

## OPTIMIZACIÓN NUMÉRICA DE LA FOTOCORRIENTE EN CELDAS SOLARES TANDEM DE PEROVSKITAS/SILICIO

M. Soldera<sup>1</sup>, M. Troviano<sup>2</sup>, K. Taretto<sup>3</sup>.

PROBIEN, Dto. de Electrotecnia, CONICET, Fac. de Ingeniería, Univ. Nacional del Comahue,  
Buenos Aires 1400, 8300 Neuquén, Argentina

Tel. 0299-4488305 – e-mail: marcos.soldera@fain.uncoma.edu.ar

*Recibido 14/08/16, aceptado 11/10/16*

**RESUMEN:** El constante aumento de la eficiencia de las celdas solares de silicio ha convertido la generación fotovoltaica en una fuente de energía competitiva. Sin embargo la eficiencia récord de estas celdas se encuentra ya muy cercana al límite teórico y por ello se ha propuesto preparar celdas tandem combinando celdas de silicio con celdas de perovskitas orgánicas-inorgánicas. Estas últimas celdas tienen altas eficiencias, bajos costos de fabricación y son compatibles con la tecnología del silicio. En este trabajo, aplicamos un modelo óptico para optimizar los materiales de las capas de contacto de la celda tandem así como los espesores de las capas involucradas. Las simulaciones nos permiten identificar y cuantificar las pérdidas ópticas asociadas a la reflexión y absorción en las capas funcionales. El algoritmo de optimización nos permitió aumentar la fotocorriente hasta un 7% respecto de las celdas reportadas en la literatura.

**Palabras clave:** celdas solares tandem, perovskita, modelado óptico, celda solar HIT.

### INTRODUCCION

La tecnología de celdas solares de silicio cristalino (c-Si) se ha desarrollado durante más de 40 años y ha permitido la expansión de la generación fotovoltaica como una fuente de energía renovable, confiable y competitiva. Este continuo progreso en investigación y desarrollo ha dado lugar a celdas solares con un récord de eficiencia del 25.6% (Masuko et al. 2014), muy cercana al límite de eficiencia ideal del 33% impuesta por la teoría del equilibrio detallado (Shockley y Queisser 1961). Una vía para aumentar la eficiencia de estas celdas, y por lo tanto para disminuir el costo de la energía generada, es fabricar celdas en configuración tandem utilizando una celda eficiente y de bajo costo ubicada por delante de la celda de silicio. Las celdas de perovskitas orgánicas-inorgánicas (Green et al. 2014) poseen las ventajas de tener bajos costos de fabricación y una eficiencia elevada del 20% (Yang et al. 2015), además de la posibilidad de prepararlas directamente sobre la celda de silicio (Mailoa et al. 2015; Werner et al. 2015). En particular la perovskita de trioduro de plomo metilamonio ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ) tiene un ancho de la banda prohibida de  $E_g = 1.55$  eV, que en combinación con una celda de silicio, ( $E_g = 1.12$  eV) en configuración tandem en serie, presenta una eficiencia máxima teórica del 40% (Jia et al. 2016).

Comúnmente las celdas que componen la celda tandem son conectadas eléctricamente en serie formando un dispositivo de dos terminales. Esta configuración es apropiada desde un punto de vista tecnológico dado que permite una integración monolítica durante el proceso de fabricación y una sencilla interconexión con otras celdas para formar módulos solares. El requisito fundamental para obtener celdas tandem de dos terminales eficientes es lograr que las fotocorrientes entregadas por las celdas superior e inferior coincidan. El cumplimiento de esta restricción a través de una optimización rigurosa de las capas activas y de contacto minimiza las pérdidas de corriente por discrepancia y evita el desperdicio de material. Sin embargo esta tarea es relativamente compleja dada la interferencia de la onda electromagnética dentro de la celda producto del gran número de capas de contacto con diferentes propiedades ópticas y espesores variables entre unos pocos nanómetros y un micrón, es decir del orden de la longitud de onda de la luz visible. En este trabajo aplicamos un modelo óptico

<sup>1</sup> Investigador Asistente CONICET y Ayudante de Primera UNComahue

<sup>2</sup> Investigador Asistente CONICET y Jefe de Trabajos Prácticos UNComahue

<sup>3</sup> Investigador Adjunto CONICET y Profesor Titular UNComahue

convencional para sistemas de múltiples capas delgadas modificado para incorporar también capas gruesas con espesores de decenas o centenas de micrones. El objetivo de las simulaciones es encontrar la combinación óptima de espesores de las capas que permiten maximizar la fotocorriente neta de la celda tandem así como entender cuáles factores influyen en las pérdidas ópticas de estas celdas y en qué proporción.

## MODELO ÓPTICO

Tomamos como base para el modelado la celda solar tandem de la referencia (Albrecht et al. 2016) formada por una celda superior de perovskita  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  de tecnología convencional junto con una celda de silicio de heterojuntura con capa delgada intrínseca (HIT) (Masuko et al. 2014). En la Figura 1 se muestran esquemáticamente las capas que componen esta celda. Por encima del contacto frontal de ITO se coloca una delgada capa de LiF como capa antirreflejante. La capa conductora de huecos (HTL) utilizada comúnmente es el material orgánico spiro-OMeTAD (spirofluorene linked methoxy triphenylamines). Si bien este material tiene una alta conductividad de huecos, absorbe fuertemente las longitudes de onda comprendidas entre 300 nm y 430 nm. Por ello, se propone cambiar esta HTL orgánica por una capa inorgánica con mayor transparencia en el espectro visible como el CuSCN o  $\text{NiO}_x$  (Jeng et al. 2014; Jung et al. 2015). Los parámetros a optimizar en nuestro modelo son los espesores de todas las capas a excepción de las de silicio amorfo (a-Si) y el contacto posterior de Ag que son fijados a 30 nm y 100 nm, respectivamente. En la Tabla 1 se detallan los espesores descritos en la referencia (Albrecht et al. 2016) y el intervalo de variación de los espesores dentro del rango de relevancia tecnológica usado en nuestras simulaciones. La capa de silicio cristalino se varía entre 1  $\mu\text{m}$  y 200  $\mu\text{m}$ , representando una transición suave entre una celda solar de capa delgada y una basada en oblea. Definiremos como capa delgada de silicio cuando el espesor de este material sea menor a 50  $\mu\text{m}$ , y como silicio grueso u oblea cuando sea mayor a 50  $\mu\text{m}$ . Esta clasificación arbitraria tiene importantes implicancias en el modelo óptico, dado que trataremos la propagación coherente de la luz incidente en las capas delgadas de la celda y la propagación incoherente en silicio grueso. Desde una perspectiva tecnológica, los métodos de fabricación de celdas de silicio delgado y basado en obleas son completamente diferentes. Usualmente, las capas delgadas de silicio son depositadas mediante deposición química desde la fase gaseosa promovida por plasma (PECVD) (Shah et al. 2004), mientras que el silicio grueso se obtiene a partir de rebanar lingotes de silicio mono o policristalino con espesores típicos de 200-300  $\mu\text{m}$  con técnicas convencionales de corte (Green 2003) o incluso alcanzando espesores tan delgados como 50  $\mu\text{m}$  con técnicas avanzadas (Willeke 2002).

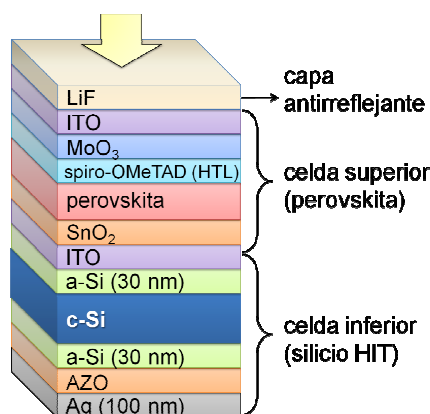


Figura 1: Esquema de la celda tandem perovskita/HIT a simular. Los parámetros a optimizar son los espesores de todas las capas a excepción del contacto posterior de Ag y las capas de a-Si.

Las simulaciones realizadas en este trabajo son obtenidas con el método de matriz de transferencia (MMT) (Pettersson et al. 1999), asumiendo que todos los materiales son homogéneos, lineales e isotrópicos, y todas las interfaces son paralelas y ópticamente planas. Se asume que la onda electromagnética incidente es una onda plana con polarización perpendicular al plano de incidencia y su intensidad y forma espectral coincide con el espectro estándar AM1.5G 1000  $\text{W}/\text{m}^2$ . Modificamos el MMT para incluir capas incoherentes aplicando la estrategia de desplazamiento de fase equidistante (Santbergen et al. 2013). Esta característica simula  $N$  iteraciones con ondas planas incidentes con su

fase separada por  $360^\circ/N$ . Luego los campos eléctricos resultantes de cada simulación son promediados. Esta sencilla implementación requiere normalmente solo de tres a cinco iteraciones para modelar las capas incoherentes.

La potencia electromagnética absorbida en una posición  $x$  dentro de una capa con índice de refracción complejo  $\tilde{n} = n + i\kappa$  es directamente proporcional a la intensidad del campo eléctrico  $E$  según

$$Q(x, \lambda) = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \alpha(\lambda) n(\lambda) |E(x, \lambda)|^2, \quad (1)$$

donde  $\lambda$  es la longitud de onda,  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío,  $\epsilon_0$  la permitividad del vacío, y  $\alpha = 4\pi\kappa/\lambda$  el coeficiente de absorción del material. En las celdas tandem analizadas aquí, los materiales fotoactivos son, por un lado, la perovskita en la celda superior y, por otro lado, el c-Si y las capas frontal y posterior de a-Si en la celda inferior. La tasa de fotogeneración de pares electrón-hueco en la capa fotoactiva  $i$  está dada por

$$G_i(x, \lambda) = Q_i(x, \lambda) / (hc / \lambda), \quad (2)$$

donde  $h$  es la constante de Planck. Luego, la fotocorriente producida por el material fotoactivo  $i$  se calcula como la integral de la tasa de fotogeneración en el rango espectral estudiado y el espesor  $d_i$  de la capa correspondiente según

$$J_{foto,i} = q \int_{300}^{1200} \int_{d_i} f_{c,i} G_i(x, \lambda) dx d\lambda, \quad (3)$$

donde  $q$  es la carga elemental y  $f_c$  es la eficiencia de recolección de portadores de cada capa fotoactiva. Asumimos que en condiciones de cortocircuito la recolección de portadores es perfecta y por lo tanto  $f_c = 1$  para todas las capas fotoactivas. Finalmente, dado que las celdas de perovskita y de silicio están en serie la corriente neta estará dominada por la menor de las corrientes.

Capa	Espesor según la referencia (Albrecht et al. 2016)	Rango permitido de variación
LiF	~100 nm	20 – 200 nm
ITO frontal	80 nm	60 – 200 nm
MoO <sub>3</sub>	27 nm	5 – 50 nm
spiro-OMeTAD	~300 nm	150 – 450 nm
CuSCN	-	300 – 900 nm
NiO <sub>x</sub>	-	45 – 135 nm
perovskita	~500 nm	100 – 600 nm
SnO <sub>2</sub>	15 nm	5 – 60 nm
ITO posterior	80 nm	60 – 200 nm
a-Si frontal y posterior	~30 nm	30 nm
c-Si	250 $\mu$ m	1 – 200 $\mu$ m
AZO	70 nm	50 – 200 nm
Ag	200 nm	100 nm

*Tabla 1: Espesores de las capas tomados como referencia para los dispositivos y el rango de espesores permitidos para adoptar en las simulaciones.*

Como fue descrito anteriormente, las fotocorrientes entregadas por las celdas superior e inferior deben coincidir dado que se prevé una integración monolítica y conexión eléctrica en serie. El cumplimiento de este requisito en el marco de este problema físico puede lograrse utilizando algún algoritmo de optimización que tenga como característica la posibilidad de evaluar diversos mínimos locales antes de encontrar el mínimo global. Para abordar este problema utilizamos el algoritmo meta heurístico de recocido simulado capaz de encontrar un mínimo global en un espacio de búsqueda extenso (Aarts y

Korst 1988; Aarts et al. 2005). Este método de optimización usa como variables de búsqueda los espesores de la perovskita y el resto de las capas de contacto, a excepción del Ag y las capas de a-Si, como fue explicado más arriba. Se considera que la resolución mínima es 1 nm y por lo tanto se asume que los espesores son variables discretas. Definimos la función objetivo, es decir la variable que el algoritmo debe minimizar, teniendo en cuenta que las fotocorrientes de las celdas individuales deben ser, simultáneamente, grandes e iguales entre sí. Con esta consideración la función objetivo está dada por

$$\Lambda = \frac{|J_{sup} - J_{inf}|}{2} - \sqrt{J_{sup} J_{inf}}, \quad (4)$$

donde  $J_{sup}$  y  $J_{inf}$  son las fotocorrientes entregadas por las celdas superior e inferior, respectivamente. El primer término en la ecuación (4) es minimizada cuando las corrientes coinciden, mientras que el segundo término se minimiza cuando ambas corrientes son grandes.

## RESULTADOS

### Dispositivos sin optimizar

Simulamos la celda tandem descrita en la Figura 1 de la referencia (Albrecht et al. 2016). La Figura 2 muestra las fotocorrientes de las celdas superior (perovskita) con líneas negras e inferior (silicio) con líneas grises en función del espesor de la perovskita usando tres HTL diferentes: (a) CuSCN de 600 nm de espesor, (b) NiO<sub>x</sub> (90 nm) y (c) spiro-OMeTAD (300 nm). El espesor de la capa de silicio es usado como parámetro variable entre 1 μm y 200 μm. Cabe destacar que en todos los casos la corriente de la celda superior depende muy débilmente del espesor del silicio y por lo tanto mostramos en la Figura 2 solamente la corriente de la celda de perovskita para un espesor de silicio de 100 μm (línea negra). Las estrellas de la Figura 2(c) corresponden a valores reportados en la literatura de celdas tandem similares (Werner et al. 2015; Albrecht et al. 2016).

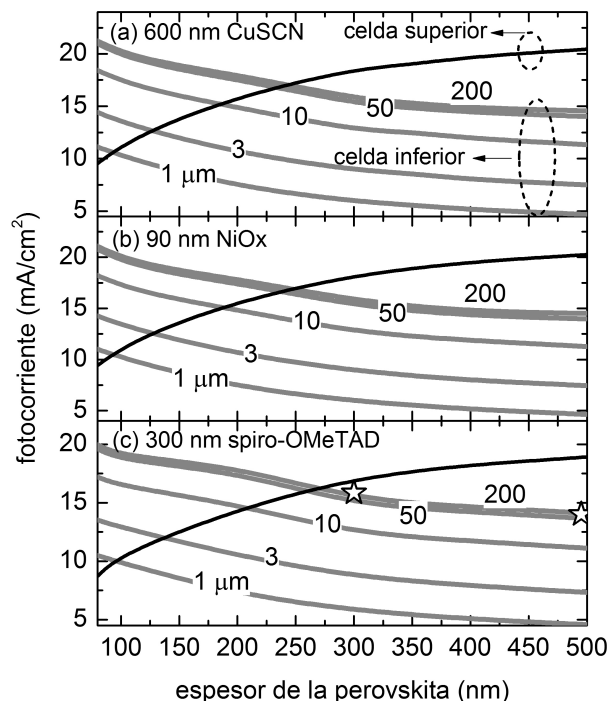


Figura 2: Fotocorrientes entregadas por las celdas superior (líneas negras) e inferior (grises) de la celda tandem. El parámetro de las simulaciones es el espesor de la capa de silicio. Los materiales utilizados se corresponden a la celda de la referencia (Albrecht et al. 2016). Se simularon tres materiales conductores de huecos diferentes: (a) CuSCN, (b) NiO<sub>x</sub> y (c) spiro-OMeTAD. Las estrellas corresponden a valores experimentales reportados en la literatura.

Considerando que la celda tandem se diseña como un dispositivo de dos terminales y la conexión eléctrica entre las dos celdas es en serie, las corrientes entregadas por las celdas deben coincidir. En la Figura 2 esta condición se verifica en las intersecciones entre las líneas negras y grises. Para una mejor visualización, mostramos en la Figura 3 las corrientes netas de las celdas tandem en función del espesor del silicio para los dispositivos con diferentes HTL. Las celdas con CuSCN y NiO<sub>x</sub> como HTL entregan mayores fotocorrientes que las celdas con spiro-OMeTAD. Este resultado surge principalmente de la mayor absorbancia de la capa de spiro-OMeTAD en comparación con los otros HTL como se muestra en el recuadro interno de la Figura 3 para celdas tandem con 200 μm de espesor de silicio. Junto a las absorbancias de cada capa se indica la pérdida de fotocorriente asociada a la absorbancia de cada HTL. Cabe destacar que las variaciones en los espesores del silicio y la perovskitas no influyen significativamente en las pérdidas de fotocorriente asociadas a los HTL, ya que como se muestra en la Figura 1, los HTL se ubican por delante de todas las capas fotoactivas.

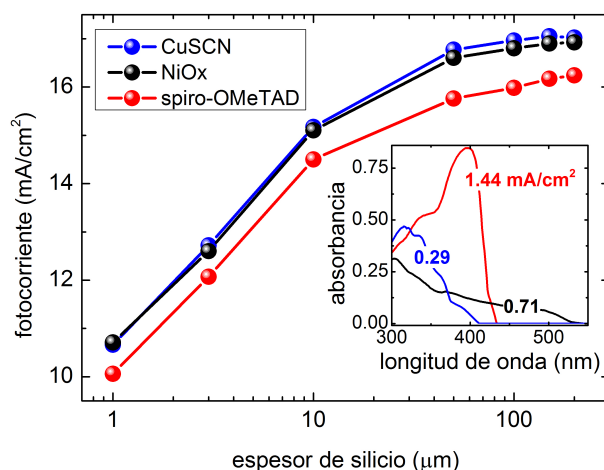


Figura 3: Fotocorriente de las celdas tandem con distintas capas conductores de huecos (HTL) en función del espesor del silicio cristalino. En el recuadro interno se muestra la absorbancia de cada HTL simulada junto con la pérdida de corriente asociada.

#### Dispositivos optimizados por recocido simulado

La Figura 4 muestra la corriente neta de las celdas tandem optimizadas con el algoritmo de recocido simulado (esferas negras) y las celdas sin optimizar (esferas grises) en función del espesor de silicio usando como HTL (a) CuSCN, (b) NiO<sub>x</sub> y (c) spiro-OMeTAD. También se muestra con líneas a trazos los correspondientes aumentos relativos (eje derecho) luego de la optimización de los espesores de las capas funcionales. Los espesores optimizados se encuentran tabulados en las Tablas 2, 3 y 4 del Apéndice. Notamos que la optimización a través de una adecuada selección de espesores de capas funcionales permite una mejora en la fotocorriente de hasta un 7%.

La Figura 5 muestra la eficiencia cuántica externa (ECE) ideal (fila superior), es decir suponiendo recolección perfecta de portadores, de las celdas de perovskita (líneas negras) y de silicio (líneas rojas), y las absorbancias de las capas funcionales, también llamadas parasitarias (fila inferior). Las celdas tandem simuladas tienen como HTL al CuSCN (columna izquierda), NiO<sub>x</sub> (columna central) y spiro-OMeTAD (columna derecha). Las celdas con 1 μm de silicio de capa delgada son representadas con líneas continuas, mientras que las líneas a trazos corresponden a los dispositivos basados en obleas de silicio de 200 μm. También se señala en la fila superior la fotocorriente entregada por cada celda. De los gráficos de la fila superior observamos que la perovskita absorbe eficientemente las longitudes de onda menores a 600 nm. Por otro lado, el espectro rojo-infrarrojo es absorbido muy débilmente por esta capa y por ende mayormente transmitido a la celda de silicio. Las ECE de los dispositivos con 1 μm de silicio presentan claras oscilaciones producto de la interferencia de la onda electromagnética al sufrir reflexiones entre las interfaces del dispositivo en forma análoga a una cavidad resonante (Lin et al. 2015). La ocurrencia de estas oscilaciones comienza a partir de longitudes de onda mayores a 550 nm, donde el camino óptico dentro del silicio coincide con el doble del espesor del mismo. Es decir, los fenómenos de interferencia se originan cuando la luz viaja a través del silicio hacia el contacto posterior, se refleja y se propaga hacia atrás sin absorberse completamente. Por otro lado, se observa que las ECE de las celdas basadas en silicio de 200 μm no presentan oscilaciones, dado que la

aproximación incoherente usada en silicio grueso atenúa todas las oscilaciones ficticias del método. En la fila inferior de la Figura 5 observamos que las celdas con una capa delgada de silicio tienen mayor absorbancia parasitaria que los dispositivos basados en obleas. Como se indica junto a las absorbancias parasitarias de la Figura 5, las pérdidas de fotocorriente asociadas a la absorción en las capas de contacto en celdas de silicio grueso son aproximadamente la mitad a las correspondientes a las celdas de silicio delgado.

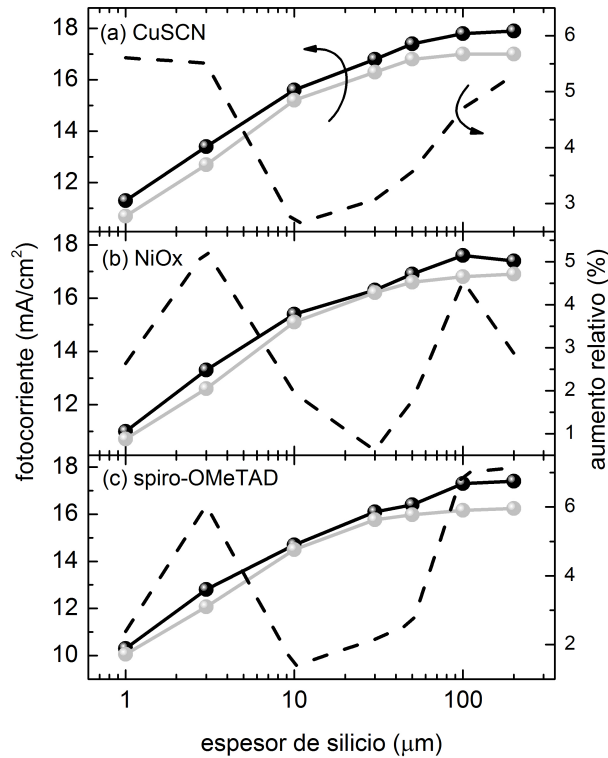


Figura 4: Fotocorriente neta para celdas tandem con el sistema de capas según la referencia (Albrecht et al. 2016) (esferas grises) y optimizadas con el algoritmo de recocido simulado (esferas negras) con distintos HTL.

#### Influencia de la capa antirreflejante

La capa superior de LiF cumple la función de capa antirreflejante debido a que tiene un índice de refracción  $n \approx 1.4$  intermedio entre el del aire ( $n = 1$ ) y el del contacto frontal de ITO ( $n \approx 1.5 - 2.2$ ). La Figura 6 muestra la fotocorriente de la celda tandem optimizada usando CuSCN como HTL con y sin LiF, y la correspondiente pérdida de fotocorriente asociada a la reflexión de la luz incidente. Las celdas fueron optimizadas para cada espesor de silicio. El aumento de fotocorriente obtenido a partir de usar LiF es aproximadamente de 1-1.5 mA/cm² para todos los espesores de silicio simulados en este trabajo.

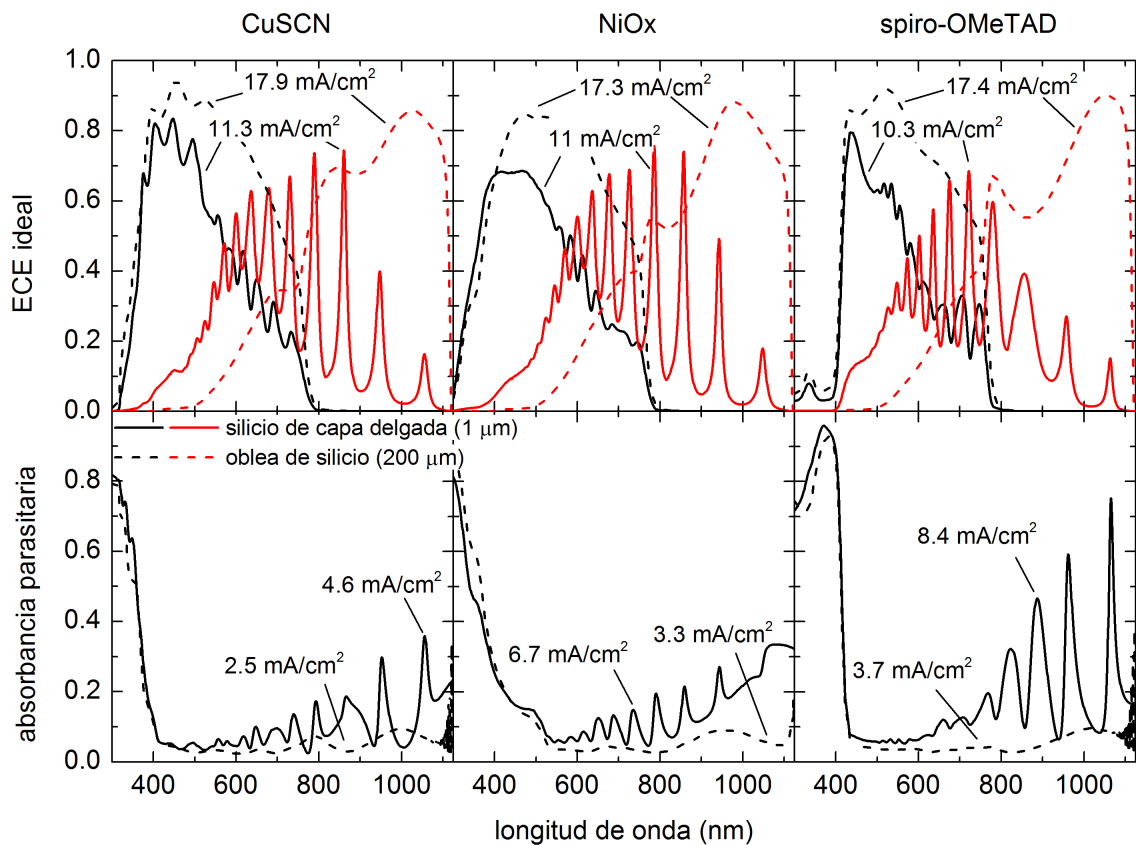


Figura 5: ECE ideales (fila superior) de las celdas de perovskita (líneas negras) y silicio (líneas rojas) para dos espesores de silicio cristalino, 1  $\mu\text{m}$  (líneas continuas) y 200  $\mu\text{m}$  (líneas a trazos) junto con las fotocorrientes. En la fila inferior se muestran las absorbancias en las capas de contacto y las pérdidas de fotocorrientes asociadas a ellas. Las tres columnas representan las celdas tandem con diferentes HTL como se señala en el encabezado de cada columna.

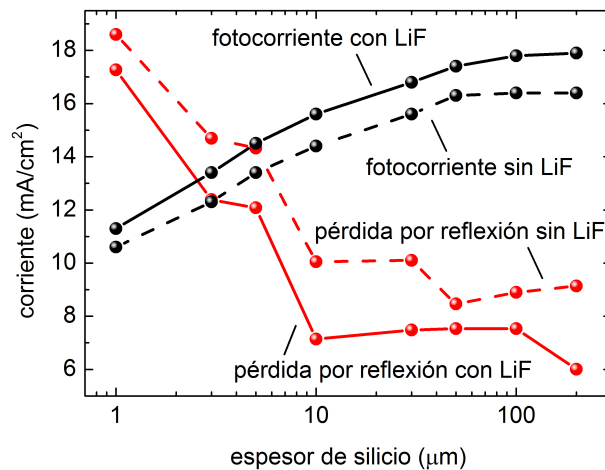


Figura 6: Fotocorriente de celdas tandem optimizadas con y sin la capa antirreflejante de LiF (líneas y esferas negras). Con líneas y esferas rojas se muestran las pérdidas de fotocorriente asociadas a la reflexión.

#### Influencia de las capas de a-Si

La fotocorriente entregada por la celda inferior de silicio se compone por la contribución de los portadores recolectados por la capa frontal de a-Si, por el c-Si y por la capa posterior de a-Si. Evidentemente, el espesor del c-Si determina la absorción en cada una de estas capas y por lo tanto también la contribución de la corriente producida en cada capa respecto de la corriente total. En la Figura 7 se muestra la contribución de cada capa a la fotocorriente total de la celda inferior de silicio

como función del espesor del c-Si. Estas simulaciones fueron realizadas sobre celdas tandem optimizadas con CuSCN como HTL. Para silicio grueso, 95% de la fotocorriente es producida por el c-Si, mientras que el a-Si frontal contribuye con el restante 5%. La fotocorriente generada en el a-Si posterior es por lo tanto despreciable dado que la luz visible es absorbida por las capas superiores a ésta. El a-Si frontal absorbe el espectro rojo (~650 nm) dado que las longitudes de onda menores son absorbidas mayormente en la perovskita y el espectro infrarrojo es transmitido al c-Si. La Figura 7 muestra que para celdas con silicio de capa delgada la contribución de la corriente generada en las capas de a-Si juegan un papel importante en la fotocorriente total. Estos resultados sugieren que la influencia de la calidad electrónica de las capas de a-Si en el rendimiento global de la celda tandem dependerá del espesor del silicio cristalino. Para desarrollar este concepto mostramos en la Figura 8 la fotocorriente total entregada por la celda inferior como función del espesor del c-Si con la eficiencia de recolección de portadores  $f_c$  de las capas de a-Si como parámetro variable entre  $f_c = 0$  y  $f_c = 1$ . Asumimos un valor constante de  $f_c$  debido a que estas capas tienen un espesor muy delgado de tan solo 30 nm. De esta figura vemos que para celdas de silicio grueso, el peor escenario, donde  $f_c = 0$ , representa una reducción en la fotocorriente de hasta un 5%. Sin embargo, cuando la celda inferior es fabricada con silicio de capa delgada, la fotocorriente se ve reducida a la mitad si la calidad electrónica del a-Si es muy pobre, es decir  $f_c = 0$ . Desde un punto de vista tecnológico, es importante notar que para celdas tandem con silicio de capa delgada es trascendental usar capas de a-Si con una buena calidad electrónica ( $f_c > 0.75$ ) para evitar una excesiva reducción en la fotocorriente. Por otro lado, en celdas tandem basadas en obleas de silicio, una alta eficiencia de recolección de portadores en el a-Si no es un requisito fundamental para obtener altas fotocorrientes.

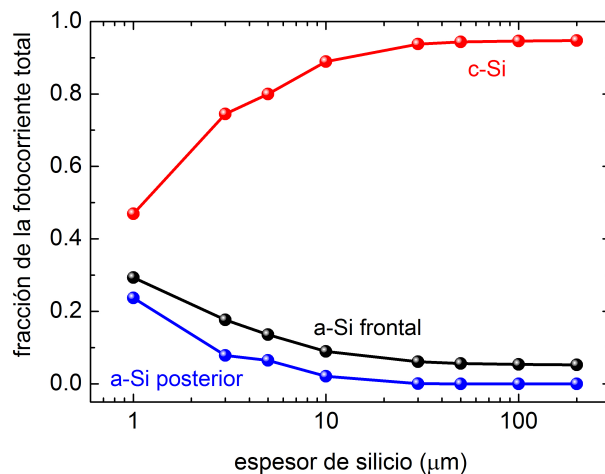


Figura 7: Contribución relativa de la fotocorriente de la celda HIT entregada por el silicio cristalino y por las capas frontal y posterior de silicio.

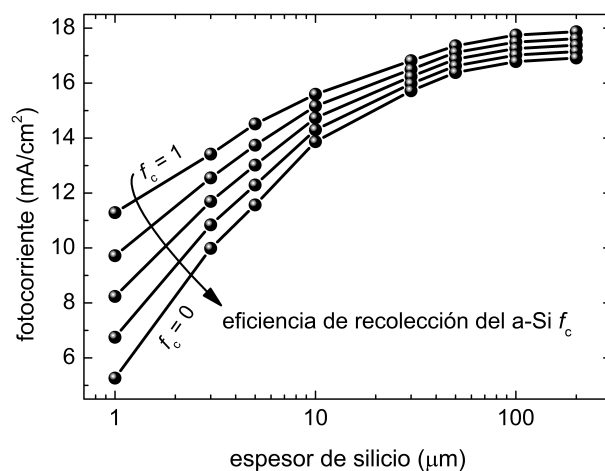


Figura 8: Fotocorriente de la celda HIT en función del espesor del silicio cristalino. El parámetro de la simulación es la eficiencia de recolección de portadores de las capas de silicio amorfo  $f_c$ .



## CONCLUSIONES

A partir de la combinación del modelo óptico utilizado en este trabajo con el algoritmo de recocido simulado, hemos modelado y optimizado celdas tandem de capas planas con el potencial de entregar una corriente de cortocircuito  $J_{sc} = 17.9 \text{ mA/cm}^2$  bajo condiciones estándar. Teniendo en cuenta que por un lado la celda récord de silicio (HIT) posee una tensión de circuito abierto  $V_{oc} = 0.74 \text{ V}$  y un factor de forma  $FF = 82.7\%$ , y por otro lado la celda récord de perovskita de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  presenta  $V_{oc} = 1.105 \text{ V}$  y  $FF = 80.3\%$  (Green et al. 2016), es factible prever que una celda tandem perovskita/HIT pueda alcanzar en el corto plazo una eficiencia del 26.4% con  $J_{sc} = 17.9 \text{ mA/cm}^2$ ,  $V_{oc} = 1.845 \text{ V}$  y  $FF = 80\%$ . Además considerando la incorporación de estrategias de captura de luz en la superficie frontal y posterior para reducir la reflexión y aumentar el camino óptico dentro de la celda sería posible aumentar la corriente de cortocircuito hasta unos 19-20  $\text{mA/cm}^2$ , y por lo tanto la eficiencia podría llegar al 30% con  $FF = 82\%$  y  $V_{oc} = 1.845 \text{ V}$ .

## APÉNDICE

Las Tablas 2, 3 y 4 detallan los espesores óptimos de capas que componen las celdas tandem simuladas en este trabajo utilizando los diferentes HTL. Las abreviaturas y símbolos utilizados en las tablas son: c-Si: silicio cristalino, LiF: fluoruro de litio, ITO(f) e ITO (p): óxido de estaño-indio frontal y posterior, respectivamente,  $\text{MoO}_3$ : trióxido de molibdeno, CuSCN: tiocianato cuproso,  $\text{NiO}_x$ : óxido de níquel, spiro: spirofluorene linked methoxy triphenylamines (spiro-OMeTAD), PVK: perovskita de triioduro de plomo metilamonio ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ),  $\text{SnO}_2$ : dióxido de estaño, AZO: óxido de zinc dopado con aluminio y  $J_{\text{foto}}$ : fotocorriente extraída de la celda tandem.

c-Si ( $\mu\text{m}$ )	LiF (nm)	ITO(f) (nm)	$\text{MoO}_3$ (nm)	CuSCN (nm)	PVK (nm)	$\text{SnO}_2$ (nm)	ITO(p) (nm)	AZO (nm)	$J_{\text{foto}}$ ( $\text{mA/cm}^2$ )
1	114	65	11	760	93	60	88	70	11.29
3	85	60	14	615	121	52	115	106	13.42
5	92	65	8	431	135	31	60	54	14.51
10	104	66	16	377	177	47	193	95	15.59
30	83	77	39	685	230	32	60	147	16.82
50	108	84	7	592	240	15	64	133	17.36
100	94	64	16	751	248	22	60	96	17.75
200	97	64	16	448	253	21	60	96	17.87

Tabla 2: Espesores optimizados de las capas de las celdas tandem simuladas con CuSCN como HTL.

c-Si ( $\mu\text{m}$ )	LiF (nm)	ITO(f) (nm)	$\text{MoO}_3$ (nm)	$\text{NiO}_x$ (nm)	PVK (nm)	$\text{SnO}_2$ (nm)	ITO(p) (nm)	AZO (nm)	$J_{\text{foto}}$ ( $\text{mA/cm}^2$ )
1	90	89	7	131	93	28	109	50	11.02
3	85	63	32	163	138	60	93	51	13.31
5	104	66	34	58	134	17	60	105	14.19
10	101	69	14	113	180	57	167	164	15.39
30	91	63	39	117	216	26	198	108	16.27
50	97	60	41	126	242	58	60	73	16.92
100	89	82	30	139	264	11	60	65	17.58
200	70	67	45	121	253	16	61	67	17.39

Tabla 3: Espesores optimizados de las capas de las celdas tandem simuladas con  $\text{NiO}_x$  como HTL.

c-Si ( $\mu\text{m}$ )	LiF (nm)	ITO(f) (nm)	MoO <sub>3</sub> (nm)	spiro (nm)	PVK (nm)	SnO <sub>2</sub> (nm)	ITO(p) (nm)	AZO (nm)	$J_{\text{foto}}$ (mA/cm <sup>2</sup> )
1	95	62	31	209	89	50	190	64	10.28
3	99	98	7	159	128	57	159	62	12.77
5	90	68	33	272	203	59	149	112	14.68
10	93	95	43	210	252	13	66	191	16.12
30	96	76	38	198	255	35	60	99	16.43
50	100	70	35	166	279	5	60	197	17.28
100	92	68	36	163	279	5	60	198	17.39
200	95	62	31	209	89	50	190	64	10.28

Tabla 4: Espesores optimizados de las capas de las celdas tandem simuladas con spiro-OMeTAD como HTL.

## REFERENCIAS

- Aarts E., Korst J. (1988). Simulated annealing and Boltzmann machines, John Wiley and Sons Inc., New York, NY. 1<sup>o</sup> Edición.
- Aarts E., Korst J., Michiels W. (2005). Simulated Annealing. En: Burke E., Kendall G. (eds) Search Methodologies. Springer US, pp 187–210.
- Albrecht S., Saliba M., Baena J., et al (2016). Monolithic perovskite/silicon-heterojunction tandem solar cells processed at low temperature. *Energy Environ. Sci.* 9, 1, 81–88.
- Green M.A. (2003). Crystalline and thin-film silicon solar cells: state of the art and future potential. *Solar Energy.* 74, 3, 181–192.
- Green M.A., Emery K., Hishikawa Y., et al (2016). Solar cell efficiency tables (version 48). *Prog. Photovolt: Res. Appl.* 24, 7, 905–913.
- Green M.A., Ho-Baillie A., Snaith H.J. (2014). The emergence of perovskite solar cells. *Nat. Photon.* 8, 7, 506–514.
- Jeng J.-Y., Chen K.-C., Chiang T.-Y., et al (2014). Nickel Oxide Electrode Interlayer in CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> Perovskite/PCBM Planar-Heterojunction Hybrid Solar Cells. *Advanced materials* 26, 24, 4107–4113.
- Jia X., Puthen-Veetil B., Xia H., et al (2016). All-silicon tandem solar cells: Practical limits for energy conversion and possible routes for improvement. *Journal of Applied Physics* 119, 23, 233102.
- Jung J.W., Chueh C.-C., Jen A.K.-Y. (2015). High-Performance Semitransparent Perovskite Solar Cells with 10% Power Conversion Efficiency and 25% Average Visible Transmittance Based on Transparent CuSCN as the Hole-Transporting Material. *Adv Energy Mater* 5, 17, 1500486.
- Lin Q., Armin A., Nagiri R.C.R., et al (2015). Electro-optics of perovskite solar cells. *Nature Photonics* 9, 2, 106–112.
- Mailoa J.P., Bailie C.D., Johlin E.C., et al (2015). A 2-terminal perovskite/silicon multijunction solar cell enabled by a silicon tunnel junction. *Applied Physics Letters* 106, 12, 121105.
- Masuko K., Shigematsu M., Hashiguchi T., et al (2014). Achievement of More Than 25% Conversion Efficiency With Crystalline Silicon Heterojunction Solar Cell. *IEEE Journal of Photovoltaics* 4, 6, 1433–1435.
- Petterson L.A.A., Roman L.S., Inganas O. (1999). Modeling photocurrent action spectra of photovoltaic devices based on organic thin films. *J. Appl. Phys.* 86, 1, 487–496.
- Santbergen R., Smets A.H., Zeman M. (2013). Optical model for multilayer structures with coherent, partly coherent and incoherent layers. *Optics express* 21, 102, A262–A267.
- Shah A.V., Schade H., Vanecek M., et al (2004). Thin-film silicon solar cell technology. *Progress in photovoltaics: Research and applications* 12, 2-3, 113–142.
- Shockley W., Queisser H.J. (1961). Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells. *Journal of applied physics* 32, 3, 510–519.
- Werner J., Weng C.-H., Walter A., et al (2015). Efficient monolithic perovskite/silicon tandem solar cell with cell area > 1 cm<sup>2</sup>. *The journal of physical chemistry letters* 7, 1, 161–166.
- Willeke G.P. (2002). Thin crystalline silicon solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 72, 1-4, 191–200.

Yang W.S., Noh J.H., Jeon N.J., et al (2015). High-performance photovoltaic perovskite layers fabricated through intramolecular exchange. *Science* 348, 6240, 1234–1237.

## **ABSTRACT**

The steady increase in silicon solar cells efficiency over the last 40 years has turned photovoltaics into a competitive energy source. However, the achieved efficiency record is already close to the theoretical limit and therefore new approaches are needed to overcome this limit. It has been suggested that combining silicon cells and inorganic-organic perovskite cells in tandem configuration should further increase the device efficiency. Perovskite cells have high efficiency, low fabrication costs and they are compatible with silicon technology. In this work, we apply an optical model to optimize the functional and active layers of state-of-the-art perovskite/silicon tandem cells. The simulation results allow us to identify and quantify the optical losses associated to reflection and absorption in contact layers. With the aid of an optimization algorithm the photocurrent increased up to 7% relative to the photocurrent of tandem cells reported in the literature.

**Keywords:** tandem solar cells, perovskite, optical modelling, HIT solar cells.