuaciones 1.6 y 1.7 respectivamente, que representaremos como  $M_j'$  y  $M_j''$  respectivamente

$$M'_j = P_1 I_1 P_2 I_2$$

$$M'_j = \begin{bmatrix} 0.8555 + j0.0742 & 0 \\ 0 & 1.1602 - j0.1006 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 0.9929 + j0.8679 & 0.0071 - j0.8679 \\ 0.0071 - j0.8679 & 0.9929 + j0.8679 \end{bmatrix}$$

$$* \begin{bmatrix} 0.9914 + j0.1311 & 0 \\ 0 & 0.9914 - j0.1311 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 0.7819 - j0.1896 & 0.2181 + j0.1896 \\ 0.2181 + j0.1896 & 0.7819 - j0.1896 \end{bmatrix}$$

$$M'_j = \begin{bmatrix} 0.8329 + j0.4182 & -0.1892 - j0.2509 \\ 0.0051 - j0.3832 & 1.3962 + j0.1105 \end{bmatrix}$$

$$M''_j = I_3 P_3$$

$$M''_j = \begin{bmatrix} 0.7621 - j0.1475 & 0.2379 + j0.1475 \\ 0.2379 + j0.1475 & 0.7621 - j0.1475 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 0.6012 + j0.1479 & 0 \\ 0 & 1.5682 - j0.3858 \end{bmatrix}$$

$$M''_j = \begin{bmatrix} 0.4800 + j0.0241 & 0.4300 + j0.13 \\ 0.1212 + j0.1239 & 1.1383 - j0.5254 \end{bmatrix}$$

Dado que la capa activa en la estructura a analizar es la capa de Perovskite, se obtienen los coeficientes de reflexión y transmisión de esta capa utilizando las ecuaciones (3.1), (3.2), (3.3) y (3.4)

$$t'_j = \frac{1}{M'_{j11}} \quad (3.1)$$

$$r'_j = -\frac{M'_{j12}}{M'_{j11}} \quad (3.2)$$

$$r''_j = -\frac{M''_{j21}}{M''_{j11}} \quad (3.3)$$

$$t_j^+ = \frac{t'_j}{1 - r'_{j-} * r''_{j+} * e^{j2\xi_j d_j}} \quad (3.4)$$

$$t'_j = \frac{1}{(0.8329 + j0.4182)} = 0.9589 - j0.4815$$

$$r'_{j-} = -\frac{(0.4300 + j0.13)}{(0.8329 + j0.4182)} = 0.3022 + j0.1495$$

$$r''_{j+} = \frac{(0.1212 + j0.1239)}{(0.4800 + j0.0241)} = 0.2647 + j0.2448$$

$$\xi = bj = \frac{2\pi}{\lambda} n_j$$

$$\xi_j = \frac{2\pi(1.71 + j1.15)}{350} \left( \frac{\pi}{180} \right) = 0.0005357 + j0.0003602$$

Para  $d = 1$

$$e^{j2\xi_j d_j} = e^{j(2*(0.0005357 + j0.0003602)*1)}$$

$$e^{j(0.001071 + j0.007204)} = e^{-0.007204} (\cos 0.001071 + \text{sen} 0.001071)$$

$$e^{j(0.001071 + j0.007204)} = e^{-0.007204} (0.9999 + j0.0011)$$

$$e^{j(0.001071+j0.007204)} = 0.9927 + j0.001092$$

$$t_j^+ = \frac{t_j'}{1 - r_{j-}' * r_{j-}'' * e^{j2\xi_j d_j}}$$

$$t_j^+ = \frac{0.9589 - j0.4815}{1 - [(0.3022 + j0.1495)(0.2647 + j0.2448)(0.9927 - j0.001092)]}$$

$$t_j^+ = 1.0472 - j0.3790$$

### 3.1.2 Cálculo del campo eléctrico en la capa de Perovskite

Una vez obtenidas los coeficientes de reflexión y transmisión de la capa activa, como paso dos se obtiene el campo eléctrico en la capa de Perovskite. El cálculo en este ejemplo se realizará para la longitud de onda de 350 nm en la posición  $x = 1$  nm del ancho de la capa activa. Recordemos que los perfiles totales del campo eléctrico en la capa activa se obtienen realizando el cálculo para todo el espectro de análisis (de 350nm a 800nm) en todo el ancho de la capa activa utilizando la ecuación (1.10).

$$E_j(x) = E_j^+(x) + E_j^-(x) = t_j^+ \left[ e^{i \xi_j x} + r_j'' e^{i \xi_j (2d_j - x)} \right] E_0^+$$

$$E_j(x) = (1.0472 - j0.3790) \left[ e^{j(0.9927 - j0.001092) * 1} + (0.2647 + j0.2448) e^{j(0.9927 + j0.001092)(2 * 1 - 1)} \right] (0.32913)(0.8)$$

$$E_j(x) = (1.0472 - j0.3790) \left[ e^{(0.9927 - j0.001092)j} + (0.2647 + j0.2448) e^0 \right] (0.32913)(0.8)$$

$$e^{(0.9927 + j0.001092)} = e^{0.001092} (\cos 0.9927 + j \sin 0.9927)$$

$$e^{(-0.001092 + j0.9927)} = e^{0.001092} (0.5464 + j0.8375)$$

$$e^{(-0.001092 + j0.9927)} = 0.5464 + j0.8375$$

$$e^{(-0.001092 + j0.9927)(2 * 0)} = e^0$$

$$e^{(-0.001092 + j0.9927)} = 1$$

$$E_j(x) = abs (1.0472 - j0.3790) [(0.5464 + j0.8375) + (0.2647 + j0.2448)(1)] (0.32913) * (0.8)$$

$$E_j(x) = abs (0.3317 + j0.2175)$$

$$E_j(x) = \sqrt{0.3317^2 + j0.2175^2}$$

$$E_j(x) = \sqrt{0.1100 - 0.0473}$$

$$E_j(x) = 0.3966 E(V / m^2)$$

### 3.1.3 Cálculo de la disipación del campo eléctrico en la capa de Perovskite

Obtenido el campo eléctrico se procede a obtener la disipación de este para la longitud de onda de 350 nm en la posición  $x = 1$  nm de ancho de la capa activa utilizando la ecuación (1.12)

$$Q_j(x, \lambda) = \frac{1}{2} c \varepsilon_0 \alpha_j \bar{n}_j |E_j(x)|^2$$

$$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

$$\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$$

$$\alpha_j = \frac{4\pi k}{\lambda}$$

$$\alpha_j = \frac{4\pi(1.15)}{350} = 0.0412$$

$$Q_j(z) = \frac{1}{2} (3 \cdot 10^8)(8.85 \cdot 10^{-12})(0.0412)(1.71)(0.3966)^2$$

$$Q_j(z) = 1.4710 \cdot 10^{-5} \text{ W/m}^3$$

### 3.1.4 Cálculo de la tasa de generación de excitones en la capa de Perovskite

Para el cálculo de la tasa de generación de excitones se utiliza la ecuación (1.12), con  $Q_j$  dividiendo sobre la energía del fotón  $1/hc$  por longitud de onda  $\lambda$ , e integrando sobre el espectro de Incidencia de 350 nm a 800 nm que representa los 46 espectros analizados, se asumió una eficiencia de conversión fotón-excitón igual a 1 (esto quiere decir que por cada fotón captado en la superficie del dispositivo se crea un excitón en el sustrato de la capa activa), para la longitud de onda de 350 nm resulta.

$$G(x) = \eta \int_{350}^{800} \frac{\lambda}{hc} Q(x, \lambda) d\lambda$$

$$h = 6.62606952 \cdot 10^{-34} \text{ J/s}$$

$$G(x) = \frac{350(0.00001471)}{(6.62606952 \cdot 10^{-34})} (3e8)(0.0025)$$

$$G(x) = 5.8849 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$$

El valor de  $G(x) = 5.8849 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ , representa la generación de excitones en la posición  $x = 1$  por del campo eléctrico incidente en la longitud de onda de 350 nm. La tasa tota de generación de excitones se obtiene evaluado la ecuación (1.12) de 350 a 800 nm. La Figura 3.3 muestra el perfil de  $G(x)$  nanómetro por nanómetro en una capa activa de 1000 nm de ancho. Un resumen de los valores obtenidos se encuentra en la Tabla 3.2.

$$G_{jT} = 1.2936 * 10^{25} m^{-3} s^{-1}$$

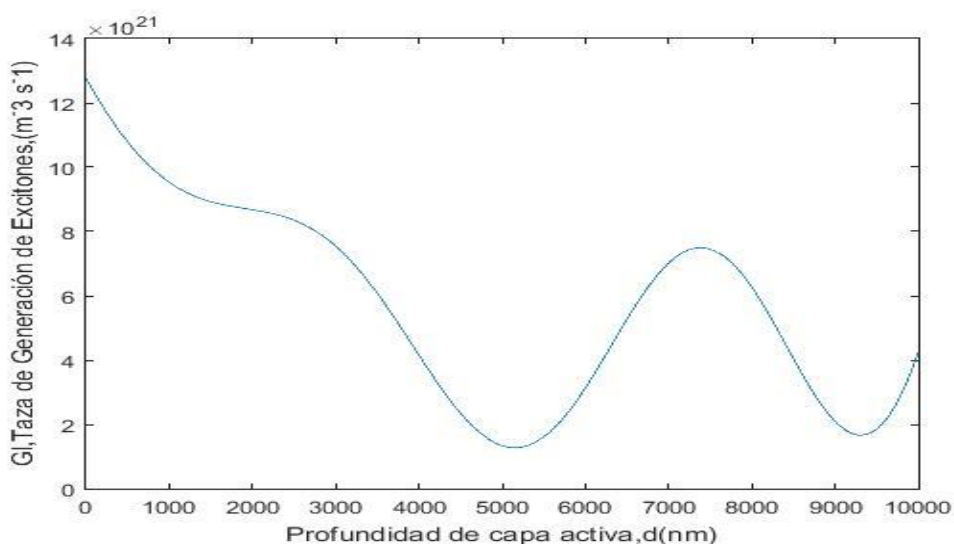


Figura 3.3 Taza de generación excitones en capa activa PEROVSKITE  $\lambda=350$  a  $800$  nm.

Tabla 3.2. Valores calculados de Propagación.

VARIABLE o ELEMENTO	VALOR SIGNIFICATIVO
Generación par excitón de 1 valor unitario $\lambda=350$ nm, $G(x)$	$5.8849 \text{ e}19 \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$
Generación par excitón para $10000$ nm $\lambda=350$ a $800$ nm, $G_{jT}$	$1.2936 \text{ e}25 \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$
Energía disipada de 1 valor unitario $\lambda=350$ , $Q_{jZ}$	$1.4710 \text{ e}-5 \text{ W m}^{-3}$
Campo Eléctrico propagado de 1 valor unitario $\lambda=350$ nm.	$0.3966 \text{ eV m}^{-2}$

### 3.2 Metodología para el análisis y modelado eléctrico.

Consiste en el cálculo del potencial electrostático ( $V_{\text{poisson}}$ ), las concentraciones de carga  $n(x)$  y  $p(x)$  y el dimensionamiento de la zona de agotamiento formada por la unión pn de los materiales del dispositivo fotovoltaico. La solución debe satisfacer simultáneamente las ecuaciones de continuidad de cargas y la ecuación de Poisson. Para este propósito se utiliza el algoritmo iterativo de Gummel. La Figura 3.4 muestra la secuencia iterativa implementada para satisfacer el algoritmo de Gummel. Las tablas 3.3 y 3.4 contienen los parámetros fundamentales del PEDOT:PSS/PEROVSKITE así como los valores de las constantes utilizadas en los cálculos respectivamente.

#### 3.2.1 Implementación del algoritmo de Gummel.

Para iniciar la ejecución del algoritmo de la figura 3.4 se propone un valor inicial para el potencial de contacto de Poisson ( $V_{\text{poisson}}$ ) y se procede con el cálculo de las longitudes de difusión de cargas minoritarias hasta ejecutarlo completamente. Este algoritmo se cicla iterando hasta que se satisfacen dos condiciones; la primera que la diferencia entre el  $V_{\text{poisson}}$  de la iteración actual y el  $V_{\text{poisson}}$  de una

iteración anterior sea menor a un umbral previamente preestablecido, y la segunda que la suma de los valores absolutos de las diferencias de las concentraciones de cargas de la iteración actual y una anterior dividida sobre la suma de las concentraciones de cargas encontradas en la iteración actual sea menor a un umbral preestablecido.

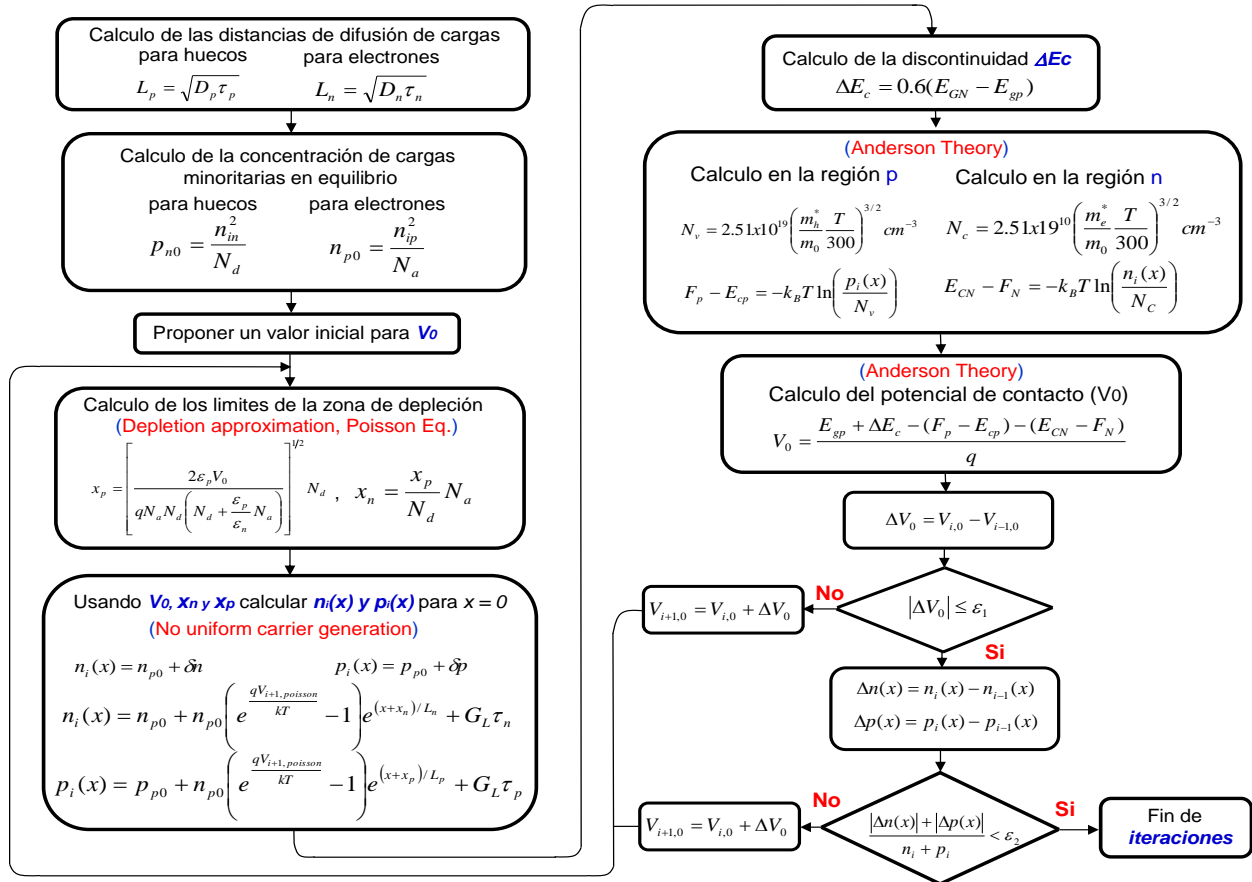


Figura 3.4 secuencia iterativa implementada para satisfacer el algoritmo de Gummel.

Tabla 3.3 Parámetros fundamentales del PEDOT:PSS/PEROVSKITE

Datos	PEDOT:PSS (P)	PEROVSKITE (n)	Unidades
Band gab	1.8	1.5	eV
Masa de electrón e-/h+	mn/mh	0.32	mo
Constante Dieléctrica	$\epsilon_p/\epsilon_n$	1.7758	F/cm
Concentración Intrínseca	pi/ni	3e14	cm <sup>-3</sup>
Movilidad e-/h+	$\mu_p/\mu_n$	1432	cm <sup>2</sup> /Vs
Coefficiente Difusión	$D_p/D_n$	37.088	cm <sup>2</sup> /s
Tiempo de vida e-/h+	tp/tn	2.222e-10	s

Tabla 3.4 Constantes utilizadas en los cálculos.

Variabes Constantes	Valor y Unidades
GL	1.2936 e25 m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup>
G(x)	5.8849e19 m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup>
ε <sub>o</sub>	8.854e-14 C <sup>2</sup> /Ncm <sup>2</sup>
q	1.6e-19 C
eV	1.602e-19
h	6.58118e-16 eV s
KB	8.617e-5 eV
m <sub>o</sub>	9.1e-31 Kg

Para demostrar la ejecución del algoritmo de la Figura 3.4, a continuación se muestran los cálculos y resultados de la primera iteración. La Figura 3.5 muestra el diagrama energético de los materiales que forman la unión PEDOT: PSS y PEROVSKITE.

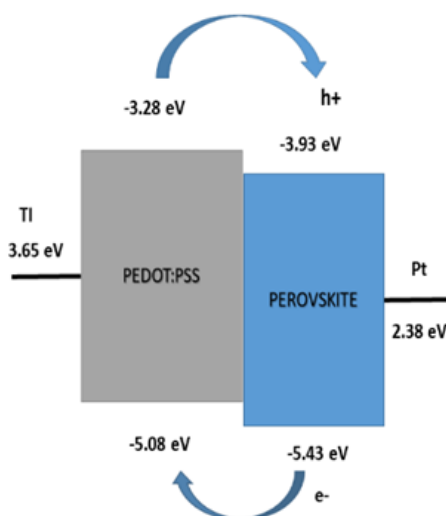


Figura 3.5 Diagrama energético PEDOT: PSS/PEROVSKITE.

Obtención de las distancias de difusión de cargas  $L_p$  y  $L_n$

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \qquad L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$$

$$L_n = \sqrt{(1.33e-5)(4.81e-6)} \qquad L_p = \sqrt{(37.088)(2.222e-10)}$$

$$L_n = 7.9983 e-6 \text{ cm} \qquad L_p = 9.0779 e-5 \text{ cm}$$

Obtención de las concentraciones de cargas minoritarias en equilibrio

$$n_{po} = \frac{n_{ip}^2}{Na} = \frac{(5 \cdot 10^{10})^2}{1.5 \cdot 10^{14}} = \frac{2.5 \cdot 10^{21}}{1.5 \cdot 10^{14}} = 1.666 \cdot 10^7$$

$$p_{no} = \frac{n_{in}^2}{Nd} = \frac{(3 \cdot 10^{14})^2}{5.2 \cdot 10^{12}} = \frac{9 \cdot 10^{28}}{5.2 \cdot 10^{12}} = 1.730 \cdot 10^{16}$$

Se propone un valor inicial para el voltaje de Poisson,  $V_{\text{poisson}} = 0.60$

Con el Valor asignado a  $V_{\text{poisson}}$ , los valores obtenidos de distancias de difusión para electrones ( $L_n$ ) y huecos ( $L_p$ ), y los valores obtenidos para las concentraciones de cargas minoritarias en equilibrio  $n_{p0}$  y  $p_{n0}$  se procede a encontrar la primera iteración del ciclo mostrado en la Figura 3.4, que empieza por encontrar el dimensionamiento de la zona de deplexión, tal como se muestra enseguida

Inicio de la primera iteración del ciclo:

Obtención de los límites de la zona de deplexión

$$x_p = \left[ \frac{2\varepsilon_p V_0}{qN_a N_d \left( N_d + \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_N} N_a \right)} \right]^{1/2} N_d$$

$$x_p = \left[ \frac{(2)(3)(8.854 * 10^{-14})(600 * 10^{-3})}{(1.6 * 10^{-19})(1.5 * 10^{14})(5.2 * 10^{12}) \left( (5.2 * 10^{12}) + \frac{3}{1.7758} (1.5 * 10^{14}) \right)} \right]^{1/2} (5.2 * 10^{12})$$

$$x_p = \left[ \frac{3.18744 * 10^{-13}}{(1.248 * 10^6)(2.58606 * 10^{14})} \right]^{1/2} (5.2 * 10^{12}) = \left[ \frac{3.18744 * 10^{-13}}{3.227414 * 10^{20}} \right]^{1/2} (5.2 * 10^{12})$$

$$x_p = [9.876142 * 10^{-34}]^{1/2} (5.2 * 10^{12}) = 1.63416 * 10^{-4} \text{ cm}$$

$$x_n = \frac{x_p}{N_d} N_a$$

$$x_n = \frac{(1.6341691 * 10^{-5})}{(5.2 * 10^{12})} (1.5 * 10^{14}) = 4.7139494 * 10^{-4} \text{ cm}$$

$$w = x_p + x_n$$

$$w = 1.6341691 * 10^{-5} + 4.7139494 * 10^{-4} = 4.8773663 * 10^{-4} \text{ cm}$$

Obtención de las concentraciones de cargas evaluadas en  $x = 0$

$$P_N(x) = P_{N0} + P_{N0} \left( e^{\frac{qV_0}{kT}} - 1 \right) e^{\frac{-(x-x_p)}{L_p}} + G_L \tau_p$$

$$P_N(x) = (1.730 * 10^{16}) + (1.730 * 10^{16}) \left( e^{\frac{0.600}{0.0259}} - 1 \right) e^{\frac{1.6341691 * 10^{-5}}{9.0779 * 10^{-5}}} + (1.2936 * 10^{25} * 10^{-6})(4.81 * 10^{-6})$$

$$P_N(x) = (1.730 * 10^{16}) + (2.3828785 * 10^{26}) + (6.222216 * 10^{13})$$

$$P_N(x) = 2.382806 * 10^{26} \text{ cm}^{-3}$$

$$n_p(x) = n_{p0} + n_{p0} \left( e^{\frac{qV_0}{kT}} - 1 \right) e^{\frac{(x-x_n)}{L_n}} + G_L \tau_n$$

$$n_p(x) = (1.666 * 10^7) + (1.666 * 10^7) \left( e^{\frac{0.600}{0.0258}} - 1 \right) e^{\frac{-4.87736 * 10^{-4}}{7.9983 * 10^{-6}}} + (1.2936 * 10^{25} * 10^{-6})(2.222 * 10^{-10})$$

$$n_p(x) = (1.666 * 10^7) + (6.299289 * 10^{-10}) + (2.874637920 * 10^9)$$

$$n_p(x) = 2.89129792 * 10^9 \text{ cm}^{-3}$$

Para calcular el potencial electrostático de Poisson (contacto  $V_0$ ) se utilizó la teoría y modelos para análisis de heteroestructuras de Anderson. La Figura 3.6 muestra la secuencia paso a paso implementada para encontrar  $V_0$ .

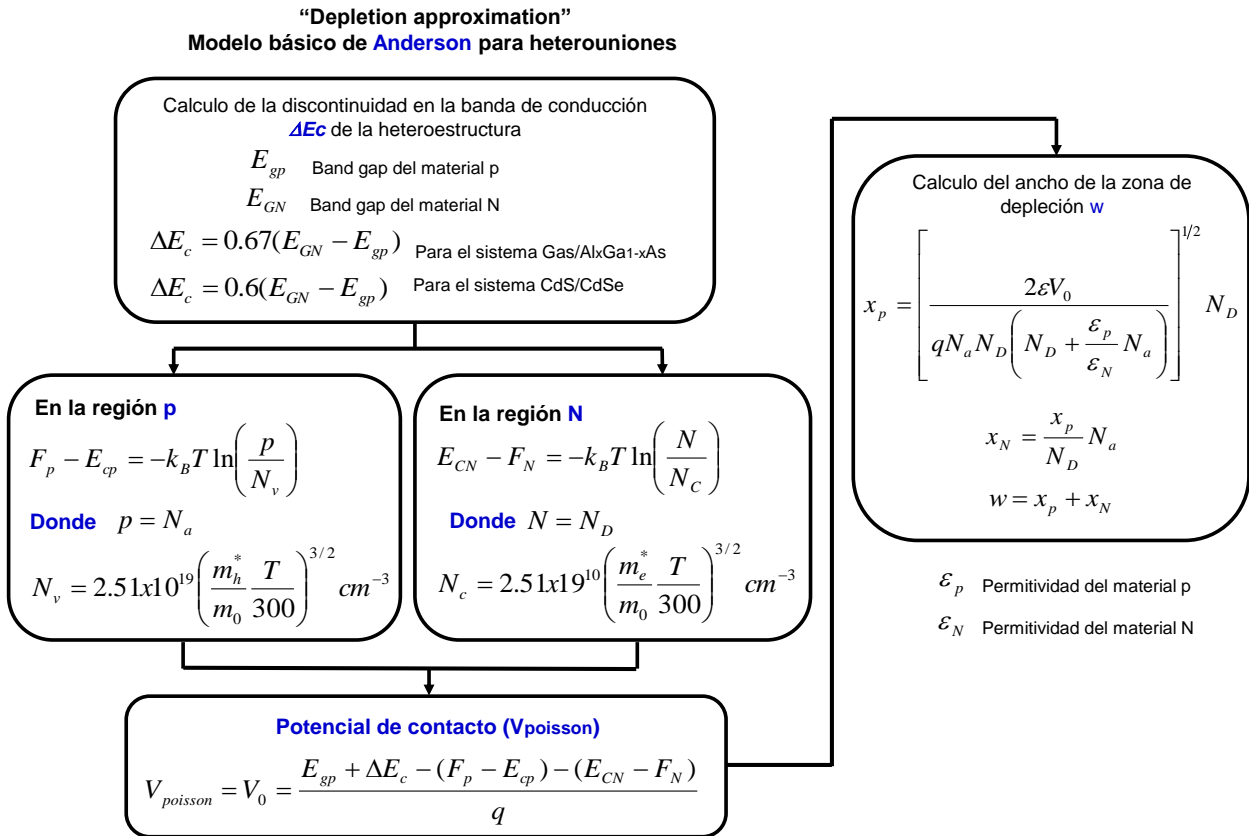


Figura 3.6 muestra la secuencia paso a paso implementada para encontrar  $V_0$ .

Obtención de la discontinuidad  $\Delta E_c$

$$\Delta E_c = 0.6 (E_{GN} - E_{gp})$$

$$\Delta E_c = 0.6(1.5 - 1.8) = -0.180 \text{ eV}$$

Obtención del potencial  $V_0$

$$Nv = 2.51 * 10^{19} \left( \frac{m_h^*}{m_0} * \frac{T}{300} \right)^{3/2}$$

$$N_v = 2.51 * 10^{19} \left( \frac{0.093 * m_o}{m_o} * \frac{300}{300} \right)^{3/2} = 2.51 * 10^{19} (0.093)^{3/2} = 7.11865 * 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

$$F_p - E_{cp} = -k_B T \text{Ln} \left( \frac{p}{N_v} \right)$$

$$F_p - E_{cp} = -(0.0259) \text{Ln} \left( \frac{3.41165 * 10^{25}}{7.11865 * 10^{17}} \right) = -(0.0258) \text{Ln}(47.925519 * 10^6) = -0.45804 \text{ eV}$$

$$N_c = 2.51 * 10^{19} \left( \frac{m_e^*}{m_o} * \frac{T}{300} \right)^{3/2}$$

$$N_c = 2.51 * 10^{19} \left( \frac{0.32 * m_o}{m_o} * \frac{300}{300} \right)^{3/2} = 2.51 * 10^{19} (0.32)^{3/2} = 4.54358 * 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

$$F_{CN} - F_N = -k_B T \text{Ln} \left( \frac{n}{N_c} \right)$$

$$F_{CN} - F_N = -(0.0258) \text{Ln} \left( \frac{1.2733 * 10^{10}}{4.54358 * 10^{18}} \right) = -(0.0259) \text{Ln}(2.80241 * 10^{-9}) = 0.5100 \text{ eV}$$

$$V_0 = [E_{gp} + \Delta E_c - (F_p - E_{cp}) - (F_{CN} - F_N)]/q$$

$$V_0 = \frac{[1.8 + (-0.180) - (-0.45804) - (0.5100)] \text{ eV}}{q} = 1.56799$$

El valor obtenido de  $V_0$  se resta al valor  $V_{\text{poisson}}$  obtenido en la iteración anterior, que es este caso por ser la primera iteración será el valor propuesto al principio de la ejecución del algoritmo iterativo de Gummel. El resultado obtenido de esta diferencia se considera como un incremento en la diferencia de  $V_0$  consecutivos, cuando este diferencial satisface la condición de ser igual o menor a un umbral fijado con anterioridad (0.60) se habrán determinado los valores para concentración de carga en las regiones n y p de la unión pn. Si la condición no se satisface se inicia nuevamente el procedimiento de solución de la ecuación para potencial de contacto.

Obtención de la diferencia  $V_{i+1, \text{poisson}} - V_{i, \text{poisson}}$

$$\Delta V_{\text{poisson}} = V_{i+1, \text{poisson}} - V_{i, \text{poisson}}$$

$$\Delta V_{\text{poisson}} = 1.56799 - 0.600 = 0.967996 \text{ V}$$

Como se muestra en la resta anterior  $|\Delta V_{\text{poisson}}| > 0.60$  no se cumple la condición al ser  $|V_0| \leq 0.60$ , por lo tanto se debe realizar una actualización del valor de  $V_0$  y comenzar la siguiente iteración. Se reinician los cálculos sustituyendo ahora  $V_{\text{poisson}} = V_0 = 0.96799 \text{ V}$ . Hasta que se cumpla la condición  $|\Delta V_{\text{poisson}}| > 0.60$ . Este procedimiento después de un número determinado de iteración cumplió con la condición requerida obteniendo los valores mostrados en la Tabla 3.5.

Tabla 3.5 Resultados obtenidos en la ejecución del algoritmo de Gummel.

Variables Calculadas	Valor Matlab	1er.Cálculo
Ln	7.9983e-06	
Lp	9.0798e-05	
ni	6.222e+13	2.8912e+09
pi	1.7308e+16	2.3828e+26
xn	6.7595e-04	4.7139e-04
xp	2.3433e-05	1.63416e-04
Vpoisson	1.2337	1.5679

### 3.3 Metodología para el análisis y cálculo de las características de desempeño.

Mediante el algoritmo que se muestra en la Figura 3.7 Se efectúan los cálculos para encontrar las características de desempeño del dispositivo diseñado. El conjunto de variables características de desempeño incluye el voltaje de circuito abierto (Voc), la densidad de corriente de circuito abierto (Jsc), la potencia máxima (Pmax), la resistencia a máxima potencia (Rmax), el factor de llenado (FF), y la eficiencia de conversión de potencia ( $\eta$ ).

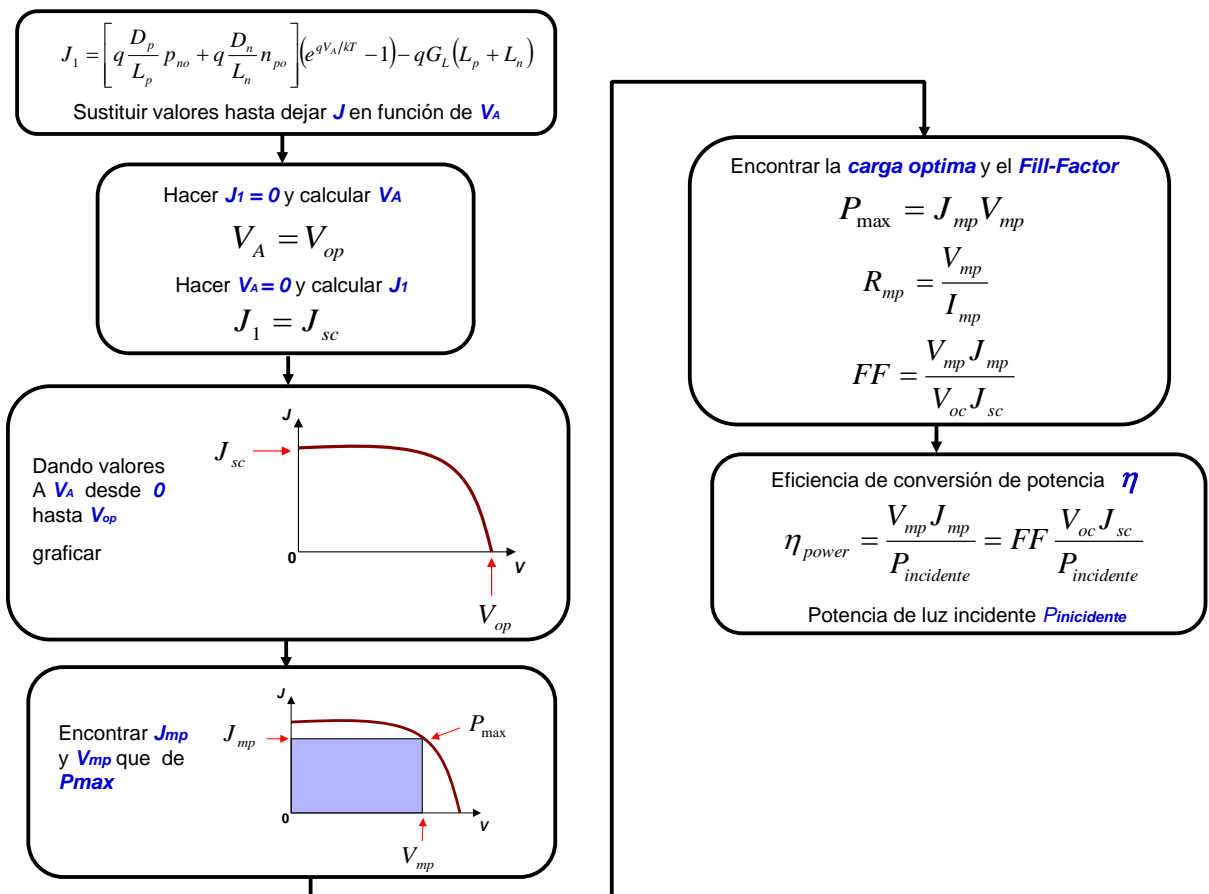


Figura 3.7 pasos para el cálculo de las características de desempeño del dispositivo diseñado.

La tabla 3.6 muestra un resumen de variables fundamentales de los materiales y los parámetros calculados necesarios usando el software matlab, para calcular las características de desempeño del dispositivo diseñado  $\lambda=350$  a  $800$  nm.

Tabla 3.6 Variables fundamentales y parámetros calculados necesarios para calcular las características de desempeño del dispositivo diseñado  $\lambda=350-800$ .

Variable o Parámetros	acumulados
Concentración Intrínseca PEROVSKITE-ni	3e14
Concentración Intrínseca PEDOT:PSS-pi	5e10
Permitividad Perovskite $\epsilon_n$	1.7758
Permitividad PEDOT:PSS $\epsilon_p$	3
masa carga mayoritaria PEDOT:PSS mh	0.093
masa carga mayoritaria PEROVSKITE mn	0.32
Band Gab PEDOT:PSS	1.5
Band Gab PEROVSKITE	1.8
Concentración Dopado PEDOT:PSS Na-P	1.5e14
Coefficiente de Difusión PEDOT:PSS Dn-p	1.33e-5
Tiempo de Vida de e- PEDOT:PSS tn-p	4.81e-6
Concentración Dopado PEROVSKITE Nd-n	5.2e12
Coefficiente de Difusión PEROVSKITE Dp-n	37.088
Tiempo de Vida de h+ PEROVSKITE tp-n	2.2229e-10
Distancia de Difusión PEDOT:PSS Lp	9.0798e-5
Distancia de Difusión PEROVSKITE Ln	7.9983e-6
Zona de Depleción PEDOT:PSS xp	2.3433e-5
Zona de Depleción PEROVSKITE xn	6.7595e-4
Valor de Generación de Exciton GL	1.2936 e25

Obtención del voltaje de circuito abierto  $V_{oc}$

$$n_{po} = \frac{N_a}{n_i p^2}, \quad p_{no} = \frac{N_d}{n_i n^2}$$

$$n_{po} = \frac{1.5 \cdot 10^{14}}{(5 \cdot 10^{10})^2} = 60 \times 10^{-9} \text{ cm}^{-3}$$

$$p_{no} = \frac{5.2 \cdot 10^{12}}{(3 \cdot 10^{14})^2} = 5.777 \times 10^{-17} \text{ cm}^{-3}$$

$$V_{oc} = \frac{kT}{q} \ln \left\{ \frac{q G_L (L_p + L_n)}{q \left[ \frac{D_p}{L_p} (p_{no}) + \frac{D_n}{L_n} (n_{po}) \right]} + 1 \right\}$$

$$V_{oc} = 0.0259 \ln \left\{ \frac{(1.2936 \cdot 10^{25} \cdot 10^{-6})(9.0798 \cdot 10^{-5} + 7.9983 \cdot 10^{-6})}{\left[ \frac{37.088}{9.0798 \cdot 10^{-5}} (5.777 \cdot 10^{-17}) + \frac{1.33 \cdot 10^{-5}}{7.9983 \cdot 10^{-6}} (60 \cdot 10^{-9}) \right]} + 1 \right\}$$

$$V_{oc} = 0.0259 \ln \left\{ \frac{(1.2780289 * 10^{15})}{[(2.3597 * 10^{-11}) + (9.97712 * 10^{-8})] + 1} \right\}$$

$$V_{oc} = 0.0259 \ln \left\{ \frac{(1.2780289 * 10^{15})}{(9.97947 * 10^{-8})} + 1 \right\} = 0.0259 \ln(1.280649 * 10^{22})$$

$$V_{oc} = 0.0259 * 50.9042 = 1.3184V$$

Obtención del voltaje de la densidad de corriente de corta circuito  $J_{sc}$

$$J_{sc} = -qG_L(L_p + L_n)$$

$$J_{sc} = -(1.6 * 10^{-19})(1.2936 * 10^{25} * 10^{-6})(9.0798 * 10^{-5} + 7.9712 * 10^{-6})$$

$$J_{sc} = -2.04485 * 10^{-4} A/cm^2$$

Obtención de la densidad de corriente a máxima potencia  $J_{sc}(V_0)$

Graficando J vs V

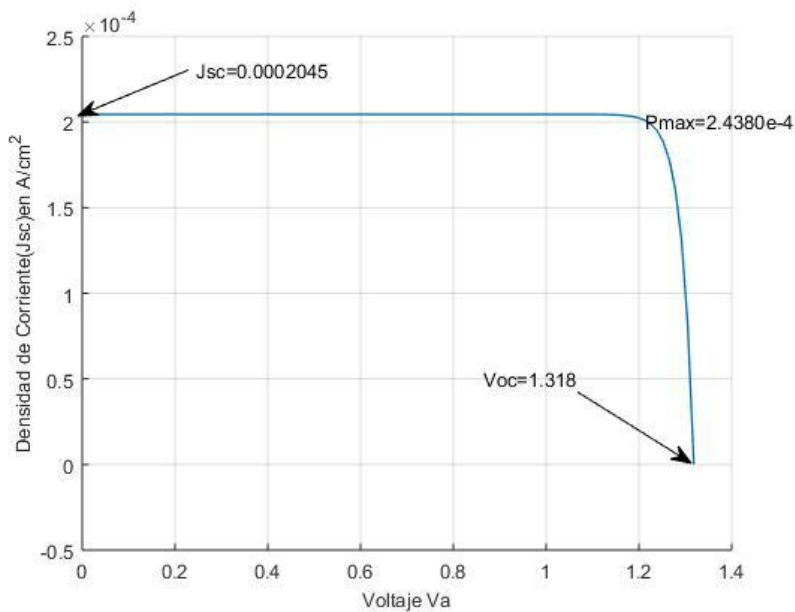


Figura 3.8 Grafica de J vs V, Valores obtenidos con ayuda de matlab.

Obtención del voltaje y densidad de corriente a máxima potencia  $J_{max}$  de la gráfica característica J vs V.

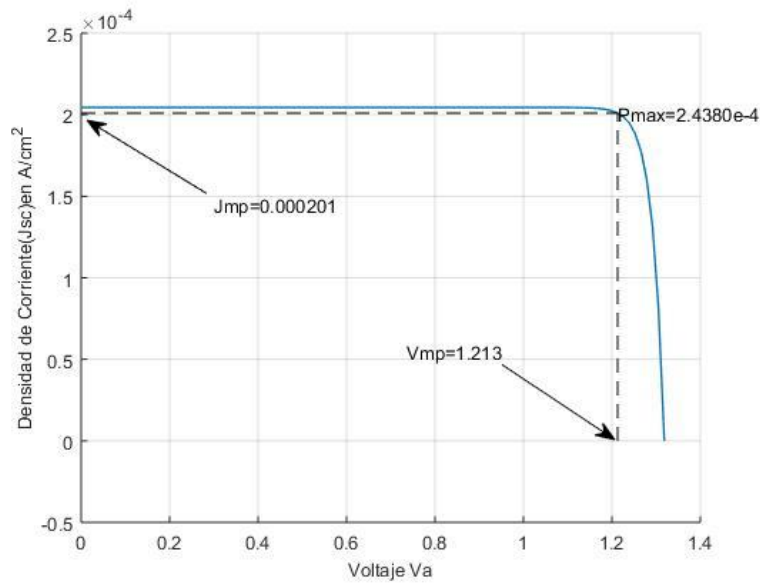


Figura 3.9 Grafica de ubicación de parámetros a máxima potencia con ayuda del programa matlab.

De la figura 3.9 se obtiene los parámetros siguientes

$$V_{max} = 1.213 \text{ V}$$

$$J_{max} = 0.000201 \text{ A/cm}^2$$

Por tanto:

$$P_{max} = J_{max}V_{max}$$

$$P_{max} = (0.000201) * (1.213) = 2.4381 * 10^{-4} \text{ W/cm}^2$$

Obtención del factor de llenado (FF)

$$FF = \frac{V_{max}J_{max}}{V_{oc}J_{sc}}$$

$$FF = \frac{(1.213) * (0.000201)}{(1.3184) * (2.045 * 10^{-4})} = \frac{2.43813 * 10^{-4}}{2.6961 * 10^{-4}} = 0.90431$$

### 3.2.2 Dimensionamiento del dispositivo fotovoltaico diseñado.

Una vez que las características de desempeño son calculadas, se procede a calcular las dimensiones (ancho (W) y largo (L)) del dispositivo diseñado con el cual se puedan realizar conexiones serie y paralelo para satisfacer la demanda requerida de suministrado de corriente. Se desea que le dispositivo sea capaz de suministrar 3 mA y se dispone de una área de fabricación para cada dispositivo individual de 100µm x 100µm. Para dimensionar

se propone un valor para el largo del dispositivo y se encuentra el ancho utilizando la ecuación (1.32), proponiendo valores para x y cuidado que W no exceda del área disponible. Donde x representa el porcentaje de corriente que un solo dispositivo (fotodiodo) proporcionara del total requerido

$$W = \frac{x\%(I_{max})}{L * J_{max}} \quad (1.32)$$

$$I_{max} = 3 \text{ mA} = 0.003 \text{ A}$$

$$J_{max} = 0.000201 \text{ A/cm}^2$$

Debido a que el área disponible para cada dispositivo es de  $100\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$  (W x L), se propone una L =  $100\mu\text{m}$

1er. valor propuesto para x es 50%

$$W = \frac{0.5(0.3)}{(0.01) * 0.000201} = \frac{0.15}{2.01 * 10^{-6}} = 74626.86 \text{ cm} = 7.4626e8 \mu\text{m} \text{ --- Valor muy alto}$$

2do. valor propuesto x es 10%

$$W = \frac{0.1(0.3)}{(0.01) * 0.201 * 10^{-3}} = \frac{0.03}{2.01 * 10^{-6}} = 14.925 * 10^3 \text{ cm} = 1.4925e8 \mu\text{m} \text{ --- Valor muy alto}$$

3er. valor propuesto: 0.00000065%

$$W = \frac{0.00000065(0.3)}{(0.01) * 0.201 * 10^{-3}} = \frac{1.95 * 10^{-8}}{2.01 * 10^{-6}} = 9.7014 * 10^{-3} \text{ cm} = 97.01 \mu\text{m} \text{ --- Valor seleccionado}$$

Obtención del área transversal del dispositivo

$$A_{trans} = W * L$$

$$A_{trans} = 9.701 * 10^{-3} * 0.01 * 10^0 = 97.01 \text{ e} - 6 \text{ cm}^2$$

$$I_{max} = J_{max} * A_{trans}$$

$$I_{maxp} = 0.000201 * 97.01 * 10^{-6} = 1.949 * 10^{-8} \text{ A}$$

Obtención de la resistencia a máxima potencia

$$R_{maxp} = \frac{V_{max}}{I_{maxp}}$$

$$R_{maxp} = \frac{1.213}{1.949 * 10^{-8}} = 62.23 \text{ M } \Omega$$

$$P_{max} = J P_{max} * A_{trans}$$

$$P_{max} = 2.4381 * 10^{-4} * 97.01 * 10^{-6} = 2.3652 * 10^{-8} \text{ W}$$

Obtención de la eficiencia de conversión de potencia

$$P_{\text{incidente}} = 900 \text{ W/m}^2 = 0.09 \text{ W/cm}^2$$

$$n_{\text{power}} = \frac{V_{mp} J_{maxp}}{P_{\text{incidente}}}$$

$$n_{\text{power}} = \frac{(1.213 * 10^0) * (2.071 * 10^0)}{0.09}$$

$$n_{\text{power}} = 30.2$$

La tabla 3.7 muestra un resumen de los parámetros de desempeño calculados y la Figura 3.10 muestra el dispositivo fotovoltaico con el dimensionamiento final.

Tabla 3.7 La tabla 3.7 muestra un Resumen de los parámetros de desempeño calculados.

$V_{oc} = 1.318 \text{ V}$	$J_{sc} = 2.045 * 10^{-4} \text{ A/cm}^2$	$V_{max} = 1.213 \text{ V}$	$J_{max} 2.071 * 10^{-4} \text{ A/cm}^2$
$P_{max} = 2.4381 * 10^{-4} \text{ W}$	$\eta_{\text{power}} = 30.2$	$FF = 0.90431$	$R_{max} = 62 \text{ M } \Omega$
$I_{max} = 1.949 * 10^{-8} \text{ A}$	$A_{\text{transv}} = 97.01 \mu\text{cm}^2$		

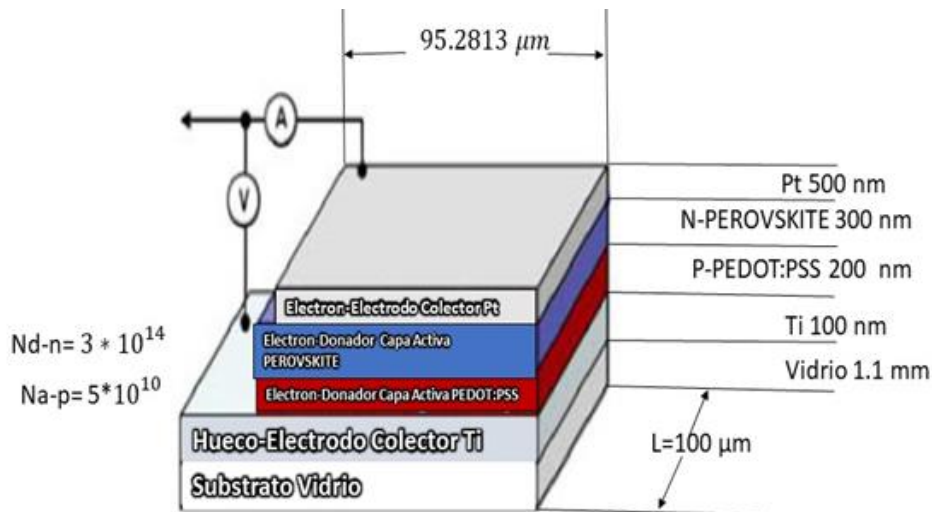


Figura 3.10 Imagen de la estructura final y dimensionamiento del dispositivo diseñado.

### 3.2.3 Arreglo serie-paralelo para el diseño del dispositivo de 5 mA.

Una vez diseñado el dispositivo unitarios y encontradas sus características de desempeño, se requiere realizar calcular cuántos de estos son necesarios conectar en paralelo para lograr un voltaje deseado. Ya encontrada esta maya de cuántos son necesario en paralelo se requiere calcular cuántas de estas mayas se requiere conectar en serie para logara una corriente desead final. En este trabajo de tesis se planteó lograr una corriente a máxima

potencia  $I_{MaxPot} = 3 \text{ mA}$  y un voltaje a máxima potencia  $V_{MaxPot} = 3 \text{ V}$ . La Figura 3.11 muestra un ejemplo de la conexión serie y paralelo de los dispositivos unitarios.

$$\#CU = \frac{V_{MaxPot}(requerido)}{V_{MaxPot}(generado)}$$

$$\#Mayas = \frac{I_{MaxPot}(requerido)}{I_{MaxPot}(generado)}$$

$$\#CU = \frac{3 \text{ V}}{1.213 \text{ V}} = 2.47 \sim 3 \text{ fotodiodos}$$

$$\#Mayas = \frac{3 \text{ mA}}{1.9499 * 10^{-8} \text{ A}} = 153.854 \text{ K} \sim \text{mayas}$$

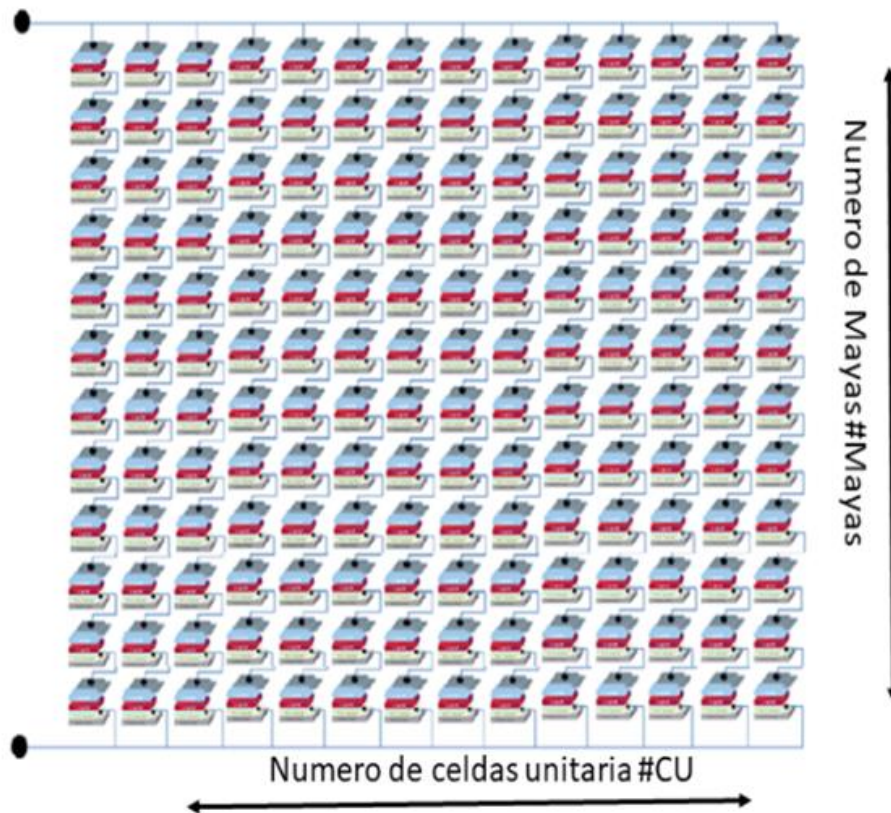


Figura 3.11 Ejemplo de la conexión serie y paralelo de los dispositivos unitarios.

# CAPÍTULO 4

## ANÁLISIS DE RESULTADOS

En este capítulo se realiza un análisis de los resultados obtenidos a en la ejecución de la metodología desarrollada. De la misma manera se comparan los resultados obtenidos teóricamente con los resultados obtenidos de mediciones en implementaciones reales de celdas solares similares.

### 4.1 Resumen de los resultados obtenidos en el diseño teórico.

La Figura 4.1 muestra la curva de respuesta  $V$  vs  $J$  obtenida en la implementación de la metodología desarrollada para el análisis y diseño teórico de dispositivos fotovoltaicos unitaria con estructura Vidrio/Ti/PEDOT:PSS/PEROVSKITE/Pt. De la misma manera la tabla 4.1 muestra un resumen de los parámetros de desempeño calculados y obtenidos a partir de la Figura 4.1. En esta tabla se puede observar un voltaje de circuito abierto  $V_{oc}$  de 1.3184 V y una densidad de corriente corto circuito  $J_{sc}$  de  $20.448 \text{ mA/cm}^2$  que son valores típicos para celdas unitarias fabricadas con los materiales utilizados. Es importante notar que estas características de desempeño al ser demasiado pequeñas no podría alimentar una carga práctica por lo que es necesario la conexión paralela y serie de estos para incrementar el voltaje y la densidad de corriente hasta suministrar suficiente potencia para alimentar una carga real. De igual manera se puede observas un factor de llenado FF de 0.9043 y una eficiencia de conversión de potencia de 30.2498 que también son valores típicos para celdas unitarias de capa activa de perovskite.

La Figura 4.2 muestra la estructura final obtenida en el diseño teórico de la celda solar unitaria. En este dibujo se puede observar un ancho de la capa ventana (PEDOT:PSS) de 200 nm mientras que el de la capa activa (Perovskite) es de 300 nm, esta diferencia se debe principalmente a que el PEDOT:PSS al ser material ventana su función principal es el ser uno de los materiales que forman la unión pn pero sin atenuar o disipar (lo menos posible) la radiación solar que pasa atreves de él. También se puede observar en esta figura un largo L de dispositivo de  $100\mu\text{m}$  así como un ancho calculado de  $95.28 \mu\text{m}$ .

Tabla 4.1 Resumen de los parámetros de desempeño calculados

$V_{oc} = 1.3184 \text{ V}$	$J_{sc} = 20.448 \text{ mA/cm}^2$	$V_{max} = 1.213 \text{ V}$	$J_{max} = 0.207 \text{ mA/cm}^2$
$P_{max} = 2.3652 * 10^{-8} \text{ W}$	$\eta_{power} = 30.2$	FF = 0.9043	$R_{max} = 62 \text{ M } \Omega$

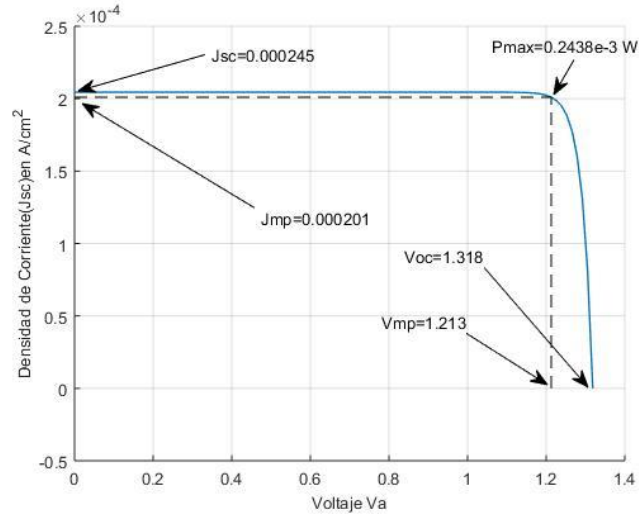


Figura 4.1 Grafica de J vs V.

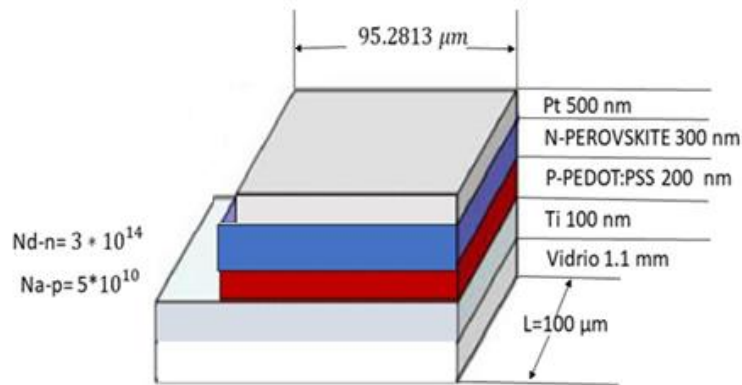


Figura 4.2 Imagen de la estructura final y dimensionamiento del dispositivo diseñado.

#### 4.2 Comparación de los resultados obtenidos con resultados publicados.

Los resultados obtenidos en la implementación de la metodología desarrollada para el análisis y diseño teórico de dispositivos fotovoltaicos unitaria con estructura Vidrio/Ti/PEDOT:PSS/PEROVSKITE/Pt se compararan con resultados obtenidos de mediciones realizadas por diferentes autores que implementaron prácticamente dispositivos fotovoltaicos con estructura en las capas activas similar. En las estructuras implementadas de los autores que se citan es esta sección existen algunas diferencias en las capas que acompañan a las activas (espaciadores ópticos, y metales) las cuales se comentaran y se discutirá así como la peque variación que estas puede ocasionar en la comparación de resultados.

Las características de desempeño teóricas mostradas en la Tabla 4.1 pueden ser comparadas con los resultados prácticos obtenidos por Masatoshi Yanagida y colaboradores en su artículo "Effect of Carrier Transport in NiO on the Photovoltaic Properties of Lead Iodide Perovskite Solar Cells", el cual fue publicado en la revista internacional "Electrochemistry" el año 2017 [25]. Esta comparación es válida debido a que utiliza el

Material Perovskite como capa activa. En su artículo Masatoshi Yanagida y colaboradores implementaron un dispositivo fotovoltaico con estructura ITO/NiOx/Perovskita/PCBM/Ag y otro con estructura ITO/PEDOT:PSS/Perovskita/Ag los resultados encontrados de características de desempeño se muestran en la Tabla 4.2. De la misma manera en el último renglón de la Tabla 4.1 se ha agregado los resultados teóricos obtenidos con la metodología desarrollada.

Tabla 4.2 Resultados obtenidos de mediciones por Masatoshi Yanagida y colaboradores.

Hole transport layer	Thickness (nm)	$J_{SC}$ (EQE) <sup>a</sup> (mA cm <sup>-2</sup> )	$J_{SC}$ (mA cm <sup>-2</sup> )	$V_{OC}$ (V)	$FF$	$E_{ff}$ (%) <sup>b</sup>	$R_s$ (Ω cm <sup>2</sup> )	$R_{sh}$ (Ω cm <sup>2</sup> )
NiO <sub>x</sub>	35	19.0	19.3	1.05	0.63	12.8	11.3	942
	60	17.8	18.8	1.02	0.66	12.7	8	1205
	120	16.7	18.4	1.03	0.63	11.9	11.1	1523
PEDOT:PSS	30	18.0	19.2	0.958	0.74	13.6	5.4	2464

<b>PEDOT:PSS</b>	<b>200</b>		<b>2.04</b>	<b>1.318</b>	<b>0.90</b>	<b>30.2</b>		
------------------	------------	--	-------------	--------------	-------------	-------------	--	--

Se puede observar de la Tabla 4.2, que los valores encontrados mediante la metodología desarrollada, la  $\eta$  con un valor de 30.2, el  $V_{oc}$  con valor de 1.31 V, la  $J_{sc}$  con un valor de  $20.4 \text{ mA/cm}^2$  y  $FF$  con un valor de 0.90 son mayores que los medios prácticamente, este es un indicativo que le da certidumbre a la metodología desarrollada debido a que los valores teóricos puede verse como los límites alcanzables de manera práctica, esto debido a que en los modelos algunas eficiencias de disociación, tales como la disociación de excitones se considera unitaria, que de manera práctica es menor a uno. Para considerar esta eficiencia se requiere incorporar con más detalle la teoría de Osager-Brown que esta fuera del alcance de este trabajo de tesis.

De igual manera que en el anterior en las características de desempeño teóricas mostradas en la Tabla 4.1 pueden ser comparadas con los resultados prácticos obtenidos por Christian Wehrenfennig y colaboradores en su artículo "High Charge Carrier Mobilities and Lifetimes in Organolead Trihalide Perovskites", el cual fue publicado en la revista internacional "Advanced Materials" el año 2014 [26]. En este trabajo también utilizaron el material Perovskite como capa activa. En su artículo Christian Wehrenfennig y colaboradores implementaron un dispositivo fotovoltaico con estructura FTO/TiO<sub>2</sub>/Perovskita/Ag los resultados encontrados de características de desempeño se muestran en la Tabla 4.3.

Tabla 4.3 Resultados obtenidos de mediciones por Christian Wehrenfennig y colaboradores.

Material	Charge Carrier Decay Constants			Mobility <sup>a)</sup> $\phi\mu$ [cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	Langevin <sup>b)</sup> $\frac{(k_2/\mu)_{ex} - 1}{(k_2/\mu)} \epsilon_r$	Device PCE <sub>max</sub> [%]
	3rd order <sup>a)</sup> [cm <sup>6</sup> s <sup>-1</sup> ]	2nd order <sup>a)</sup> [cm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	1st order (PL) [μs <sup>-1</sup> ]			
CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3-x</sub> Cl <sub>x</sub>	$9.9 \times 10^{-29}$	$8.7 \times 10^{-11}$	4.9	11.6	$4.2 \times 10^{-6}$	12.7
CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> (3:1)	$3.7 \times 10^{-29}$	$9.4 \times 10^{-10}$	15	8.1	$6.4 \times 10^{-5}$	8.5
CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> (1:1)	$1.3 \times 10^{-28}$	$9.2 \times 10^{-10}$	14	8.2	$6.2 \times 10^{-5}$	0.9

Se puede observar de la Tabla 4.3, que el valor encontrado mediante la metodología desarrollada para la eficiencia  $\eta$  es de 30.2 es mayor que el valor medido prácticamente, de nuevo es un indicativo de certidumbre en la metodología desarrollada debido a que los valores teóricos pueden verse como los límites alcanzables de manera práctica.

# CAPÍTULO 5

## CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

En este capítulo se describen las conclusiones principales en la realización de este trabajo de tesis y se plantean trabajos futuros que complementaria de manera positiva los logros obtenidos.

### 5.1 Conclusiones.

En este trabajo de tesis se presenta el desarrollo de una metodología para el análisis y diseño de dispositivos fotovoltaico con capa activa de material orgánico (OPV). La estructura del OPV considerada en este trabajo es de tipo Vidrio/Ti/PEDOT:PSS/Perovskite/Pt. La metodología desarrollada está basado en los tres procesos básicos de análisis y diseño de dispositivos fotovoltaicos; el cálculo de la tasa de generación de excitones  $G(x)$  utilizando la técnica de la matriz lineal de transferencia óptica en un solo eje, el cálculo de las concentraciones de carga  $n(x)$  y  $p(x)$  en la capa activa a través del cálculo de auto consistencia entre la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de cargas (algoritmo iterativo de Gummel) y la caracterización del desempeño del OPV para una irradiación solar promedio de  $100 \text{ mW/cm}^2$  (estándar AM 1.5G), mediante el cálculo de la curva de densidad de corriente-voltaje ( $JV$ ), el voltaje de circuito abierto ( $V_{oc}$ ), la densidad de corriente de corto circuito ( $J_{sc}$ ), el factor de llenado ( $FF$ ) y la eficiencia de conversión ( $PCE$ ) utilizando las ecuaciones básicas para dispositivos de unión  $pn$ .

Los resultados teóricos obtenidos en este trabajo fueron comparados con mediciones prácticas reportadas por diferentes autores en los últimos años. Los valores encontrados mediante la metodología desarrollada, la  $\eta$  con un valor de 30.2, el  $V_{oc}$  con valor de 1.31 V, la  $J_{sc}$  con un valor de  $20.4 \text{ mA/cm}^2$  y  $FF$  con un valor de 0.90 son mayores que los medios prácticamente, este es un indicativo que le da certidumbre a la metodología desarrollada debido a que los valores teóricos pude verse como los limites alcanzables de manera práctica, esto debido a que en los modelos implementados algunas eficiencias de generación y disociación, tales como la absorción de fotones y disociación de excitones se considera unitaria, que de manera práctica es menor a uno. Para considerara esta eficiencias se requiere incorporar con más detalle la teoría de Osager-Brawn que esta fuera del alcance de esté trabajo de tesis.

### 5.2 Trabajo futuro.

Dentro de los trabajos futuros que complementaran este trabajo se encuentra la aplicación detallada de la teoría de Osager-Brawn para poder asignar ganancias más reales a procesos como la generación de excitones, la disociación de excitones y captación de cargas en los asía los electrodos y con esto aproximar con mayor precisión las características de desempeño obtenidas teóricamente con resultados medidos. De la misma

manera se plantea realizar implementaciones prácticas de dispositivos fotovoltaicos con estructura Vidrio/Ti/PEDOT:PSS/ Perovskite/Pt para obtener mediciones prácticas y comparar estos resultados con los resultados teóricos arrojados por la metodología desarrollada.

# REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- [1] Solar Cell Efficiency Tables (Version12), *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 7 (1998).  
Website (University of New South Wales): [www.pv.unsw.edu.au/eff/](http://www.pv.unsw.edu.au/eff/)
- [2] B. O'Regan and M., "Graetzel A low cost, high efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO<sub>2</sub> Films", *Nature* 353, 737 (1991)
- [3] Vorgelegt von, Wolfgang Tress. Device Physics of Organic Solar Cells. Drift-Diffusion Simulation in Comparison with Experimental Data of Solar Cells Based on Small Molecules. REINER LEMOINE 2011.
- [4] Edited by Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita. Theoretical Modeling of Organohalide Perovskites for Photovoltaic Applications. July 27, 2017 by CRC Press Reference – 229 Pages - ISBN 9781498750783.
- [5] Paulus A. van Hal – Eindhoven, Photophysics of Molecules and Materials for Polymer Solar Cells, Technische Universiteit Eindhoven, 2003. ISBN 90-386-2814-5
- [6] Huisheng Peng, Xuemei Sun, Wei Weng, Xin Fang, Polymer Materials for Energy and Electronic Applications, Academic Press, Oct,1,2016. ISBN 0128110929,9780128110928, pages 386.
- [7] Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems, ISE with support of PSE AG  
Freiburg, 12 July 2017 [www.ise.fraunhofer.de](http://www.ise.fraunhofer.de)
- [8] <https://solargis.com/products/maps-and-gis-data/free/download/mexico>  
[//http://sie.energia.gob.mx/bdiController.do?action=cuadro&cvequa=IEOC01](http://sie.energia.gob.mx/bdiController.do?action=cuadro&cvequa=IEOC01)
- [9] Peter Peumans, "Small molecular weight organic thin-film photodetectors and solar cells", *Journal of Applied Physics* 93, 3693 (2003); doi: 10.1063/1.1534621.
- [10] W. S. Douglas, S. Vishal, and Y. Yang, "Modeling optical effects and thickness dependent current in Current in polymer bulk-heterojunction solar cells", *J. Appl. Phys.*, 100, 114509-1 (2006).
- [11] L. A. A. Pettersson, L. S. Roman, and O. Inganäs, "Modeling photocurrent action spectra of photovoltaic Devices based on organic thin films", *J. Appl. Phys.*, 86(1), 487-496 (1999),
- [12] L. J. A. Koster, "Device model for the operation of polymer/fullerene bulk heterojunction solar cells", *PHYSICAL REVIEW B* 72, 085205, 2005, DOI: 10.1103/PhysRevB.72.085205
- [13] S. Selberherr, "Analysis and Simulation of Semiconductor Devices", Springer-Verlag, Wien, Germany (1984).
- [14] C. L. Braun, "Electric field assisted dissociation of charge transfer states as a mechanism of photo Carrier Production", *J. Chem. Phys.* 80, 4157-4161 (1984).
- [15] V. D. Mihailetschi, et al., "Photocurrent Generation in Polymer-Fullerene Bulk Hetero junctions", *Phys. Rev. Lett.*, 93, 216601 (2004).
- [16] Carsten Deibel, "Polymer–fullerene bulk heterojunction solar cells", *Rep. Prog. Phys.* 73, 096401 (39pp),

(2010), doi:10.1088/0034-4885/73/9/096401

- [17] Organic Photovoltaics Materials, Device Physics, and Manufacturing Technologies, Edited by Christoph Brabec, Vladimir Dyakonov, and Ullrich Scherf, WILEY-VCH.
- [18] Progress in High-Efficient Solution Process OPD.pdf (libro).
- [19] Gilles Dennler, "Angle dependence of external and internal quantum efficiencies in bulk-heterojunction Organic solar cells", JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 102, 054516, 2007.
- [20] D. Chen, et. al, "Performance Comparison of Conventional and Inverted Organic Bulk Heterojunction Solar Cells From Optical and Electrical Aspects", IEEE Trans. Elect. Dev., 60(1), 451-457 (2013).
- [21] A. J. Moule, J. B. Bonekamp, and K. Meerholz, "The effect of active layer thickness and composition on the Performance of bulk-heterojunction solar cells", J. Appl. Phys., 100, 0945503 (2006).
- [22] Zhicai He, "Enhanced power-conversion efficiency in polymer solar cells using an inverted device Structure", Nature Photonics 6, 591–595 (2012) doi:10.1038/nphoton.2012.190
- [23] I. Etxebarria, J. Ajuria, and R. Pacios, "Polymer: fullerene solar cells: materials, processing issues, and cell Layouts to reach power conversion efficiency over 10%, a review", J. Photon. Energy, 5, 057214 (2014).
- [24] Zhe Li, "Voltage-dependent photocurrent transients of PTB7:PC70BM solar cells: Experiment and numerical simulation", Journal of Applied Physics 114, 034502 (2013).
- [25] Masatoshi YANAGIDAI, et al. "Effect of Carrier Transport in NiO on the Photovoltaic Properties of Lead Iodide Perovskite Solar Cells", Electrochemistry, 85(5) (2017).
- [26] Christian Wehrenfennig, et al., "High Charge Carrier Mobilities and Lifetimes in Organolead Trihalide Perovskite, Advanced Materials, 26, 1584 (2014).

## Anexo I

### Abreviaturas y/o Acrónimos

---

AM1.5	Masa de Aire, razón de	Masa atmosférica a través del cual pasa la radiación directa.
BC		Banda de Conducción.
BV		Banda de Valencia.
BHJ		Hetero unión de bulto.
C		Elemento Carbono
C60		polímero
DOS		Densidad de estados.
DSSC		Celda solar sensibilizada por colorante.
E <sub>G</sub>		Energía de gap.
FTO		fluor tin oxido
G <sub>sc</sub>		Constante de intensidad de radiación.
HTM		Material transmisor de huecos.
HOMO		Orbital molecular ocupado de mayor energía.
Heterounión		Unión entre dos semiconductores.
HWFE		Electrodo de función de trabajo alto.
ITO		Indio Tin Oxido.
IOPV		Dispositivo fotovoltaico invertido.
LUMO		Orbital molecular desocupado de baja energía.
LWFE		Electrodo de función de trabajo bajo.
L <sub>p</sub>		Longitud de difusión de huecos.
L <sub>n</sub>		Longitud de difusión de electrones.
MA		Catión Orgánico Metil Amonio
N <sub>d</sub>		Concentración intrínseca donador-n PEROVSKITE.
N <sub>a</sub>		Concentración intrínseca aceptor-p PEDOT: PSS.
NC		Nanocristal.
OPVs		Dispositivo orgánico de foto voltaje.
OPVC		Celda Orgánica de foto Voltaje.
PEROVSKITE	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub>	metilamonio de yoduro de plomo, MAPI o MAPbI <sub>3</sub>
PEDOT:PSS		Poli 3,4-etilendioxitiofeno) poli estireno sulfonado.
P3HT		Poli-3-hexil-tiofeno.
Pt		Elemento platino.
Refractancia		Capacidad de las superficies de reflejar la luz.
spin-coating		Recubrimiento por centrifugado.
TW		Tera Watts, Unidad de potencia.
Ti		Elemento Titanio
Transmitancia		Capacidad de los materiales de transmitir la luz.
τ <sub>n</sub>		Tiempo de recombinación de carga minoritaria n.
τ <sub>p</sub>		Tiempo de recombinación de carga minoritaria p.
TCO		Oxido Conductor Transparente.
TiO <sub>2</sub>		Oxido de Titanio.

## Anexo II Índice de Refracción complejo Ti

Wavelength, $\mu\text{m}$	n	k
0.35	1.380	2.43
0.36	1.290	2.41
0.37	1.200	2.35
0.38	1.125	2.38
0.39	1.010	2.45
0.4	0.900	2.52
0.41	0.772	2.61
0.42	0.700	2.71
0.43	0.640	2.82
0.44	0.580	2.93
0.45	0.516	3.05
0.46	0.490	3.16
0.47	0.460	3.24
0.48	0.430	3.35
0.49	0.400	3.4
0.50	0.367	3.59
0.51	0.351	3.71
0.52	0.335	3.83
0.53	0.319	3.95
0.54	0.303	4.05
0.55	0.287	4.22
0.56	0.282	4.32
0.57	0.277	4.4
0.58	0.272	4.52
0.59	0.267	4.61
0.60	0.262	4.73
0.61	0.257	4.80
0.62	0.251	4.97
0.63	0.250	5.07
0.64	0.249	5.17
0.65	0.249	5.24
0.66	0.248	5.35
0.67	0.247	5.46
0.68	0.247	5.56
0.69	0.246	5.68
0.70	0.245	5.76
0.71	0.257	5.88
0.72	0.262	5.97
0.73	0.268	6.07
0.74	0.273	6.17
0.75	0.279	6.27
0.76	0.284	6.34
0.77	0.290	6.46
0.78	0.295	6.58
0.79	0.301	6.69
0.80	0.306	6.76

### Anexo III Índice de Refracción complejo PEDOT: PSS

Wavelength (nm)	n	k
350	1.4	0
360	1.39	0.003
370	1.36	0.005
380	1.34	0.006
390	1.32	0.007
400	1.31	0.008
410	1.3	0.012
420	1.29	0.013
430	1.29	0.014
440	1.29	0.015
450	1.29	0.016
460	1.29	0.018
470	1.29	0.02
480	1.29	0.022
490	1.29	0.024
500	1.29	0.025
510	1.29	0.0252
520	1.29	0.026
530	1.29	0.0264
540	1.29	0.0268
550	1.29	0.027
560	1.29	0.0274
570	1.29	0.0278
580	1.29	0.0292
590	1.29	0.03
600	1.29	0.034
610	1.29	0.036
620	1.29	0.0364
630	1.29	0.0368
640	1.29	0.0372
650	1.29	0.0376
660	1.29	0.038
670	1.29	0.0384
680	1.29	0.0388
690	1.29	0.04
700	1.29	0.044
710	1.29	0.0444
720	1.29	0.0448
730	1.29	0.0451
740	1.29	0.0454
750	1.29	0.0459
760	1.29	0.0473
770	1.29	0.0479
780	1.29	0.0483
790	1.29	0.0487
800	1.29	0.0491

## Anexo IV Índice de Refracción complejo PEROVSKITE

Wavelength, $\mu\text{m}$	n	k
0.35	1.71	1.15
0.36	1.83	1.16
0.37	1.94	1.14
0.38	2.03	1.09
0.39	2.10	1.04
0.40	2.14	0.98
0.41	2.16	0.93
0.42	2.18	0.89
0.43	2.18	0.87
0.44	2.19	0.85
0.45	2.20	0.84
0.46	2.22	0.84
0.47	2.25	0.84
0.48	2.28	0.84
0.49	2.32	0.83
0.50	2.36	0.81
0.51	2.40	0.79
0.52	2.43	0.76
0.53	2.46	0.72
0.54	2.48	0.69
0.55	2.50	0.65
0.56	2.51	0.61
0.57	2.52	0.58
0.58	2.52	0.55
0.59	2.52	0.52
0.60	2.52	0.49
0.61	2.51	0.47
0.62	2.51	0.45
0.63	2.50	0.43
0.64	2.50	0.42
0.65	2.50	0.40
0.66	2.49	0.39
0.67	2.49	0.38
0.68	2.49	0.37
0.69	2.48	0.36
0.70	2.48	0.36
0.71	2.49	0.35
0.72	2.49	0.35
0.73	2.50	0.35
0.74	2.51	0.34
0.75	2.53	0.33
0.76	2.56	0.31
0.77	2.58	0.28
0.78	2.58	0.22
0.79	2.55	0.18
0.80	2.51	0.17

## Anexo V Índice de Refracción complejo Pt

Wavelength, $\mu\text{m}$	n	k
0.35	1.54	3.06
0.36	1.48	2.98
0.37	1.41	2.93
0.38	1.29	2.91
0.39	1.12	3.07
0.40	1.07	3.14
0.41	0.87	3.21
0.42	0.81	3.32
0.43	0.76	3.43
0.44	0.66	3.57
0.45	0.63	3.76
0.46	0.63	3.89
0.47	0.62	4.15
0.48	0.62	4.26
0.49	0.61	4.32
0.50	0.51	4.40
0.51	0.49	4.54
0.52	0.47	4.68
0.53	0.44	4.72
0.54	0.46	4.86
0.55	0.46	5.12
0.56	0.46	5.22
0.57	0.45	5.32
0.58	0.45	5.44
0.59	0.45	5.65
0.60	0.44	5.74
0.61	0.44	5.81
0.62	0.46	5.98
0.63	0.47	6.10
0.64	0.47	6.21
0.65	0.48	6.32
0.66	0.48	6.42
0.67	0.48	6.54
0.68	0.49	6.65
0.69	0.49	6.73
0.70	0.49	6.86
0.71	0.50	7.03
0.72	0.51	7.14
0.73	0.51	7.25
0.74	0.52	7.32
0.75	0.52	7.41
0.76	0.54	7.52
0.77	0.54	7.63
0.78	0.56	7.75
0.79	0.56	7.87
0.80	0.58	7.98

## Anexo VI, Irradiación solar promedio W/cm<sup>2</sup> I<sub>c</sub>, E<sub>Eo</sub>

Wavelength, μm	E <sub>o</sub> , I <sub>c</sub>
350	0.32913
360	0.3924
370	0.51666
380	0.49751
390	0.58457
400	0.83989
410	0.8091
420	0.88467
430	0.70134
440	1.0993
450	1.2881
460	1.2791
470	1.2749
480	1.3825
490	1.3968
500	1.3391
510	1.3497
520	1.3349
530	1.3598
540	1.3096
550	1.3648
560	1.3885
570	1.324
580	1.3455
590	1.2316
600	1.3278
610	1.3237
620	1.3299
630	1.2589
640	1.2962
650	1.2299
660	1.2668
670	1.2853
680	1.265
690	1.0746
700	1.1636
710	1.1954
720	0.8994
730	1.0294
740	1.1119
750	1.1273
760	0.24716
770	1.0646
780	1.0687
790	1.0045
800	0.98859

## ANEXO VII ECUACIONES UTILIZADAS.

ECUACIONES CAPITULO 1,2,3	DESCRIPCION
Ecuación (1.1) $I_{jk} = \frac{1}{t_{jk}} \begin{bmatrix} 1 & r_{jk} \\ r_{jk} & 1 \end{bmatrix}$	matriz de interface de 2x2
Ecuación (1.2) $L_j = \begin{bmatrix} e^{-i\xi_j d_j} & 0 \\ 0 & e^{i\xi_j d_j} \end{bmatrix}$	matriz de propagación
Ecuación (1.3) $\begin{bmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} E_{m+1}^+ \\ E_{m+1}^- \end{bmatrix}$	matriz de transferencia total S
Ecuación (1.2) $S = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} = \left( \prod_{n=1}^m I_{(n-1)n} L_n \right) I_{m(m+1)}$	S es el producto de todas las matrices de interface y matrices de capas
Ecuación (1.5) $S = S'_j L_j S''_j$	matriz de transferencia del sistema Total
Ecuación (1.6) $S'_j = \left( \prod_{n=1}^{j-1} I_{(n-1)n} L_n \right) I_{(j-1)j}$	matriz de transferencia del sistema subconjunto, capa j anterior
Ecuación (1.7) $S''_j = \left( \prod_{n=j+1}^m I_{(n-1)n} L_n \right) I_{m(m+1)}$	matriz de transferencia del sistema subconjunto, capa j posterior
Ecuación (1.8) $t_j^+ = \frac{E_j^+}{E_0^+} = \frac{t_j}{1 - r_{j-}^+ \cdot r_j^+ \cdot e^{i2 d_j \xi_j}}$	coeficientes de transferencia interna propagándose en las dirección x positivas
Ecuación (1.9) $t_j^- = \frac{E_j^-}{E_0^+} = \frac{t_j^- - r_j^+ \cdot e^{i2 d_j \xi_j}}{1 - r_{j-}^+ \cdot r_j^+ \cdot e^{i2 d_j \xi_j}} = t_j^+ r_j^+ \cdot e^{i2 d_j \xi_j}$	coeficientes de transferencia interna propagándose en las dirección x negativas
Ecuación (1.10) $E_j(x) = E_j^+(x) + E_j^-(x) = t_j^+ \left[ e^{i\xi_j x} + r_j^+ e^{i\xi_j (2d_j - x)} \right] E_0^+$	campo eléctrico total en un plano
Ecuación (1.11) $E_j(x) = \frac{S_{j11}'' \cdot e^{-i\xi_j (d_j - x)} + S_{j21}'' \cdot e^{i\xi_j (d_j - x)}}{S_{j11}' S_{j11}'' \cdot e^{-i d_j \xi_j} + S_{j12}' S_{j21}'' \cdot e^{i d_j \xi_j}} E_0^+$	Representación de campo eléctrico en términos de los elementos de las matrices de transferencia.
Ecuación (1.12) $Q_j(x, \lambda) = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \alpha_j \bar{n}_j  E_j(x) ^2$	Disipación promedio de Energía.
Ecuación (1.13) $Q_j = \alpha_j T_j I_0 \left[ e^{-\alpha_j x} + \rho_j^2 \cdot e^{-\alpha_j (2d_j - x)} + 2\rho_j^+ \cdot e^{-\alpha_j d_j} \cdot \cos\left(\frac{4\pi\eta_j}{\lambda} (d_j - x) + \delta_j^+\right) \right]$	Disipación promedio de energía, normalizada.
Ecuación (1.14) $G(x) = \eta \int_{350}^{800} \frac{\lambda}{hc} Q(x, \lambda) d\lambda$	Generación de par Exciton.
Ecuación (1.15)	Ecuación de Poisson.

Ecuación (1.16)	$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = \frac{q}{\epsilon_r \epsilon_0} [n(x) - p(x)],$	Densidad para electrones.
Ecuación (1.17)	$\frac{\partial}{\partial x} J_n(x) = qU(x),$	Densidad para huecos.
Ecuación (1.18)	$\frac{\partial}{\partial x} J_p(x) = qU(x),$	Portadores de difusión y deriva n.
Ecuación (1.19)	$J_n = qn\mu_n \frac{\partial}{\partial x} \psi + qD_n \frac{\partial}{\partial x} n,$	Portadores de difusión y deriva p.
Ecuación (1.20)	$J_p = qp\mu_p \frac{\partial}{\partial x} \psi + qD_p \frac{\partial}{\partial x} p,$	Proporción de generación neta de portadores libres.
Ecuación (1.21)	$U(x) = PG - (1 - P)R$	Probabilidad de disociación de electron-hueco.
Ecuación (1.22)	$P(a, T, F) = \int_0^\infty p(x, T, F) f(a, x) dx$	Función de distribución normalizada.
Ecuación (1.23)	$f(a, x) = \frac{4}{\sqrt{\pi} a^3} x^2 e^{-x^2/a^2}$	Probabilidad de disociación electron-hueco.
Ecuación (1.24)	$p(x, T, F) = \frac{k_{diss}(x, T, F)}{k_{diss}(x, T, F) + k_f(T)}$	Razón de disociación.
Ecuación (1.25)	$k_{diss}(x, T, F) = \frac{3\gamma}{4\pi a^3} e^{-E_B/k_B T} \left( \frac{J_1(2 - \sqrt{-2b})}{\sqrt{-2b}} \right)$	J1 función de Bessel y b parámetro de campo.
Ecuación (1.26)	$\frac{J_1(2 - \sqrt{-2b})}{\sqrt{-2b}} = \sum_{w=1}^{\infty} \frac{(2b)^w}{w!(w+1)!}$	Probabilidad de disociación electron-hueco desarrollada.
Ecuación (1.27)	$k_{diss}(x, T, F) = \frac{3\gamma}{4\pi a^3} e^{-E_B/k_B T} (1 + b + b^2/3 + b^3/18 + b^4/180 + \dots)$	Potencia para dimensionamiento.
Ecuación (1.28)	$P_{max} = J_{max} V_{max}$	Factor de llenado.
Ecuación (1.29)	$FF = P_{max} / (V_{oc} J_{sc})$	Eficiencia de cada fotón a corriente para todos los fotones incidentes en la superficie
Ecuación (1.30)	$PCE = P_{max} / P_i = (J_{max} V_{max}) / P_i = (FF V_{oc} J_{sc}) / P_i$	Eficiencia Cuántica.
Ecuación (1.31)	$IPCE \text{ ó } EQE = hc J_{sc} / \lambda_i P_i = (1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}) * J_{sc} / \lambda_i P_i$	Eficiencia Cuántica interna.
	$IQE(\lambda) = \frac{\text{número de electrones recolectados}}{\text{número de fotones absorbidos en la capa activa}}$	
	$= \left( \frac{\text{número de electrones recolectados}}{\text{número de fotones incidentes}} \right) \left( \frac{\text{número de fotones incidentes}}{\text{número de fotones absorbidos en la capa activa}} \right)$	
	$= \frac{EQE(\lambda)}{Abs_{ca}(\lambda)}$	

Ecuación (1.32)

$$W = \frac{x\% (I_{max})}{L * J_{max}}$$

Dimensionamiento de ancho de una celda unitaria.

Ecuación (3.1)

$$t'_j = \frac{1}{M'_{j11}}$$

Coefficiente de transmisión.

Ecuación (3.2)

$$r'_j = -\frac{M'_{j12}}{M'_{j11}}$$

Coefficiente de reflexión

Ecuación (3.3)

$$r''_j = -\frac{M''_{j21}}{M''_{j11}}$$

Coefficiente de reflexión.

Ecuación (3.4)

$$t_j^+ = \frac{t'_j}{1 - r'_{j-} * r''_j * e^{j2\xi_j d_j}}$$

Coefficiente de transmisión.