

IMPACTO DEL USO DE DIVERSOS MATERIALES COMO CAPA DE TRANSPORTE DE HUECOS EN UNA CELDA SOLAR DE PEROVSKITA

G.A. Casas^{1,2}, M.A. Cappelletti^{1,3,5}, A.P. Cédola¹, Bernabé Marí Soucase⁴ y E.L. Peltzer y Blancá^{1,5}

¹ Grupo de Estudio de Materiales y Dispositivos Electrónicos (GEMyDE),
Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, 48 y 116, CC. 91, La Plata (1900), Buenos Aires, Argentina, Tel. 0221-4236690 - e-mail: gcasas@ing.unlp.edu.ar

² Universidad Nacional de Quilmes, Roque Saenz Peña 352,
Bernal (1876), Buenos Aires, Argentina

³ Universidad Nacional Arturo Jauretche, Avenida Calchaquí 6200,
Florencio Varela (1888), Buenos Aires, Argentina

⁴ Department de Física Aplicada-ETSED, Universitat Politècnica de València, Camí de Vera s/n,
46022 València, Spain

⁵ Comisión Nacional de Investigaciones Científicas (CONICET)

Recibido 09/08/16, aceptado 10/10/16

RESUMEN: En varios trabajos se ha investigado la incidencia de las características de la capa de Perovskita en la eficiencia en la celda. Hay estudios que comparan el desempeño de diversos materiales para la capa llamada “ETL-ELECTRON TRANSPORT LAYER”. En este trabajo analizamos como son afectados los parámetros que caracterizan a una celda solar de Perovskita, empleando distintas alternativas para la capa llamada “HTL-HOLE TRANSPORT LAYER”. Empleamos el simulador SCAPS-1D (SOLAR CELLS CAPACITANCE SIMULATOR). Hemos hallado una fuerte dependencia del rendimiento de la celda con la diferencia entre el máximo de la banda de Valencia de la Perovskita y el de la capa HTL, y con los dopajes de ambas capas. Rendimientos del 28% se obtienen para lo que hemos denominado condición de bandas planas en la interface HTL- PEROVSKITA. La movilidad de los portadores en la HTL solo disminuye el rendimiento cuando es muy baja. El alto rendimiento calculado demuestra la potencialidad de esta tecnología.

Palabras clave: energía solar, perovskitas, capa HTL, simulación numérica.

INTRODUCCION

Las CSP-Celdas Solares basadas en Perovskita, han tenido un notable incremento en su rendimiento en los últimos años. Eso alentó fuertemente la investigación experimental y la simulación numérica para optimizar el diseño de la estructura y la selección de los materiales. El objetivo es mejorar el desempeño de una tecnología que promete obtener altas eficiencias de conversión de energía con bajos costos de fabricación. Diversos artículos de revisión brindan un panorama del desarrollo y progreso de las CSP, mostrando amplias posibilidades para avanzar en la ECE-Eficiencia de Conversión de Energía, disminuir costos, mejorar la estabilidad de las celdas, y desarrollar aplicaciones comerciales diversas (Green et al., 2014; Zuo et al, 2016). En 2013 fue informada la primera CSP de estado sólido basada en la estructura $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ con una ECE del 9,7% (Sun et al., 2013), hasta llegar en 2015 a una ECE del orden del 20% certificados en laboratorio (Green et al., 2015). En la figura 1 se ilustra la estructura planar de la celda. La capa de perovskita es la que absorbe la luz, mientras que las otras dos capas (HTL y ETL) son las que vinculan la zona de generación de portadores con los contactos externos.

A los efectos de una eficiente colección de los portadores en los contactos, la capa ETL debe bloquear el flujo de huecos y facilitar el de electrones, mientras que la capa HTL bloquea los electrones y transporta los huecos hacia el terminal, como esquemáticamente se indica en la figura 1. Muchos trabajos analizan los efectos de variaciones en el ancho y características de la capa de

perovskita, y de las interfaces con las otras dos capas mediante simulación numérica (Feng et al., 2014; Peng et al., 2015; Zhou et al., 2016). En otros trabajos se han investigado comparativamente el TiO_2 y el ZnS como capa ETL, con resultados similares para ambos materiales (Adhikari et al., 2015). Todas las capas forman parte del camino que deben recorrer los portadores antes de ser colectados, y una correcta comprensión de los efectos que en el desempeño de la CSP tiene cada una de ellas es decisivo para la optimización de la celda. El material más usado para la capa HTL es spiro-OMeTAD (2,2',7,7'-tetrakis(N,N-di-p-methoxyphenylamine)-9,9'-spirobifluorene), relativamente costoso. Este trabajo es un estudio comparativo mediante simulación numérica de los efectos de reemplazar dicho material por diversos materiales inorgánicos como Cu_2O , CuSCN , NiO y CuI . Estos materiales semiconductores tienen distintos anchos de la banda prohibida (E_g) y afinidades electrónicas (χ_e), lo que conduce a diferentes alineamientos entre sus respectivas bandas de valencia y la de la perovskita. Todos son aptos para funcionar como transportadores de huecos y bloqueadores de electrones, y por ello han sido utilizados en diversos prototipos con rendimientos menores y muy diferentes entre sí (Chatterjee et al., 2016; Ye et al., 2015). Los resultados que hemos obtenido en este trabajo, si bien no están validados experimentalmente, plantean como hipótesis a investigar si los menores y dispersos rendimientos de los prototipos informados están relaciones con los procesos de fabricación, la calidad de los materiales, y de la interfaz con la perovskita, más que con las características específicas de cada uno de ellos, excepción hecha del offset entre las bandas de valencia. Nuestros resultados podrían indicar que el factor fundamental es la diferencia entre el MBV-Máximo de la Banda de Valencia de la capa HTL y el de la perovskita (offset), y que la ECE podría incrementarse buscando un mayor alineamiento de las mencionadas bandas.

En la figura 2 se ilustran los valores típicos en Electrón Volts (eV) del MBC-Mínimo de la Banda de Conducción y del MBV, respecto del nivel de vacío, de los materiales utilizados en la simulación. El ancho de la banda prohibida (E_g) es la diferencia en energía entre estos dos valores. La afinidad electrónica (χ_e) es la diferencia de Energía entre el MBC y el nivel de vacío (referencia).

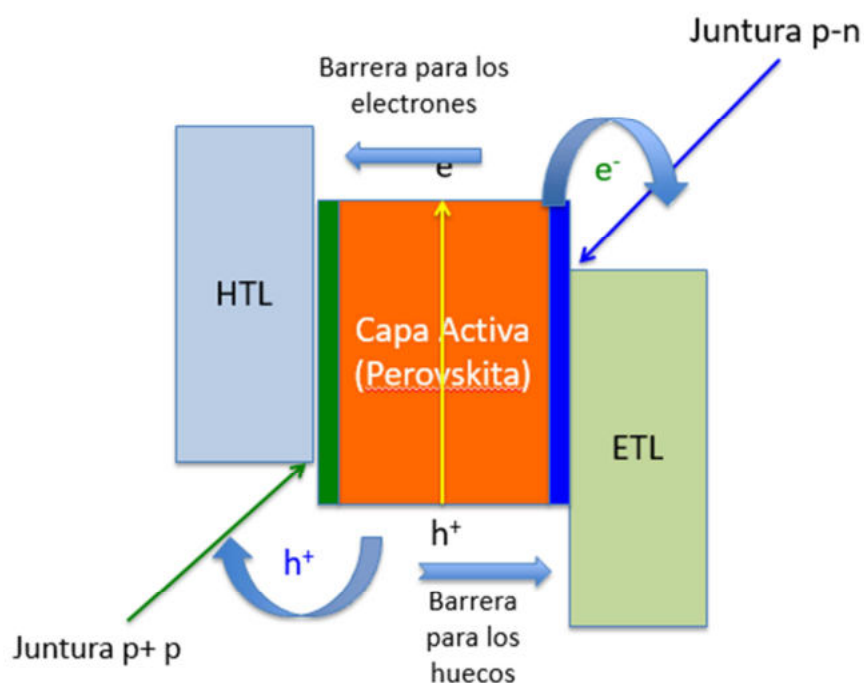


Figura 1. Esquema funcional de la PSC indicando el rol de cada una de sus capas

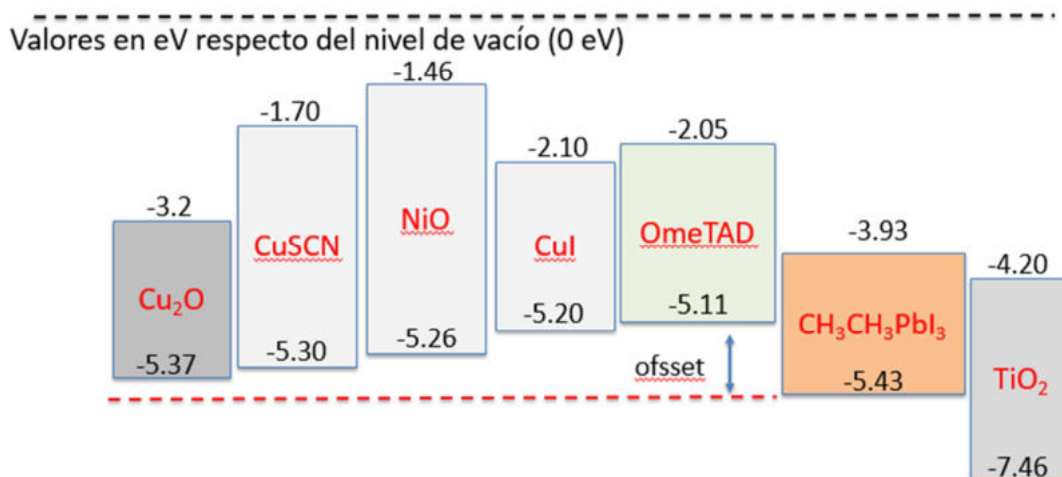


Figura 2. Energías de los bordes de las bandas de conducción y valencia para la perovskita, la capa ETL (TiO_2), y los materiales alternativos de la capa HTL, referidos al nivel de vacío

TRABAJO DE SIMULACIÓN

La simulación numérica es una herramienta importante para investigar en forma sistemática y con gran flexibilidad el impacto de la geometría de la celda y los materiales usados, obteniendo un aporte insustituible para su diseño. Para este trabajo hemos utilizado el SCAPS-1D (Solar Cells Capacitance Simulator), un código de simulación de celdas en una dimensión. SCAPS-1D resuelve las tres ecuaciones diferenciales acopladas (ecuación de Poisson, ecuación de continuidad para huecos y electrones), fue desarrollado por la Universidad de Gent, y está disponible para la comunidad científica (Burgelman et al., 2000). El SCAPS ya ha sido empleado en trabajos de simulación de CSP, obteniendo resultados similares a los informados en tablas de eficiencia de celdas solares (Adhikari et al., 2015), o con resultados comparables a trabajos experimentales (Peng et al, 2015).

La celda base que hemos utilizado es una estructura p-p-n planar de tres capas (ver figura 1), la cual ha sido desarrollada en este trabajo como HTL (variable) – perovskita -- ETL (TiO_2). La radiación solar ingresa por la capa ETL. El espectro utilizado es el AM 1.5 G incluido en el SCAPS, en condiciones estándar de temperatura (300°K) y potencia irradiada total (1000 W/m^2). La estructura p-p-n ha sido utilizada en otros trabajos de simulación (Adhikari et al., 2015; Feng et al., 2014). La Tabla 1 resume los parámetros de cada capa utilizados en la simulación. Eg y χ_e , ya mencionados, son el ancho de la banda prohibida y la afinidad electrónica respectivamente; μ_n y μ_p las movilidades de electrones y huecos; ϵ la constante dieléctrica relativa. Fueron extraídos de la literatura (Adhikari et al., 2015; Peng et al., 2015; Feng et al., 2014; Stranks et al., 2013; Noh et al., 2013; Lee et al., 2013; Snaith et al., 2007; Hirasawa et al., 1994; Sirimanne et al., 2002; Sekkal et al., 2002), o aproximados como en el caso de la densidad efectiva de estados en las bandas de conducción y valencia, NC y NV respectivamente, para los materiales alternativos de la capa HTL. NA y ND, son las concentraciones de átomos aceptores y donores de cada capa. Sus valores en el caso del spiro OMeTAD, la perovskita y la capa TiO_2 están basados en otros trabajos de simulación (Adhikari et al., 2015). En trabajos experimentales se informan prototipos en los que algunos de los materiales que utilizamos para la capa HTL se comportan como semiconductores tipo p (Chatterjee et al, 2016; Ye et al, 2015). En otro trabajo se determina la concentración N_A en celdas con Cu_2O (Bicari et al, 2010). Queda pendiente para una futura investigación establecer si las densidades de átomos aceptores que proponemos para la simulación han sido alcanzadas, o pueden serlo en la práctica de forma controlada.

Las dimensiones de cada capa fueron fijadas en los valores típicos (Adhikari et al., 2015; Feng et al., 2014). En particular el ancho de la perovskita en 400 nm garantiza una absorción de radiación cercana a la máxima, sin pérdidas mayores por recombinación (Adhikari et al., 2015; Peng et al., 2015). Para el TiO_2 fue empleado el coeficiente de absorción informado por Deng et al. (Deng et

al., 2012); para la perovskita y el spiro- OMeTAD utilizamos los valores de Poplavsky et al. (Poplavsky et al., 2012); para Cu₂O el trabajo de Malerba et al. (Malerba et al., 2011); para el CuSCN el trabajo de Ahirrao et al. (Ahirrao et al., 2011) y para el NiO el trabajo de Sriram et al. (Sriram et al., 2013). En el caso del CuI aproximamos el coeficiente de absorción como constante ($\alpha = 10^5/\text{cm}^2$) hasta la longitud de onda correspondiente al E_g del material.

		Cu2O	CuSCN	NiO	CuI	spiro
HTL (400 nm)	EG [eV]	2.17	3.6	3.8	3.1	3.06
	χ_e [eV]	3.2	1.7	1.46	2.1	2.2
	ϵ	6.6	5.1	11.7	6.5	3
	NB [1/cm ³]	2.47E+19	2.50E+20	2.50E+20	2.50E+20	2.50E+20
	NV [1/cm ³]	1.10E+19	2.50E+20	2.50E+20	2.50E+20	2.50E+20
	μ_n [cm ² /V.s]	80	25	2.8	44	2.00E-04
	μ_p [cm ² /V.s]	80	25	2.8	44	2.00E-04
	Offset*[eV]	0.06	0.13	0.17	0.23	0.32
	NA [1/cm ³]	3.00E+18	3.00E+18	3.00E+18	3.00E+18	3.00E+18
	ND [1/cm ³]	3.00E+17	3.00E+17	3.00E+17	3.00E+17	3.00E+17
Perovskita (400 nm)	EG [eV]	1.5				
	χ_e [eV]	3.93				
	ϵ	30				
	NB [1/cm ³]	2.50E+20				
	NV [1/cm ³]	2.50E+20				
	μ_n [cm ² /V.s]	50				
	μ_p [cm ² /V.s]	50				
	NA [1/cm ³]	2.10E+17				
	ND [1/cm ³]	0				
TiO ₂ (90 nm)	EG [eV]	3.2				
	χ_e [eV]	4.2				
	ϵ	100				
	NB [1/cm ³]	1.00E+21				
	NV [1/cm ³]	2.00E+20				
	μ_n [cm ² /V.s]	1.00E-03				
	μ_p [cm ² /V.s]	1.00E-03				
	NA [1/cm ³]	5.00E+18				
	ND [1/cm ³]	5.00E+19				

Tabla 1. Parámetros utilizados en la simulación. * $Offset = MBV_{HTL} - MBV_{Perovskita}$.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la Tabla 2 se resumen los resultados de la ECE calculada variando el material de la capa HTL, y manteniendo fijas las otras dos capas. No se considera recombinación en la capa HTL ya que las simulaciones demuestran que no incide en la ECE. Para el caso de la celda spiro/perovskita/TiO₂ obtuvimos resultados similares a los informados en las tablas de rendimiento de celdas solares (Green et al, 2015)

HTL	Offset [eV]	ECE[%]	ECE[%] - Offset 0
Cu₂O	0.06	25.05	25.10
CuSCN	0.13	24.86	25.11
NiO	0.17	24.56	25.11
CuI	0.23	23.77	25.11
spiro-OMeTAD	0.32	21.75	24.32

Tabla 2. Rendimiento de la Celda para cada HTL según parámetros de la Tabla 1. La última columna, ECE-Offset 0, corresponde a los resultados de la simulación ajustando la afinidad electrónica de cada material para que los MBV del HTL y la perovskita se ubiquen en el mismo nivel de energía

La Figura 3 grafica los valores tomados de la tabla 2. Se puede observar que la ECE decrece con la diferencia (offset) entre los MBV de la capa HTL y de la perovskita

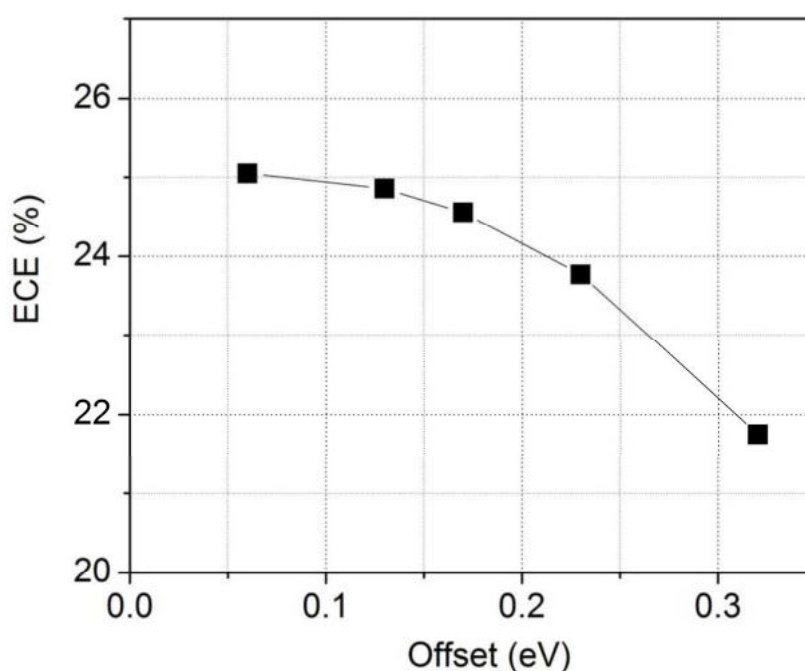


Figura 3. Variación de la ECE con el offset entre las bandas de valencia

Observando la última columna de la tabla 2, que corresponde a los valores de eficiencia que se obtendrían si el offset fuese nulo, se ve que sólo el caso spiro presenta un rendimiento inferior en esa condición. Esto se debe a la baja movilidad relativa de los huecos en este material. Como las movilidades en los otros materiales van desde un mínimo de $2.8 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ en el caso del NiO, a un máximo de $88 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ en el Cu₂O (una relación de 1 a 30) sin modificar la ECE, se puede suponer que la movilidad en la capa HTL es un factor importante hasta cierto valor mínimo a partir del cual su incidencia es prácticamente nula. Para el spiro-OMeTAD se obtiene con $\mu_p = 0.2 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ una ECE del 25.11%. En la fórmula (1) definimos el Factor de Llenado (FF-Fill Factor). En dicha expression V_{pm} e I_{pm} son los valores de la tensión y la corriente que corresponden al punto de máxima potencia que puede entregar la celda. La formula (2) permite calcular la ECE en función del FF, V_{oc} , I_{sc} y P_{irr} . Esta última es la potencia total que recibe la celda. El efecto de la variación de la movilidad en la capa spiro sobre el FF y sobre la ECE puede verse en la Figura 4, en la que se observa la tendencia hacia un máximo en ambos casos a medida que aumenta la movilidad. Como V_{oc} e I_{sc} se mantienen sin mayor variación, se concluye que el increment del FF explica el aumento de la ECE.

$$FF = V_{pm} * I_{pm} / V_{oc} * I_{sc} \quad (1)$$

$$ECE [\%] = (V_{oc} * I_{sc} * FF / P_{irr}) * 100 \quad (2)$$

En la figura 5. se ha graficado la curva JV de la celda spiro/perovskita/TiO₂ para dos valores de la movilidad de los huecos. Puede verse que a iguales valores de tension -mayores a 1 V- la densidad de corriente J es menor para la curva que corresponde a la movilidad mas baja (símbolos llenos). La disminución de μ_p , y en consecuencia la menor longitud de difusión de los huecos en la perovskita, provoca un aumento de la cantidad que se recombina antes de llegar al contacto, lo que disminuye la colección de portadores, y provoca la disminución de J a esos valores de tensión. La consecuencia es un menor FF y una menor ECE

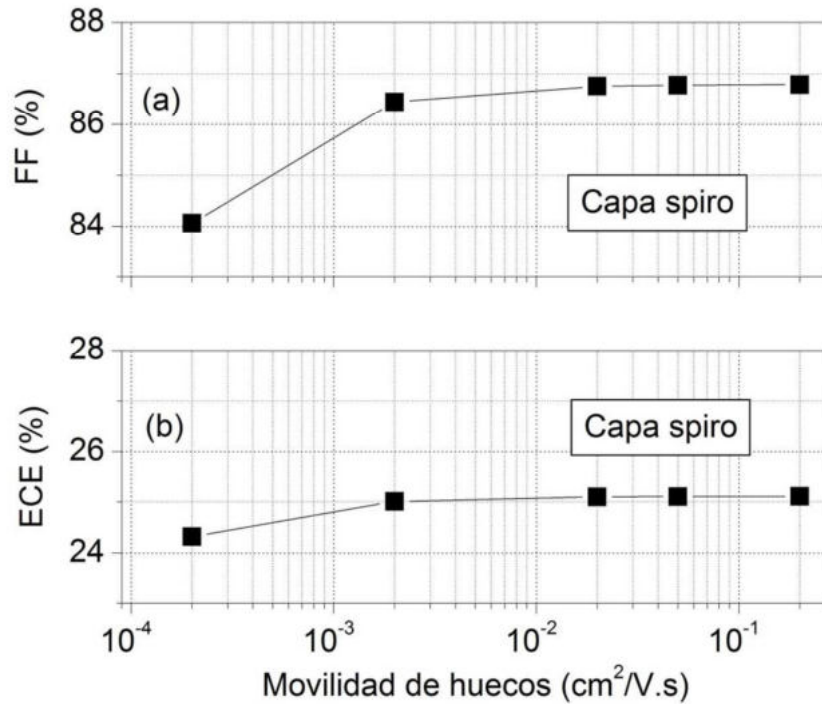


Figura 4. a) FF vs movilidad de huecos en la capa spiro. b) ECE vs movilidad de huecos en la capa spiro.

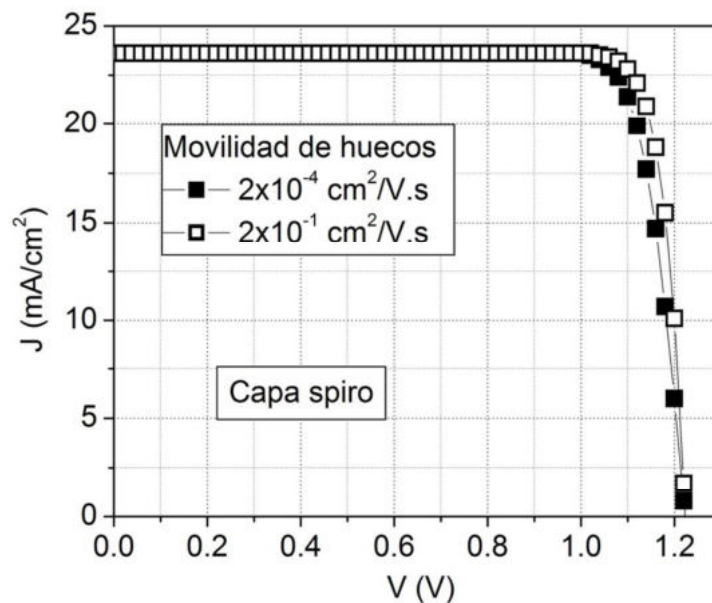


Figura 5. Curva JV para dos valores de μ_p en la capa spiro (HTL)

Como ya señalamos, si se ajusta en valor de la afinidad electrónica de cada material en la simulación para que los MBV de la capa HTL y de la perovskita queden en igual nivel de energía, el rendimiento es prácticamente el mismo para todos. Esto indica que –al menos en el modelo empleado por el SCAPS- el ancho de la banda prohibida (E_g), y las diversas movilidades de los huecos en el rango de valores que corresponden a estos materiales, no tienen una incidencia en la ECE. En la simulación se utilizó como una primera aproximación una densidad de estados efectiva de $2.5E+20$ [$1/cm^3$] igual para todos los materiales, y para ambas bandas. Para comprobar la incidencia de este parámetro utilizamos en el caso del Cu_2O , los valores de las densidades de estado calculados por primeros principios (Biccarri, 2010), constatando que la ECE calculada es de 25.12 %, sin variación apreciable (ver tabla 2).

La figura 6 corresponde a la celda Celda CuO_2 /Perovskita/ TiO_2 , que analizaremos de aquí en adelante. En ella se grafican los parámetros fotovoltaicos normalizados en función del offset, respecto del máximo que se obtiene para offset 0. Para el caso de valores positivos del offset, que es la situación real de los materiales estudiados en los cuales el MBV de la capa HTL está por encima del MBV de la perovskita, la razón principal por la que disminuye la ECE (ver la ecuación 2) es la caída de la tensión de circuito abierto (V_{oc}). El FF disminuye también pero mucho menos. La corriente de cortocircuito (I_{sc}) se mantiene prácticamente constante.

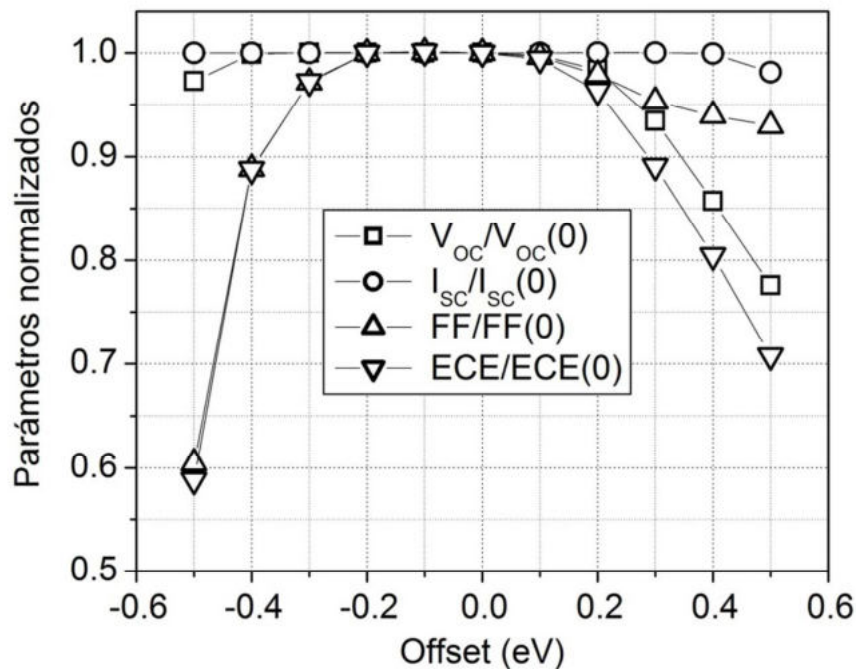


Figura 6. Valores relativos de V_{oc} , I_{sc} , FF y ECE a los valores correspondientes con Offset = 0 eV. Celda CuO_2 /Perovskita/ TiO_2

Este comportamiento resulta a primera vista contradictorio. El offset positivo (MBV HTL - MBV perovskita > 0) debería implicar un campo eléctrico favorable al pasaje de los huecos generados en la perovskita al HTL. En la figura 7 hemos graficado el MBV en la zona de la interfaz, para offset nulo, y para offset 0,5 eV, en función de X, la distancia en el eje longitudinal de la celda. El origen del eje X es la posición del contacto externo con la capa HTL. En $X = 400$ nm se ubica la interfaz HTL-perovskita. Se aprecia la barrera que se forma en el caso que corresponde a offset = 0.5 eV. Esta barrera de potencial dificulta el transporte de los huecos desde la perovskita hacia la capa HTL (hacia el origen del eje X). La barrera depende no sólo de las respectivas afinidades electrónicas que establecen el denominado offset, sino del dopaje de ambas capas, y de la tensión aplicada, que en la figura 7 corresponde a 0,9 V.

Cuanto mayor es la barrera de potencial, mayor es la recombinación en la zona de la interfaz, lo que provoca una disminución de V_{oc} , del FF y de la ECE. El incremento relativo de la recombinación entre los dos casos mencionados puede observarse en la figura 8

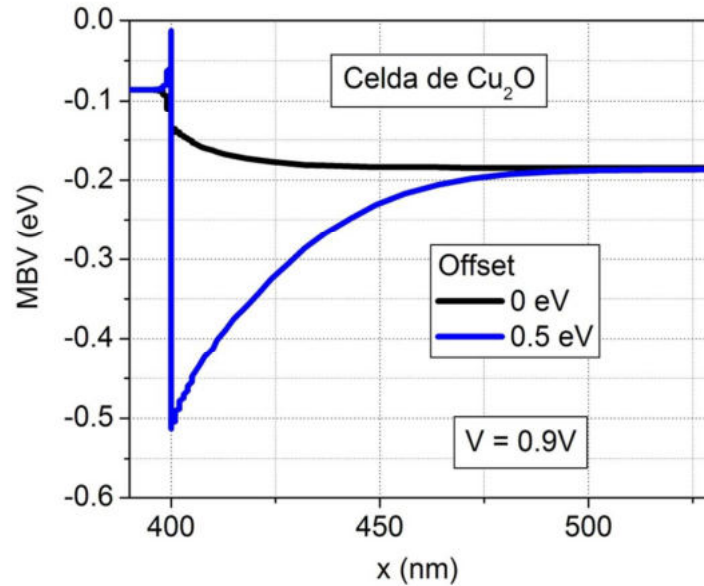


Figura 7. Máximo de la Banda de Valencia en la zona de la interfaz HTL-perovskita ($x = 400$ nm). Celda. CuO_2 /Perovskita/ TiO_2 Tensión aplicada 0.9 V. Se observa la barrera de potencial que se forma para los huecos que deben desplazarse hacia el origen del eje x (HTL)

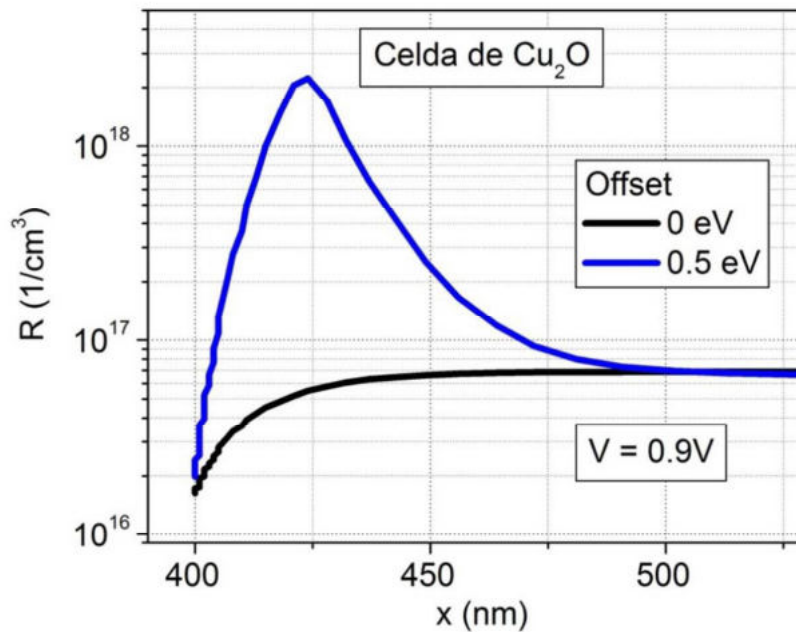


Figura 8. Recombinación total en la zona de la interfaz (400nm) para dos condiciones de Offset. Celda. CuO_2 /Perovskita/ TiO_2 Tensión aplicada 0.9 V

CONDICIÓN DE “BANDAS PLANAS”

La barrera de potencial que produce el incremento de la recombinación depende del offset entre las bandas y del dopaje de cada capa. Ajustando los dopajes (N_A), se puede obtener para un dado offset, una condición de banda plana en equilibrio termodinámico, reduciendo la barrera de potencial. Obtuvimos un rendimiento de 28% para la celda Cu_2O /Perovskita/ TiO_2 para $N_A = 5\text{E}+19$ $1/\text{cm}^3$ (Cu_2O) y $N_A = 5\text{E}+20$ $1/\text{cm}^3$ (perovskita). Este rendimiento disminuye a medida que se reducen los dopajes de ambas capas (manteniendo siempre una relación 1 a 10 para asegurar bandas planas).

La figura 9 muestra los parámetros fotovoltaicos para las celdas Cu_2O /Perovskita/ TiO_2 en función del dopado (concentración de aceptores, (N_A)) de la capa absorbente de perovskita. Se han representado los valores relativos respecto a su máximo. Como se puede observar todos los

parámetros aumentan con la concentración de aceptores (N_A), siendo la corriente en cortocircuito (I_{sc}) el menos sensible y la eficiencia de conversión (ECE) el mas sensible. La relación entre los dopajes de ambas capas (Cu_2O y perovskita) es en todos los casos 1 a 10 para matener la condición de banda plana

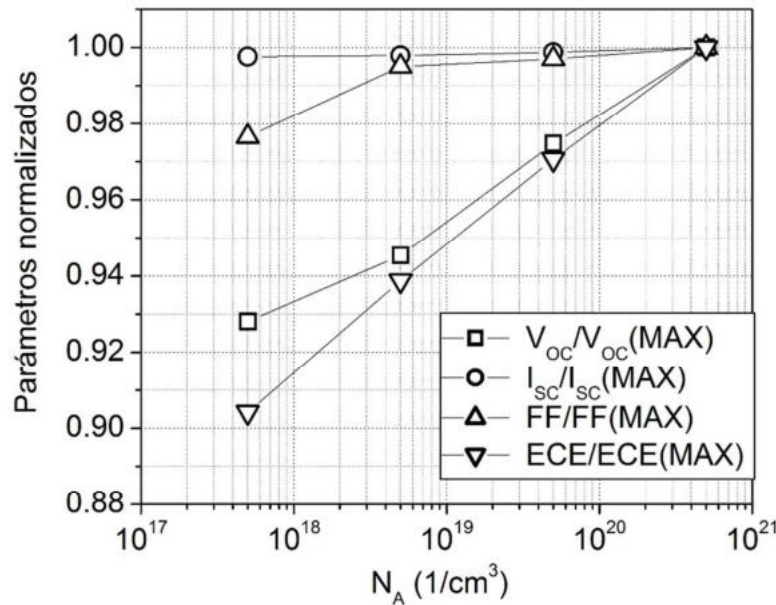


Figura 9. Valores de las características de la celda $CuO_2/Perovskita/TiO_2$ en función del dopaje de la capa de perovskita (N_A) relativos a los máximos obtenidos para el mayor N_A

CONCLUSIONES

Hemos simulado el comportamiento de una celda basada en perovskita de estructura planar p p n, con el SCAPS-1D para 4 materiales diferentes en la capa HTL. Hemos comparando su desempeño teórico con el de la celda que utiliza el spiro-OMeTAD como capa HTL, dejando fijas las otras dos capas. Una primera conclusión es que el rendimiento de esta estructura aún tendría margen para ser mejorado respecto de los prototipos informados en la literatura, que dan valores máximos del orden del 20%. Según nuestras simulaciones el efecto más influyente en la ECE es la barrera de potencial que se forma en la zona de la interfaz entre la capa HTL y la perovskita y. El alineamiento de los máximos de las bandas de valencia entre la capa HTL y la perovskita, que está directamente relacionado con el ancho de la banda prohibida (E_g) y la afinidad electrónica (X_e) de cada material, es clave para disminuir esta barrera. El otro factor que interviene es el dopaje de ambas capas. Obtuvimos en este caso una relación óptima de 1 a 10 entre el dopaje de la capa HTL y de la perovskita, para el caso de la celda $CuO_2/Perovskita/TiO_2$ manteniendo los parámetros de la capa ETL. También concluimos que a mayor dopaje de ambas capas, y siempre manteniendo esta relación, se obtienen mayores eficiencias, llegando al 28%. En este caso el nivel de Fermi en ambas capas se encuentra en el límite de las respectivas bandas de valencia. La movilidad de los huecos en la capa HTL juega un papel importante hasta cierto valor mínimo, superado el cual no tiene incidencia importante en la ECE. Las movilidades en todos los materiales semiconductores analizados superan ese mínimo, mientras que el material más usado a la fecha, el spiro-OMeTAD, está claramente por debajo, lo que implica que potencialmente puede ser superado en cuanto a la ECE

REFERENCIAS

- Adhikari, K, Gurung S., Bhattarai B., Marí Soucase, B. (2015). Comparative study on MAPbI₃ based solar cells using different electron transporting materials. *Phys. Status Solidi C*, 1–5 (2015)P hys. Status Solidi C, 1–5
- Ahirrao, P., Gosavi, S., Sonawane, S. y Patil, R. (2011). Wide band gap nanocrystalline CuSCN thin films deposited by modified chemical method. *Archives of Physics Reserchs. Scholars Reserchs Library*. ISSN : 0976-0970
- Biccari, F. (2010). Defects and Doping in Cu₂O. Scuola di Dottorato in Scienze Astronomiche, Chimiche, Fisiche e Matematiche “Vito Volterra”. Tesis doctoral
- Burgelman, M., Nollet P. y Degrave S. (2000). *Thin Solid Films*, 361 (2000) 527-532
- Chatterjee, S. y Pal, A. (2016). Introducing Cu₂O Thin Films as a Hole-Transport Layer in Efficient Planar Perovskite Solar Cell Structures. *J. Phys. Chem. C* 2016, 120, 1428–1437
- Deng Q., Han X., Gao T. , y Shao G. (2012). *J. Appl. Phys.* 112, 013523(1-8)
- Feng, L., Jun, Z., Junfeng, W., Yi, L., Mei, L., Shangfeng, Y., Bing, Z., Jianxi, Y. y Songyuan, D. (2014). Numerical Simulation: Toward The Design Of High-Efficiency Planar Perovskite Solar Cells. *Applied Physics Letters* 104, 253508 (2014); doi: 10.1063/1.4885367
- Green, M., Emery K., Hishikawa, Y., Warta, W. y Dunlop, E. (2015). *Prog. Photovolt.: Res. Appl.* 23 (7), 805-812
- Green, M., Ho-Baillie, A., y Snaith, H. (2014). The Emergence Of Perovskite Solar Cells.
- Hirasawa, M., Ishihara, T., Goto, T., Uchida, K., y Miura, M. (1994). *Physica B*. 201, 427
- Lee, M., Teuscher, J., Miyasaka, T., Murakami, T., y Snaith, H. (2103). *Science* 338, 643 (2012).
- Malerba C. Biccari F., Azanza Ricardo, C., D’Incau, M., Scardi P. y Mittiga, A. (2011). Absorption coefficient of bulk and thin film Cu₂O. *Solar Energy Materials & Solar Cells* 95 (2011) 2848– 2854.
- Noh, J., Im, S., Heo, J., Mandal, T., y Seok, S. (2013). *Nano Letters*. 13, 1764 (2013).
- Peng, L., Kai, T., Jingyi, T., Linsong, W., Gang, W., Shiping, J. y Yixin, L. (2015). Device Simulation Of Solid-State Perovskite Solar Cells. 31st European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition
- Poplavskyy, D. y Nelson J. (2003). *J. Appl. Phys.* 93, 341-346
- Sekkal W., y Zaoui, A. (2002). Monte Carlo study of transport properties in copper halides," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 315, pp. 201-209, 2002.
- Sirimanne, P., Rusop, M., Shirata, T., Soga, T., y Jimbo, T. (2002). Characterization of transparent conducting CuI thin films prepared by pulse laser deposition technique. *Chemical Physics Letters*, vol. 366, pp. 485-489
- Snaith, H. y Gratzel, M. (2007). *Adv. Mater.* 19, 3643 (2007).
- Sriram, S. y Thayumanavan, A. (2013). Structural, Optical and Electrical Properties of NiO Thin Films Prepared by Low Cost Spray Pyrolysis Technique *International Journal of Materials Science and Engineering* Vol. 1, No. 2 December 2013
- Stranks, D., Eperson, G., Grancini, G. Menelaou, C, Alcocer, M., Leijtens, T., Herz, L., Petrozza, A. y Snaith, H. (2013). *Science* 342, 341
- Sun, S., Salim, T., Mathews N., Duchamp, M., Boothrovd, C., Xing, G, Sun, T. y Lam, Y. (2013). *Energy Environ Sci*, (7), 399-407
- Ye, S., Sun, W., Li, Y., Yan, W., Peng, H., Bian, Z., Liu, Z. y Huang, C. (2015). CuSCN-Based Inverted Planar Perovskite Solar Cell with an Average PCE of 15.6. *Nano Lett.* 2015, 15, 3723–3728
- Zhou, Y. y Gray-Weale, A. (2016). A Numerical Model For Charge Transport And Energy Conversion Of Perovskite Solar Cells. *Phys.Chem.Chem.Phys.*, 2016, 18, 4476
- Zuo, C., Bolink, H., Hongwei H., Jinsong H., Cahen, D., y Ding, L. (2016). Advances in Perovskite Solar Cells. *Adv. Sci.* 2016, 1500324

ABSTRACT

The characteristics of the perovskite layer and its influence on the efficiency of perovskite solar cells have been investigated recently in several research works. There are also many published studies in which the performance of different materials for the electron transport layer (ETL) in these devices is compared. In this paper, the main parameters of perovskite solar cells are analyzed by considering different materials for the hole transport layer (HTL). The study is carried out theoretically by applying the device simulation code SCAPS-1D. We have found a strong dependence of the cell efficiency on the energy difference between the top of the valence band in the perovskite and the HTL, and on the doping level in both layers. Efficiencies in the order of 28% have been obtained for a flatband condition at the interface perovskite-HTL. The carrier mobilities at the HTL have been shown to degrade the efficiency only for very low mobility values. The high efficiency calculated demonstrates the promising potentiality of this technology.

Keywords: solar energy, perovskites, Hole Transporting Layer (HTL), numerical simulation.