



Conference: Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables -
Mantenimiento Industrial - Mecatrónica e Informática

Booklets



RENIECYT

Registro Nacional de Instituciones
y Empresas Científicas y Tecnológicas

2015-20795

CONACYT

LATINDEX - Research Gate - DULCINEA - CLASE - Sudoc - HISPANA - SHERPA UNIVERSIA - E-Revistas - Google Scholar
DOI - REBID - Mendeley - DIALNET - ROAD - ORCID

Title: Obtención de Propiedades Optoelectrónicas de Celdas Solares de Perovskitas por Medio de Simulación

Authors: Israel ALMEIDA, D. ESPARZA, J. M. RIVAS

Editorial label ECORFAN: 607-8324
BCIERMIMI Control Number: 2017-02
BCIERMIMI Classification (2017): 270917-0201

Pages: 12
Mail: 35162018@uaz.edu.mx
RNA: 03-2010-032610115700-14

ECORFAN-México, S.C.
244 – 2 Itzopan Street
La Florida, Ecatepec Municipality
Mexico State, 55120 Zipcode
Phone: +52 1 55 6159 2296
Skype: ecorfan-mexico.s.c.
E-mail: contacto@ecorfan.org
Facebook: ECORFAN-México S. C.

Twitter: @EcorfanC

www.ecorfan.org

Holdings

Bolivia	Honduras	China	Nicaragua
Cameroon	Guatemala	France	Republic of the Congo
El Salvador	Colombia	Ecuador	Dominica
Peru	Spain	Cuba	Haití
Argentina	Paraguay	Costa Rica	Venezuela
Czech Republic			



Agradecimientos

- Este trabajo fue apoyado por una beca en el Programa Nacional de Posgrados de Calidad, CONACyT (I. A. D.)
- Por el programa para el desarrollo profesional docente del nivel superior (Prodep) número de proyecto F-PROMEP-38/Rev-04 SEP-23-005
(D. E. S.)



**Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables,
Mantenimiento Industrial, Mecatrónica e Informática**

2017



Contenido

- Introducción
- Metodología
- Resultados
- Conclusiones



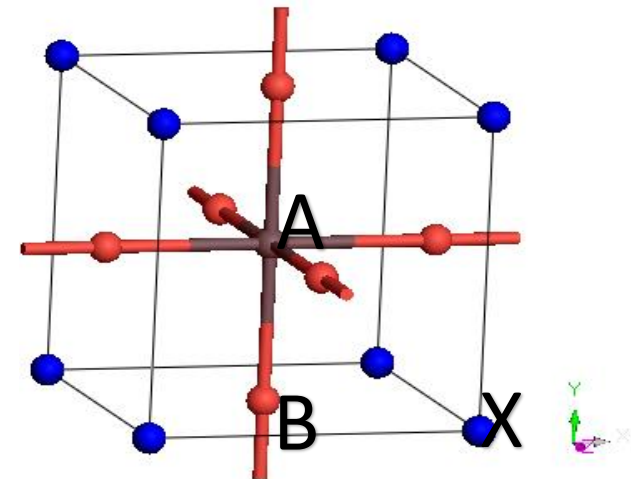
**Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables,
Mantenimiento Industrial, Mecatrónica e Informática**

2017



Introducción

- Las celdas solares de perovskitas se basan en la fórmula MAPbX_3 donde MA corresponde al metilamonio (CH_3NH_3) y X puede ser I, Cl o Br
- Alta eficiencia de fotoconversión
- Bajo costo de fabricación





Metodología

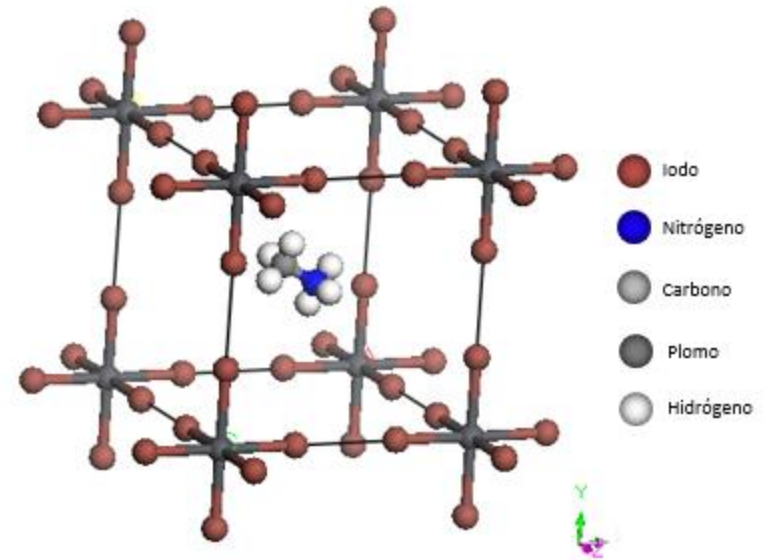
- Se utilizó como herramienta de trabajo el software de computadora *Materials Studio 4.4*, con el módulo CASTEP se simularon los materiales semiconductores para esta investigación





Estructura cristalina de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$

Arreglo atómico de la celda unitaria de la forma $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$, donde X es I, Br o Cl. Es una estructura cúbica, en el centro se encuentra la parte orgánica CH_3NH_3 , en las aristas del cubo esta la parte inorgánica Pb y sobre de ella se encuentran los halógenos (I, Br o Cl).

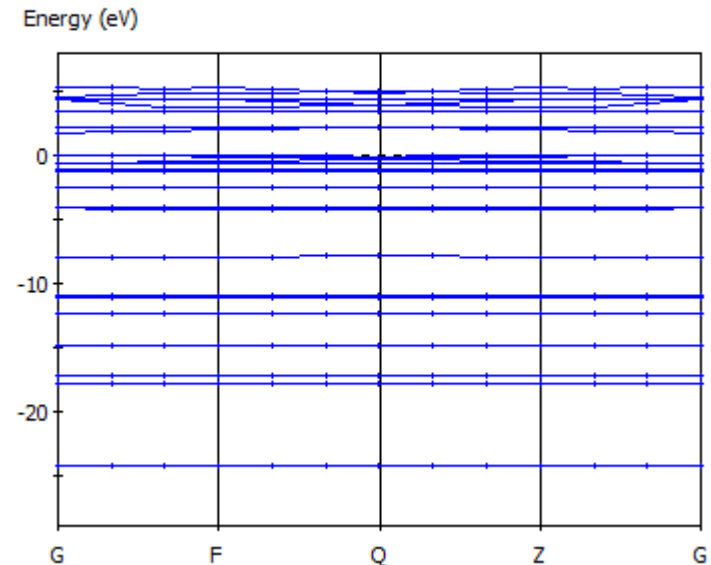




Estructura de bandas

Da información de la conductibilidad en los materiales; mediante las bandas de conducción (electrones que participan en las uniones atómicas) y la banda de valencia (electrones libres para la conducción), cuando se cruzan o se acercan, hay la posibilidad de que los electrones en la banda de valencia pasen a la de conducción

CASTEP Band Structure
Band gap is 1.804 eV

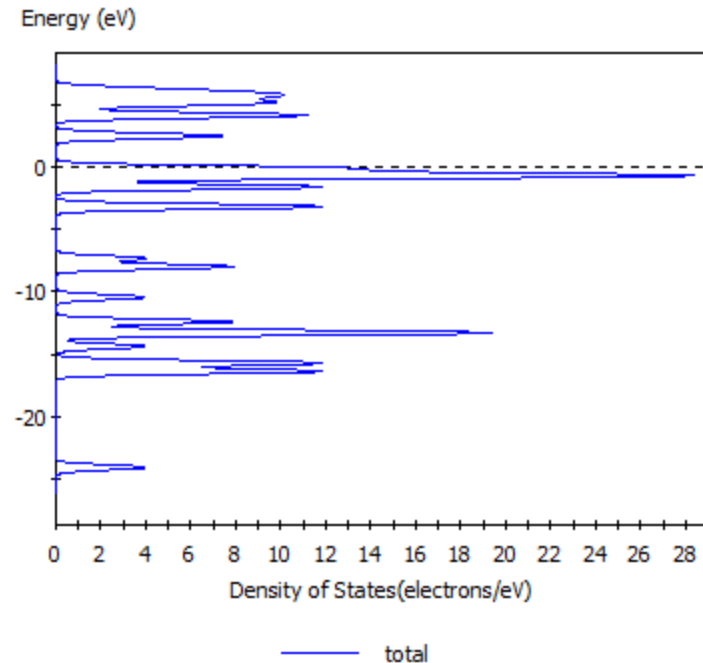




Densidad de estados

CASTEP Density of States

Según la densidad de estados, se obtiene donde hay la mayoría de portadores que pueden ser utilizados para generar la corriente eléctrica, pasando de la banda de valencia a la de conducción.





Resultados

Tabla 1. Brecha energética de estructuras $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$.

Estructura	Brecha energética
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	1.58 eV
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$	1.804 eV
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$	2.2 eV





Resultados



Tabla 2. Comparación de la brecha energética entre estructura cúbica, tetragonal y ortorómbica de la estructura CsPbX₃ en eV.

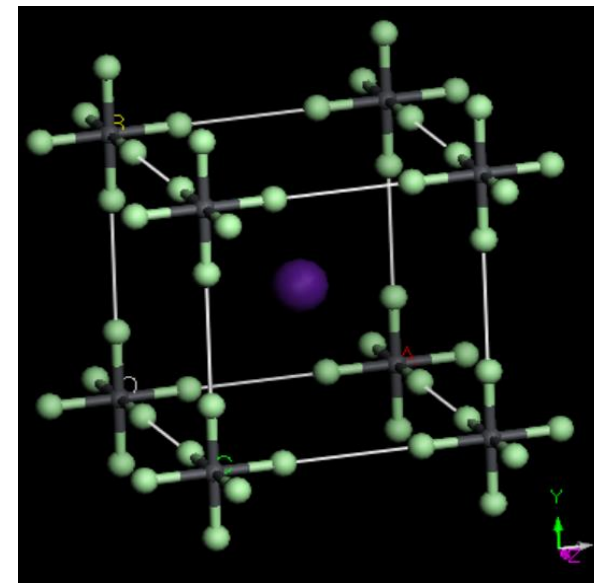
Estructura	Cúbica	Tetragonal	Ortorómbica
CsPbI ₃	1.83	1.84	1.99
CsPbBr ₃	2.39	2.54	2.38
CsPbCl ₃	3.51	2.80	2.52



Resultados

Tabla 3. Brecha energética de las estructuras cristalinas de CsPbX₃ encontradas en la literatura.

Estructura	Brecha energética en la literatura
CsPbI ₃	1.73 eV
CsPbBr ₃	2.36 eV
CsPbCl ₃	2.98 eV



- Cesio
- X
- Plomo



Conclusiones

- Con el cambio en el halogenuro se obtienen diferentes propiedades ópticas.
- Para $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$, donde X es Cl, Br o I se obtuvieron brechas energéticas de 1.58, 1.804 y 2.2 eV respectivamente.
- La estructura $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ presenta mejores propiedades de absorción y es el mejor candidato para aplicaciones en celdas solares.





Conclusiones



- La estructura CsPbI_3 es la que presenta mejores condiciones de absorción para ser aplicada en celdas solares.
- Mientras que las otras estructuras CsPbBr_3 y CsPbCl_3 presentan absorción y emisión en la parte visible





ECORFAN®

© ECORFAN-Mexico, S.C.

No part of this document covered by the Federal Copyright Law may be reproduced, transmitted or used in any form or medium, whether graphic, electronic or mechanical, including but not limited to the following: Citations in articles and comments Bibliographical, compilation of radio or electronic journalistic data. For the effects of articles 13, 162,163 fraction I, 164 fraction I, 168, 169,209 fraction III and other relative of the Federal Law of Copyright. Violations: Be forced to prosecute under Mexican copyright law. The use of general descriptive names, registered names, trademarks, in this publication do not imply, uniformly in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protector in laws and regulations of Mexico and therefore free for General use of the international scientific community. BCIERMIMI is part of the media of ECORFAN-Mexico, S.C., E: 94-443.F: 008- (www.ecorfan.org/ booklets)