



Factores de estabilidad para perovskitas empleadas en celdas solares

Arnulfo Montoya Moreno¹, Óscar Olvera Neria¹

¹Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco

Tabla de Contenido

1	Resumen.....	3
1.1	Palabras Clave	3
2	Abstract.....	3
2.1	Keywords:.....	3
3	Referencias.....	3

1 Resumen

Uno de los principales retos de la humanidad es satisfacer la demanda energética. La energía solar constituye una fuente de energía renovable y sustentable. Entre los semiconductores empleados en las celdas solares fotovoltaicas se encuentran las perovskitas. Las perovskitas se obtienen como películas delgadas en condiciones suaves de síntesis, a bajo costo, y tienen eficiencias de conversión de la energía solar de hasta 22%, sin embargo, presenta problemas de estabilidad en presencia de agua y de toxicidad. Tienen una estructura haluro órgano-metálica, ABX_3 . A y B son dos cationes: uno orgánico monovalente A^+ , en tanto que B^{2+} representa un catión divalente metálico y X es un anión de halógeno. El catión A ocupa la posición central, y el B los vértices del cubo, rodeado por un octaedro X_6 . La perovskita más estudiada es el plomo yoduro de metilamonio $CH_3NH_3PbI_3$. Para mejorar la estabilidad del plomo yoduro de metilamonio, así como para reducir la toxicidad se propusieron análogos a través de las sustituciones $A = [NH_4]^+$, $[NH_3OH]^+$, $[NH_3NH_2]^+$, $[(CH_2)_3NH_2]^+$, $[CH(NH_2)_2]^+$, $[C_3N_2H_5]^+$, $[(CH_3)_2NH_2]^+$, $[NC_4H_8]^+$, $[(CH_3CH_2)NH_3]^+$, $[(NH_2)_3C]^+$, $[(CH_3)_4N]^+$, $[(HN)(CH_2)_3S]^+$, $[C_7H_7]^+$, Cs^+ , MA^+ , FA^+ , Rb^+ , K^+ y sustituir el Pb por $B = Be^{2+}$, Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Mn^{2+} , Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Pd^{2+} , Pt^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Hg^{2+} , Ge^{2+} , Sn^{2+} , Eu^{2+} , Tm^{2+} , Yb^{2+} . Se emplearon criterios geométricos, factor de tolerancia de Goldschmidt, para reducir la lista de los análogos, resultando al menos 10 combinaciones diferentes viables.

1.1 Palabras Clave

Celda solar fotovoltaica, perovskita, factor tolerancia, estabilidad.

2 Abstract

One of the main challenges for humanity is to satisfy the energy demand. Solar energy is a renewable and sustainable source of energy. Among the semiconductors used in photovoltaic solar cells are the perovskites. Perovskites are obtained as thin films under mild synthesis conditions, at low cost, and have solar energy conversion efficiencies of up to 22%. However, they present stability problems in the presence of water and toxicity. They have an organo-metallic halide structure, ABX_3 . A and B are two cations: an organic monovalent A^+ , while B^{2+} represents a metallic divalent cation and X is a halogen anion. The cation A occupies the central position, and the B the vertices of the cube, surrounded by an octahedron X_6 . The most studied perovskite is the lead methylammonium iodide $CH_3NH_3PbI_3$. To improve the stability of lead methylammonium iodide, as well as to reduce toxicity, analogues were proposed through substitutions $A=[NH_4]^+$, $[NH_3OH]^+$, $[NH_3NH_2]^+$, $[(CH_2)_3NH_2]^+$, $[CH(NH_2)_2]^+$, $[C_3N_2H_5]^+$, $[(CH_3)_2NH_2]^+$, $[NC_4H_8]^+$, $[(CH_3CH_2)NH_3]^+$, $[(NH_2)_3C]^+$, $[(CH_3)_4N]^+$, $[(HN)(CH_2)_3S]^+$, $[C_7H_7]^+$, Cs^+ , MA^+ , FA^+ , Rb^+ , and K^+ and substitute Pb by $B = Be^{2+}$, Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Mn^{2+} , Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Pd^{2+} , Pt^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Hg^{2+} , Ge^{2+} , Sn^{2+} , Eu^{2+} , Tm^{2+} , and Yb^{2+} . Geometric criteria, Goldschmidt's tolerance factor, were used to reduce the list of analogs, resulting in at least ten different viable combinations.

2.1 Keywords:

Photovoltaic solar cell, perovskite, tolerance factor, stability.

3 Referencias

1. Salim M., C.M., Hossain M., and Islam M., *A Micro Review on prospects and Challenges of Perovskite Materials in Organic-Inorganic Hybrid Solar Cell Applications* Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures, 2015: p. 1289 - 1302.

2. Kieslich G., Sun S. and Cheetham A., *An extended Tolerance Factor approach for organic–inorganic perovskites*, DOI: 10.1039/c5sc00961h, Chem. Sci., 6, 3430–3433, 2015.
3. Zhen F., Sun K. and Wang J., *Perovskites for photovoltaics: a combined review of organic–inorganic halide perovskites and ferroelectric oxide perovskites*, DOI: 10.1039/c5ta04235f, J. Mater. Chem. A, 2015.
4. Travis W., Glover M., Bronstein H., Scanlonbc D. and Palgrave R., *On the application of the tolerance factor to inorganic and hybrid halide perovskites: a revised System*, DOI: 10.1039/c5sc04845a, Chem. Sci., 7, 4548–4556, 2016.
5. Shannon R., *Revised Effective Ionic Radii and Systematic Studies of Interatomic Distances in Halides and Chalcogenides*, Acta Cryst., A32, 751, Central Research and Development Department, Experimental Station, E. L Du Pont de Nemours and Company, 1976.