

ENFOQUES TEÓRICOS Y EXPERIMENTALES PARA EL DISEÑO Y CARACTERIZACIÓN DE CELDAS SOLARES DE PEROVSKITA LIBRES DE PLOMO

Harry Saltos Sánchez^{1,2,3}, Carlos Pinzón⁴, Fernando Alvira⁴, Arles Gil Rebaza^{5,6}, Marcelo Cappelletti^{1,7}

1 Grupo de Control Aplicado (GCA), Inst. LEICI (UNLP-CONICET), Fac. Ingeniería, Univ. Nac. de La Plata, La Plata 1900, Argentina

2 Becario de la CICPBA, La Plata, Provincia de Buenos Aires, Argentina

3 Fac. Ingeniería y Ciencias Agrarias, Univ. Católica Argentina (UCA), CABA, Argentina

4 Laboratorio SiCoBioNa, Univ. Nac. de Quilmes, Argentina

5 Dpto. de Física, Fac. de Ciencias Exactas, Univ. Nac. de La Plata, La Plata, Argentina

6 Instituto de Física La Plata (IFLP), CCT La Plata - CONICET, La Plata, Argentina

7 Programa TICAPPS, Univ. Nac. Arturo Jauretche, Florencio Varela, Argentina

e-mail: saltossanchezh@gmail.com

Introducción

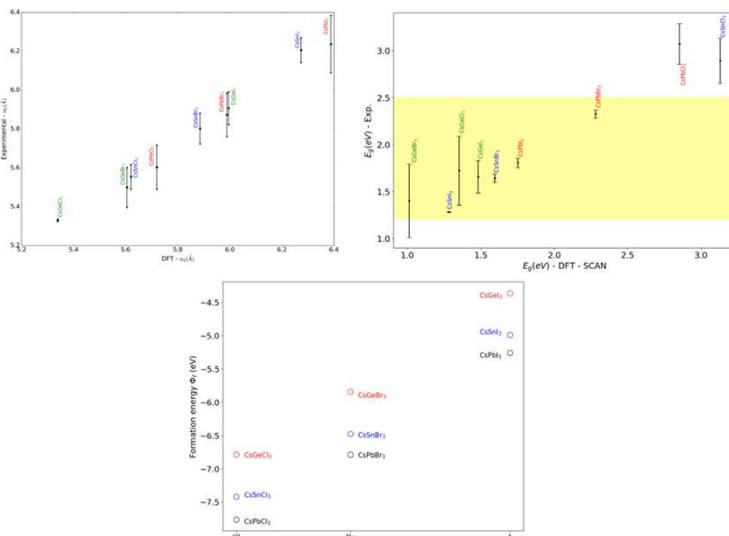
- La energía solar es una fuente limpia y sostenible.
- Las celdas solares de perovskita (CSP) ofrecen alta eficiencia y bajo costo.
- Problema:** la toxicidad del plomo (Pb) en perovskitas tradicionales.
- Objetivo:** investigar materiales alternativos libres de plomo para CSP, optimizando propiedades optoelectrónicas y desempeño fotovoltaico.

Metodología

- Cálculos de primeros principios (DFT) para analizar parámetros de red, energía de formación y band-gap de CsBX_3 (B = Pb, Sn, Ge; X = I, Br, Cl).
- Simulaciones de dispositivos usando SCAPS-1D: optimización de capas ETL y HTL.
- Fabricación experimental de nanocapas de ZnO por Spray Pyrolysis y caracterización por DRX, SEM y UV-Vis.

Resultados

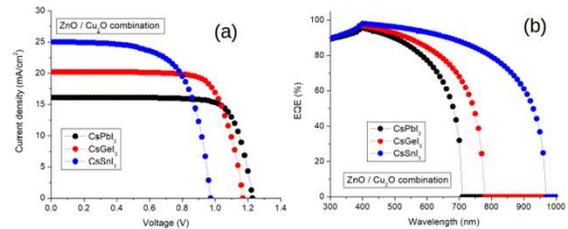
1. Propiedades de Materiales (DFT)



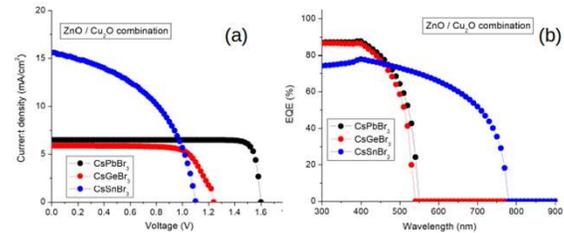
Alta correlación entre parámetros de red y band-gap simulados vs. experimentales.

Descartados CsPbCl_3 y CsSnCl_3 para aplicaciones solares (band-gap fuera de rango ideal).

2. Simulación de CSP (SCAPS-1D)



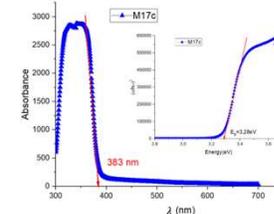
(a) Curvas J-V y (b) Curvas EQE para CSP con perovskitas CsBi_3 (B = Pb, Sn, Ge).



(a) Curvas J-V y (b) Curvas EQE para CSP con perovskitas CsBBr_3 (B = Pb, Sn, Ge).

- Configuración óptima: ZnO (ETL) / CsGeI_3 (absorbedor) / Cu_2O (HTL).
- Eficiencia máxima: 18.22% para estructura FTO/ZnO/ CsGeI_3 / Cu_2O /Au.

3. Fabricación y Caracterización de ZnO



Espectroscopia UV-vis de la muestra de ZnO.

Band-gap medido: 3.28 eV, en buena concordancia con literatura.

Conclusiones

- El reemplazo parcial o total del Pb con Sn o Ge es viable para CSP más ecológicas.
- La combinación ZnO / CsGeI_3 / Cu_2O muestra gran potencial para celdas solares libres de plomo.
- Se validó el enfoque combinado teórico-experimental para diseñar dispositivos de alta eficiencia y menor toxicidad.