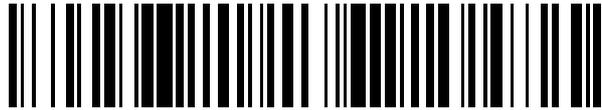


19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 812 758**

51 Int. Cl.:

*H01L 51/44* (2006.01)

*H01L 51/42* (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

- 86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **19.11.2015 PCT/US2015/061467**
- 87 Fecha y número de publicación internacional: **26.05.2016 WO16081682**
- 96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **19.11.2015 E 15860737 (4)**
- 97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **27.05.2020 EP 3221898**

54 Título: **Capas interfaciales bicapa y tricapa en dispositivos de material de perovskita**

30 Prioridad:

**21.11.2014 US 201462083063 P**  
**13.05.2015 US 201514711391**

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:  
**18.03.2021**

73 Titular/es:

**HUNT PEROVSKITE TECHNOLOGIES, L.L.C.**  
**(100.0%)**  
**1807 Ross Avenue, Suite 333**  
**Dallas, TX 75201, US**

72 Inventor/es:

**IRWIN, MICHAEL D.;**  
**CHUTE, JERRED A. y**  
**DHAS, VIVEK V.**

74 Agente/Representante:

**ARIAS SANZ, Juan**

**ES 2 812 758 T3**

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

## DESCRIPCIÓN

Capas interfaciales bicapa y tricapa en dispositivos de material de perovskita

5 **Antecedentes**

El uso de dispositivos fotovoltaicos (FV) para generar energía eléctrica a partir de la energía o la radiación solares puede proporcionar muchos beneficios, incluyendo, por ejemplo, una fuente de energía, emisiones bajas o nulas, producción de energía independiente de la red eléctrica, estructuras físicas duraderas (sin partes móviles), sistemas estables y fiables, construcción modular, instalación relativamente rápida, fabricación y uso seguros y buena opinión pública y aceptación de uso.

El documento CN 104091888 desvela una célula solar de perovskita y un método de preparación de la misma. La célula solar de perovskita está compuesta por un sustrato de vidrio FTO, una capa compacta de  $\text{TiO}_2/\text{ZnO}/\text{TiO}_2$  de estructura interlaminar, una capa de absorción de luz activa de material de estructura mesoporosa de  $\text{TiO}_2$ /perovskita, una capa de transferencia de un hueco de espiro-OMeTAD y un electrodo de oro. En comparación con la técnica anterior, la capa compacta de  $\text{TiO}_2/\text{ZnO}/\text{TiO}_2$  de estructura interlaminar se combina con las ventajas y las desventajas del  $\text{TiO}_2$  y el  $\text{ZnO}$ , de manera que los factores de llenado de la célula solar de perovskita mejoran al 70 % y la eficiencia de conversión fotoeléctrica alcanza el 12,6 %. El equipo para preparar la célula solar de perovskita es simple, el proceso de preparación es simple, el control es fácil, el coste es bajo y la célula solar de perovskita tiene una perspectiva muy buena de aplicación industrial.

"Effects of Surface Blocking Layer of  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  on Nanocrystalline  $\text{TiO}_2$  for  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  Perovskite Solar Cells" (Seigo Ito et al, *Journal of Physical Chemistry*, Julio de 2014) desvela la inserción de capas de  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  en una interfaz entre el  $\text{TiO}_2$  y la perovskita  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  para crear células solares de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  usando material inorgánico de transporte de huecos (CuSCN). Las eficiencias de la conversión de fotoenergía mejoraron con las capas de  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  (la mejor eficiencia: 5,24 %). Durante el ensayo de exposición a la luz sin encapsulación, las células solares de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  sin  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  se deterioraron a eficiencia cero en 12 horas, pero con  $\text{Sb}_2\text{S}_3$ , por otro lado, las células solares de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  se volvieron estables frente a la exposición a la luz sin encapsulación, que no cambió la estructura cristalina o los límites de longitud de onda de la absorción y la IPCE (eficiencia de fotones incidentes a corriente, por sus siglas en inglés). Por tanto, se creía que la degradación podía producirse en la interfaz entre  $\text{TiO}_2$  y  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ .

El documento WO 2014/151522 desvela dispositivos fotovoltaicos tales como células solares, células solares-baterías híbridas y otros dispositivos de este tipo, incluyendo una capa activa que tiene material de perovskita y material de transporte de carga de óxido de cobre u otro óxido metálico. El material de transporte de carga se dispone adyacente al material de perovskita de manera que ambos estén adyacentes y/o en contacto. El documento '522 desvela que la inclusión de ambos materiales en una capa activa de un dispositivo fotovoltaico puede mejorar el rendimiento del dispositivo y que pueden incluirse otros materiales para mejorar adicionalmente el rendimiento del dispositivo, tales como, por ejemplo: una o más capas interfaciales, una o más capas mesoporosas y uno o más colorantes.

Las características y ventajas de la presente divulgación serán fácilmente aparentes para los expertos en la materia.

**Sumario**

De acuerdo con un primer aspecto se proporciona un dispositivo fotovoltaico como se describe en la reivindicación 1. Se describen características opcionales o preferidas en las reivindicaciones dependientes.

**Breve descripción de los dibujos**

La FIGURA 1 es una ilustración de un diseño de DSSC (célula solar sensibilizada con colorante, por sus siglas en inglés) que representa diversas capas de la DSSC de acuerdo con algunas realizaciones de la presente divulgación.

La FIGURA 2 es otra ilustración de un diseño de DSSC que representa diversas capas de la DSSC de acuerdo con algunas realizaciones de la presente divulgación.

La FIGURA 3 es una ilustración de ejemplo de un diseño de un dispositivo de BHJ (heterounión en volumen, por sus siglas en inglés) de acuerdo con algunas realizaciones de la presente divulgación.

La FIGURA 4 es una vista esquemática de una célula fotovoltaica típica que incluye una capa activa de acuerdo con algunas realizaciones de la presente divulgación.

La FIGURA 5 es un esquema de un dispositivo típico de DSSC en estado sólido de acuerdo con algunas realizaciones de la presente divulgación.

La FIGURA 6 es un diagrama estilizado que ilustra componentes de un dispositivo FV de ejemplo de acuerdo con algunas realizaciones de la presente divulgación.

La FIGURA 7 es un diagrama estilizado que muestra componentes de un dispositivo FV de ejemplo de acuerdo con algunas realizaciones de la presente divulgación.

La FIGURA 8 es un diagrama estilizado que muestra componentes de un dispositivo FV de ejemplo de acuerdo con algunas realizaciones de la presente divulgación.

La FIGURA 9 es un diagrama estilizado que muestra componentes de un dispositivo FV de ejemplo de acuerdo con algunas realizaciones de la presente divulgación.

La FIG. 10 es un diagrama estilizado de un dispositivo de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones.

5 La FIG. 11 es un diagrama estilizado de un dispositivo de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones.

La FIG. 12 muestra imágenes de un microscopio electrónico de barrido transversal que compara un dispositivo FV de perovskita fabricado con agua (arriba) y sin agua (abajo).

10 Las FIG. 13-20 son diagramas estilizados de dispositivos de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones.

### Descripción detallada de realizaciones preferidas

15 Las mejoras en diversos aspectos de las tecnologías FV compatibles con dispositivos FV orgánicos, no orgánicos y/o híbridos prometen reducir adicionalmente el coste tanto de los dispositivos FV orgánicos como de otros dispositivos FV. Por ejemplo, algunas células solares, tales como las células solares en estado sólido sensibilizadas por colorantes, pueden aprovechar los nuevos componentes alternativos rentables y de estabilidad alta, tales como los materiales de transporte de carga en estado sólido (o, coloquialmente, "electrolitos en estado sólido"). Además, diversos tipos de células solares pueden incluir ventajosamente materiales interfaciales y otros materiales que pueden, entre otras  
20 ventajas, ser más rentables y duraderos que las opciones convencionales existentes en la actualidad.

La presente divulgación se refiere en general a composiciones de materia, aparatos y métodos de uso de materiales en células fotovoltaicas para crear energía eléctrica a partir de radiación solar. Más específicamente, la presente divulgación se refiere a composiciones fotoactivas y a otras composiciones de materia, así como aparatos, métodos  
25 de uso y formación de dichas composiciones de materia.

Los ejemplos de estas composiciones de materia pueden incluir, por ejemplo, materiales de transporte de huecos y/o materiales que pueden ser adecuados para su uso como, por ejemplo, capas interfaciales (IFL, por sus siglas en inglés), colorantes y/u otros elementos de dispositivos FV. Dichos compuestos pueden utilizarse en una diversidad de dispositivos FV, tales como células de heterounión (por ejemplo, bicapa y en volumen), células híbridas (por ejemplo, compuestos orgánicos con  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , nanovarillas de ZnO o puntos cuánticos de PbS) y DSSC (células solares sensibilizadas con colorante). Estas últimas, las DSSC, existen en tres formas: electrolitos a base de disolvente, electrolitos líquidos iónicos y transportadores de huecos en estado sólido (o DSSC en estado sólido, es decir, SS-DSSC). Las estructuras de SS-DSSC de acuerdo con algunas realizaciones pueden estar sustancialmente libres de electrolito, que contiene más bien materiales de transporte de huecos tales como espiro-OMeTAD,  $\text{CsSnI}_3$  y otros materiales activos.  
30

Una parte o la totalidad de los materiales de acuerdo con algunas realizaciones de la presente divulgación también pueden usarse ventajosamente en cualquier dispositivo orgánico o electrónico de otro tipo, incluyendo algunos ejemplos, pero sin limitación: baterías, transistores de efecto de campo (FET), diodos emisores de luz (LED), dispositivos ópticos no lineales, memristores, condensadores, rectificadores y/o antenas rectificadoras.  
40

En algunas realizaciones, la presente divulgación puede proporcionar dispositivos FV y otros similares (por ejemplo, baterías, baterías FV híbridas, dispositivos FV de uniones múltiples, FET, LED, etc.). En algunas realizaciones, dichos dispositivos pueden incluir material activo mejorado, capas interfaciales y/o uno o más materiales de perovskita. Puede incorporarse un material de perovskita en varios de uno o más aspectos de un dispositivo FV u otro dispositivo. Un material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones puede tener la fórmula general  $\text{CMX}_3$ , donde: C comprende uno o más cationes (por ejemplo, una amina, amonio, un metal del Grupo 1, un metal del Grupo 2 y/u otros cationes o compuestos similares a cationes); M comprende uno o más metales (incluyendo los ejemplos Fe, Co, Ni, Cu, Sn, Pb, Bi, Ge, Ti y Zr); y X comprende uno o más aniones. Los materiales de perovskita de acuerdo con diversas realizaciones se analizan con más detalle a continuación.  
45  
50

### Células fotovoltaicas y otros dispositivos electrónicos

55 Algunas realizaciones de dispositivo FV pueden describirse por referencia a diversas representaciones ilustrativas de células solares, como se muestra en las FIG. 1, 3, 4 y 5. Por ejemplo, un ejemplo de arquitectura de dispositivo FV de acuerdo con algunas realizaciones puede ser sustancialmente de la forma sustrato-ánodo-IFL-capa activa-IFL-cátodo. La capa activa de algunas realizaciones puede ser fotoactiva y/o puede incluir material fotoactivo. Pueden utilizarse otras capas y materiales en la célula como se sabe en la técnica. Además, cabe señalar que el uso de la expresión "capa activa" no pretende en modo alguno restringir o definir de otro modo, explícita o implícitamente, las propiedades de cualquier otra capa, por ejemplo, en algunas realizaciones, una o ambas IFL también pueden ser activas en la medida en que puedan ser semiconductoras. En particular, con referencia a la FIG. 4, se representa una célula FV genérica estilizada **2610**, ilustrando la naturaleza altamente interfacial de algunas capas dentro del dispositivo FV. El dispositivo FV **2610** representa una arquitectura genérica aplicable a varios dispositivos FV, tales como realizaciones de dispositivos de FV de material de perovskita. La célula FV **2610** incluye una capa transparente **2612** de vidrio (o material similarmente transparente a la radiación solar) que permite que la radiación solar **2614** se transmita a través  
60  
65

de la capa. La capa transparente de algunas realizaciones también puede denominarse sustrato (por ejemplo, como con la capa de sustrato **1507** de la FIG. 1) y puede comprender uno cualquiera o más de una diversidad de materiales rígidos o flexibles tales como: vidrio, polietileno, PET, Kapton, cuarzo, papel de aluminio, lámina de oro o acero. La capa fotoactiva **2616** está compuesta por material donador de electrones o de tipo *p* **2618** y/o un material aceptor de electrones o de tipo *n* **2620**, y/o un semiconductor ambipolar, que presenta características de materiales de tipo tanto *p* como *n*. La capa activa o, como se representa en la FIG. 4, la capa fotoactiva **2616**, se intercala entre dos capas de electrodo conductoras de electricidad **2622** y **2624**. En la FIG. 4, la capa de electrodo **2622** es un óxido de indio dopado con estaño (material ITO). Como se ha indicado anteriormente, una capa activa de algunas realizaciones no tiene por qué ser necesariamente fotoactiva, aunque en el dispositivo que se muestra en la FIG. 4, lo es. La capa de electrodo **2624** es un material de aluminio. Pueden usarse otros materiales como se sabe en la técnica. La célula **2610** también incluye una capa interfacial (IFL) **2626**, que se muestra en el ejemplo de la FIG. 4 en forma de un material de ZnO. La IFL puede ayudar en la separación de carga. En algunas realizaciones, la IFL **2626** puede comprender un compuesto orgánico de acuerdo con la presente divulgación en forma de una monocapa autoensamblada (SAM, por sus siglas en inglés) o en forma de una película fina. En otras realizaciones, la IFL **2626** puede comprender una IFL de múltiples capas, que se analiza con más detalle a continuación. También puede haber una IFL **2627** adyacente al electrodo **2624**. En algunas realizaciones, la IFL **2627** adyacente al electrodo **2624** puede comprender también, o en su lugar, un compuesto orgánico de acuerdo con la presente divulgación en forma de una monocapa autoensamblada (SAM, por sus siglas en inglés) o en forma de una película fina. En otras realizaciones, la IFL **2627** adyacente al electrodo **2624** puede comprender también, o en su lugar, una IFL de múltiples capas (de nuevo, se analiza con más detalle a continuación). Una IFL de acuerdo con algunas realizaciones puede ser de carácter semiconductor y puede ser de tipo *p* o de tipo *n* o puede ser de carácter dieléctrico. En algunas realizaciones, la IFL en el lado del cátodo del dispositivo (por ejemplo, IFL **2627** como se muestra en la FIG. 4) puede ser de tipo *p* y la IFL en el lado del ánodo del dispositivo (por ejemplo, IFL **2626** como se muestra en la FIG. 4) puede ser de tipo *n*. En otras realizaciones, sin embargo, la IFL del lado del cátodo puede ser de tipo *n* y la IFL del lado del ánodo puede ser de tipo *p*. La célula **2610** está unida a los conductores **2630** y a una unidad de descarga **2632**, tal como una batería.

Pueden describirse otras realizaciones más con referencia a la FIG. 3, que representa un diseño estilizado del dispositivo de BHJ, e incluye: sustrato de vidrio **2401**; electrodo de ITO (óxido de indio dopado con estaño) **2402**; capa interfacial (IFL) **2403**; capa fotoactiva **2404**; y los cátodos de LiF/Al **2405**. Los materiales de construcción de BHJ a los que se hace referencia son meros ejemplos; cualquier otra construcción de BHJ conocida en la técnica puede usarse de acuerdo con la presente divulgación. En algunas realizaciones, la capa fotoactiva **2404** puede comprender uno cualquiera o más materiales que los que puede comprender la capa activa o fotoactiva **2616** del dispositivo de la FIG. 4.

La FIG. 1 es una ilustración simplificada de dispositivos FV de DSSC de acuerdo con algunas realizaciones, a las que se hace referencia en el presente documento con el fin de ilustrar el ensamblaje de dichos dispositivos FV de ejemplo. Una DSSC de ejemplo como la que se muestra en la FIG. 1 puede construirse de acuerdo con lo siguiente: se deposita capa de electrodo **1506** (que se muestra como óxido de estaño dopado con flúor, FTO) sobre una capa de sustrato **1507** (que se muestra como vidrio). La capa mesoporosa ML (por sus siglas en inglés) **1505** (que en algunas realizaciones puede ser TiO<sub>2</sub>) se deposita sobre la capa de electrodo **1506**, entonces el fotoelectrodo (que hasta ahora comprende capa de sustrato **1507**, capa de electrodo **1506** y capa mesoporosa **1505**) está empapado en un disolvente (no se muestra) y colorante **1504**. Esto deja el colorante **1504** unido a la superficie de la ML. Se fabrica un contraelectrodo separado que comprende capa de sustrato **1501** (que también se muestra como vidrio) y capa de electrodo **1502** (que se muestra como Pt/FTO). El fotoelectrodo y el contraelectrodo se combinan, intercalando las diversas capas **1502-1506** entre las dos capas de sustrato **1501** y **1507** como se muestra en la FIG. 1 y permitiendo que las capas de electrodo **1502** y **1506** se utilicen como cátodo y ánodo, respectivamente. Se deposita una capa de electrolito **1503** directamente sobre el fotoelectrodo completo después de la capa de colorante **1504** o a través de una abertura en el dispositivo, normalmente un agujero perforado anteriormente mediante chorro de arena en el sustrato de contraelectrodo **1501**. La célula también puede estar conectada a conductores y a una unidad de descarga, tal como una batería (no se muestra). La capa de sustrato **1507** y la capa de electrodo **1506**, y/o la capa de sustrato **1501** y la capa de electrodo **1502** deben ser lo suficientemente transparentes como para permitir que la radiación solar pase a través al colorante fotoactivo **1504**. En algunas realizaciones, el contraelectrodo y/o fotoelectrodo pueden ser rígidos, mientras que en otros cualquiera de los dos o los dos pueden ser flexibles. Las capas de sustrato de las diversas realizaciones pueden comprender uno cualquiera o más de: vidrio, polietileno, PET, Kapton, cuarzo, papel de aluminio, lámina de oro y acero. En determinadas realizaciones, una DSSC puede incluir además una capa de recolección de luz **1601**, como se muestra en la FIG. 2, para dispersar la luz incidente con el fin de aumentar la longitud del recorrido de la luz a través de la capa fotoactiva del dispositivo (aumentando de este modo la probabilidad de que la luz se absorba en la capa fotoactiva).

En otras realizaciones, la presente divulgación proporciona DSSC en estado sólido. Las DSSC en estado sólido, de acuerdo con algunas realizaciones, pueden proporcionar ventajas tales como la carencia de filtraciones y/o problemas de corrosión que pueden afectar a las DSSC que comprenden electrolitos líquidos. Además, un transportador de carga en estado sólido puede proporcionar una física de dispositivo más rápida (por ejemplo, un transporte de carga más rápido). Adicionalmente, los electrolitos en estado sólido, en algunas realizaciones, pueden ser fotoactivos y, por tanto, contribuir a la energía derivada de un dispositivo de DSSC en estado sólido.

- Algunos ejemplos de CSSD en estado sólido pueden describirse con referencia a la FIG. 5, que es un esquema estilizado de una DSSC en estado sólido típica. Como en la célula solar de ejemplo representada en, por ejemplo, la FIG. 4, una capa activa compuesta por material activo (por ejemplo, conductor y/o semiconductor) primero y segundo (**2810** y **2815**, respectivamente) se intercala entre los electrodos **2805** y **2820** (que se muestran en la FIG. 5 como Pt/FTO y FTO, respectivamente). En la realización que se muestra en la FIG. 5, el primer material activo **2810** es material activo de tipo *p* y comprende un electrolito en estado sólido. En determinadas realizaciones, el primer material activo **2810** puede comprender un material orgánico tal como espiro-OMeTAD y/o poli(3-hexiltiofeno), un complejo inorgánico binario, ternario, cuaternario o superior, cualquier material semiconductor sólido o cualquier combinación de los mismos. En algunas realizaciones, el primer material activo puede contener adicionalmente o en su lugar un óxido y/o un sulfuro, y/o un seleniuro, y/o un yoduro (por ejemplo, CsSnI<sub>3</sub>). Por tanto, por ejemplo, el primer material activo de algunas realizaciones puede comprender material de tipo *p* en estado sólido, que puede comprender sulfuro de cobre e indio y, en algunas realizaciones, puede comprender seleniuro de cobre, indio y galio. El segundo material activo **2815** que se muestra en la FIG. 5 es un material activo de tipo *n* y comprende TiO<sub>2</sub> recubierto con un colorante. En algunas realizaciones, el segundo material activo puede comprender análogamente un material orgánico tal como espiro-OMeTAD, un complejo inorgánico binario, ternario, cuaternario o superior, o cualquier combinación de los mismos. En algunas realizaciones, el segundo material activo puede comprender un óxido tal como alúmina, y/o puede comprender un sulfuro, y/o puede comprender un seleniuro. Por tanto, en algunas realizaciones, el segundo material activo puede comprender sulfuro de cobre e indio y, en algunas realizaciones, puede comprender metal de seleniuro de cobre, indio y galio. El segundo material activo **2815** de algunas realizaciones puede constituir una capa mesoporosa. Además, además de ser activo, uno o ambos materiales activos primero y segundo **2810** y **2815** pueden ser fotoactivos. En otras realizaciones (que no se muestran en la FIG. 5), el segundo material activo puede comprender un electrolito sólido. Además, en realizaciones en las que cualquiera de los dos materiales activos primero y segundo **2810** y **2815** comprende un electrolito sólido, el dispositivo FV puede carecer de una cantidad eficaz de electrolito líquido. Aunque se muestra y se hace referencia en la FIG. 5 como que es de tipo *p*, una capa en estado sólido (por ejemplo, primer material activo que comprende electrolito sólido) puede ser en algunas realizaciones, en cambio, un semiconductor de tipo *n*. En dichas realizaciones, entonces, el segundo material activo (por ejemplo, el TiO<sub>2</sub> u otro material mesoporoso), como se muestra en la FIG. 5) recubierto con un colorante puede ser un semiconductor de tipo *p* (en contraposición con el semiconductor de tipo *n* que se muestra en, y se analiza con respecto a, la FIG. 5).
- Las capas de sustrato **2801** y **2825** (ambas se muestran en la FIG. 5 como vidrio) forman las respectivas capas externas superior e inferior de la célula de ejemplo de la FIG. 5. Estas capas pueden comprender cualquier material de transparencia suficiente para permitir que la radiación solar pase a través de la capa activa/fotoactiva que comprende colorante, material activo primero y segundo y/o material fotoactivo **2810** y **2815**, tales como vidrio, polietileno, PET, Kapton, cuarzo, papel de aluminio, lámina de oro y/o acero. Además, en la realización que se muestra en la FIG. 5, el electrodo **2805** (que se muestra como Pt/FTO) es el cátodo y el electrodo **2820** es el ánodo. Como en la célula solar de ejemplo representada en la FIG. 4, la radiación solar pasa a través de la capa de sustrato **2825** y el electrodo **2820** a la capa activa, tras lo cual al menos una porción de la radiación solar se absorbe de manera de producir uno o más excitones para permitir la generación de electricidad.
- Una DSSC en estado sólido de acuerdo con algunas realizaciones puede construirse de una manera sustancialmente similar a la descrita anteriormente con respecto a la DSSC representada estilizada en la FIG. 1. En la realización que se muestra en la FIG. 5, el material activo de tipo *p* **2810** corresponde al electrolito **1503** de la FIG. 1; el material activo de tipo *n* **2815** corresponde tanto al colorante **1504** como a la ML **1505** de la FIG. 1; los electrodos **2805** y **2820** corresponden, respectivamente, a las capas de electrodo **1502** y **1506** de la FIG. 1; y las capas de sustrato **2801** y **2825**, respectivamente, corresponden a las capas de sustrato **1501** y **1507**.

Diversas realizaciones de la presente divulgación proporcionan materiales y/o diseños mejorados en diversos aspectos de la célula solar y otros dispositivos, incluyendo entre otras cosas, materiales activos (incluyendo capas de transporte de huecos y/o de transporte de electrones), capas interfaciales y el diseño global del dispositivo.

#### Capas interfaciales

La presente divulgación, en algunas realizaciones, proporciona materiales y diseños ventajosos de una o más capas interfaciales dentro de un dispositivo FV, incluyendo IFL de recubrimiento fino. Las IFL de recubrimiento fino pueden emplearse en una o más IFL de un dispositivo FV de acuerdo con las diversas realizaciones que se analizan en el presente documento.

De acuerdo con diversas realizaciones, los dispositivos pueden incluir opcionalmente una capa interfacial entre cualesquiera otras dos capas y/o materiales, aunque los dispositivos no tienen por qué contener ninguna capa interfacial. Por ejemplo, un dispositivo de material de perovskita puede contener cero, uno, dos, tres, cuatro, cinco o más capas interfaciales (tal como el dispositivo de ejemplo de la FIG. 7, que contiene cinco capas interfaciales **3903**, **3905**, **3907**, **3909**, and **3911**). Una capa interfacial puede incluir cualquier material adecuado para potenciar el transporte y/o la recogida de carga entre dos capas o materiales; también puede ayudar a evitar o reducir la probabilidad de recombinación de cargas una vez que se ha transportado una carga lejos de uno de los materiales adyacentes a la capa interfacial. Una capa interfacial puede adicionalmente homogeneizar física y eléctricamente sus sustratos para crear variaciones en la rugosidad del sustrato, la constante dieléctrica, la adhesión, la creación o la

inactivación de los defectos (por ejemplo, trampas de carga, estados de superficie). Los materiales interfaciales adecuados pueden incluir uno cualquiera o más de: Al; Bi; Co; Cu; Fe; In; Mn; Mo; Ni; platino (Pt); Si; Sn; Ta; Ti; V; W; Nb; Zn; Zr; óxidos de cualquiera de los metales anteriores (por ejemplo, alúmina, sílice, titania); un sulfuro de cualquiera de los metales anteriores; un nitruro de cualquiera de los metales anteriores; grupos de alquil sililo funcionalizados o no funcionalizados; grafito; grafeno; fullerenos; nanotubos de carbono; cualquier material mesoporoso y/o material interfacial analizado en otro lugar del presente documento; y combinaciones de los mismos (incluyendo, en algunas realizaciones, bicapas de materiales combinados). En algunas realizaciones, una capa interfacial puede incluir material de perovskita. Además, las capas interfaciales pueden comprender realizaciones dopadas de cualquier material interfacial mencionado en el presente documento (por ejemplo, ZnO dopado con Y, nanotubos de carbono de una sola pared dopados con N).

En primer lugar, como se ha indicado anteriormente, una o más IFL (por ejemplo, una o ambas IFL **2626** y **2627**, como se muestran en la FIG. 4) pueden comprender un compuesto orgánico fotoactivo de la presente divulgación en forma de una monocapa autoensamblada (SAM, por sus siglas en inglés) o en forma de una película fina. Cuando un compuesto orgánico fotoactivo de la presente divulgación se aplica en forma de una SAM, puede comprender un grupo de unión a través del cual puede estar unido covalentemente o de otro modo a la superficie de cualquiera de los dos o los dos, el ánodo y el cátodo. El grupo de unión de algunas realizaciones puede comprender uno cualquiera o más de COOH, SiX<sub>3</sub> (donde X puede ser cualquier resto adecuado para formar un compuesto de silicio ternario, tal como Si(OR)<sub>3</sub> y SiCl<sub>3</sub>), SO<sub>3</sub>, PO<sub>4</sub>H, OH, CH<sub>2</sub>X (donde X puede comprender un haluro del Grupo 17) y O. El grupo de unión puede estar unido covalentemente o de otro modo a un resto que retira electrones, un resto donador de electrones y/o un resto central. El grupo de unión puede fijarse a la superficie del electrodo de manera de formar una capa direccional, organizada, de una sola molécula (o, en algunas realizaciones, múltiples moléculas) en espesor (por ejemplo, cuando múltiples compuestos orgánicos fotoactivos se unen al ánodo y/o al cátodo). Como se ha indicado, la SAM puede fijarse a través de interacciones covalentes, pero en algunas realizaciones puede fijarse a través de interacciones iónicas, de unión de hidrógeno y/o de fuerza de dispersión (es decir, Van Der Waals). Además, en determinadas realizaciones, tras la exposición a la luz, la SAM puede entrar en un estado excitado zwitteriónico, creando de este modo una IFL altamente polarizada, que puede dirigir transportadores de carga de una capa activa a un electrodo (por ejemplo, el ánodo o el cátodo). Esta inyección potenciada de transportador de carga, en algunas realizaciones, puede lograrse mediante la reorientación electrónica de la polarización de la sección transversal de la capa activa y, por tanto, el aumento de las velocidades de deriva del transportador de carga hacia su respectivo electrodo (por ejemplo, del hueco al ánodo; de los electrones al cátodo). Las moléculas para las aplicaciones anódicas de algunas realizaciones pueden comprender compuestos sintonizables que incluyen un resto donador de electrones primario unido a un resto central, que a su vez está unido a un resto que retira electrones, que a su vez está unido a un grupo de unión. En aplicaciones catódicas de acuerdo con algunas realizaciones, las moléculas de IFL pueden comprender un compuesto sintonizable que comprenda un resto pobre en electrones unido a un resto central, que a su vez está unido a un resto donador de electrones, que a su vez está unido a un grupo de unión. Cuando un compuesto orgánico fotoactivo se emplea como una IFL de acuerdo con dichas realizaciones, puede conservar el carácter fotoactivo, aunque en algunas realizaciones no tiene por qué ser fotoactivo.

Además, o en lugar de, una IFL de SAM de compuesto orgánico fotoactivo, un dispositivo FV de acuerdo con algunas realizaciones puede incluir una capa interfacial fina (una "capa interfacial de recubrimiento fino" o "IFL de recubrimiento fino") aplicada como recubrimiento sobre al menos una porción del primer o segundo material activo de dichas realizaciones (por ejemplo, el material activo primer o segundo **2810** o **2815** como se muestra en la FIG. 5). Y, a su vez, al menos una porción de la IFL de recubrimiento fino puede recubrirse con un colorante. La IFL de recubrimiento fino puede ser de tipo *n* o *p*; en algunas realizaciones, puede ser del mismo tipo que el material subyacente (por ejemplo, TiO<sub>2</sub> u otro material mesoporoso, tal como TiO<sub>2</sub> del segundo material activo **2815**). El segundo material activo puede comprender TiO<sub>2</sub> recubierto con una IFL de recubrimiento fino que comprende alúmina (por ejemplo, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) (no se muestra en la FIG. 5), que a su vez está recubierta con un colorante. Las referencias en el presente documento a TiO<sub>2</sub> y/o a titania no tienen por objeto limitar las relaciones de estaño y óxido en dichos compuestos de óxido de estaño que se describen en el presente documento. Es decir, un compuesto de titania puede comprender titanio en uno cualquiera o más de sus diversos estados de oxidación (por ejemplo, titanio I, titanio II, titanio III, titanio IV) y, por tanto, diversas realizaciones pueden incluir cantidades estequiométricas y/o no estequiométricas de titanio y óxido. Por tanto, diversas realizaciones pueden incluir (en su lugar o además de TiO<sub>2</sub>) Ti<sub>x</sub>O<sub>y</sub>, donde x puede tener cualquier valor, número entero o no entero, entre 1 y 100. En algunas realizaciones, x puede ser entre aproximadamente 0,5 y 3. Análogamente, y puede ser entre aproximadamente 1,5 y 4 (y, de nuevo, no tiene por qué ser un número entero). Por tanto, algunas realizaciones pueden incluir, por ejemplo, TiO<sub>2</sub> y/o Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Además, la titania en cualquier relación o combinación de relaciones entre el titanio y el óxido puede ser de una cualquiera o más estructuras cristalinas en algunas realizaciones, incluyendo una o más de anatasa, rutilo y amorfa.

Otros óxidos metálicos de ejemplos para su uso en la IFL de recubrimiento fino de algunas realizaciones pueden incluir óxidos metálicos semiconductores, tales como NiO, WO<sub>3</sub>, V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> o MoO<sub>3</sub>. La realización en donde el segundo material activo (por ejemplo, de tipo *n*) comprende TiO<sub>2</sub> recubierto con una IFL de recubrimiento fino que comprende Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> podría formarse, por ejemplo, con un material precursor tal como Al(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·xH<sub>2</sub>O o cualquier otro material adecuado para depositar Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> sobre el TiO<sub>2</sub>, seguido de un recocido térmico y un recubrimiento con colorante. En realizaciones de ejemplo en donde se usa un recubrimiento de MoO<sub>3</sub> en su lugar, el recubrimiento puede formarse con un material precursor tal como Na<sub>2</sub>Mo<sub>4</sub>·2H<sub>2</sub>O; mientras que puede formarse un recubrimiento de V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> de acuerdo con algunas

realizaciones con un material precursor tal como  $\text{NaVO}_3$ ; y puede formarse un recubrimiento de  $\text{WO}_3$  de acuerdo con algunas realizaciones con un material precursor tal como  $\text{NaWO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ . La concentración de material precursor (por ejemplo,  $\text{Al}(\text{NO}_3)_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ ) puede afectar al espesor final de la película (en el presente documento, de  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) depositada sobre el  $\text{TiO}_2$  u otro material activo. Por tanto, la modificación de la concentración de material precursor puede ser un método por medio del cual controlar el espesor final de la película. Por ejemplo, un espesor mayor de la película puede ser resultado de una mayor concentración de material precursor. Un espesor mayor de la película no necesariamente da como resultado una PCE mayor en un dispositivo FV que comprende un recubrimiento de óxido metálico. Por tanto, un método de algunas realizaciones puede incluir el recubrimiento de una capa de  $\text{TiO}_2$  (u otra capa mesoporosa) usando un material precursor que tenga una concentración en el intervalo de aproximadamente 0,5 a 10,0 mM; otras realizaciones pueden incluir el recubrimiento de la capa con un material precursor que tenga una concentración en el intervalo de aproximadamente 2,0 a 6,0 mM; o, en otras realizaciones, aproximadamente de 2,5 a 5,5 mM.

Además, aunque en el presente documento se denomina  $\text{Al}_2\text{O}_3$  y/o alúmina, cabe señalar que en la formación de alúmina pueden usarse diversas relaciones de aluminio y oxígeno. Por tanto, aunque algunas de las realizaciones que se analizan en el presente documento se describen con referencia a  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , dicha descripción no tiene por objeto definir una relación necesaria de aluminio en oxígeno. Más bien, las realizaciones pueden incluir uno o más compuestos de óxido de aluminio, teniendo cada uno una relación de óxido de aluminio de acuerdo con  $\text{Al}_x\text{O}_y$ , donde x puede tener cualquier valor, número entero o no entero, entre aproximadamente 1 y 100. En algunas realizaciones, x puede ser entre aproximadamente 1 y 3 (y, de nuevo, no tiene por qué ser un número entero). Análogamente, y puede tener cualquier valor, número entero o no entero, entre 0,1 y 100. En algunas realizaciones, y puede ser entre 2 y 4 (y, de nuevo, no tiene por qué ser un número entero). Además, puede haber presentes diversas formas cristalinas de  $\text{Al}_x\text{O}_y$  en diversas realizaciones, tales como formas alfa, gamma y/o amorfas de alúmina.

Análogamente, aunque en el presente documento se denominan  $\text{MoO}_3$ ,  $\text{WO}_3$  y  $\text{V}_2\text{O}_5$ , dichos compuestos pueden representarse en su lugar o además como  $\text{Mo}_x\text{O}_y$ ,  $\text{W}_x\text{O}_y$  y  $\text{V}_x\text{O}_y$ , respectivamente. En cuanto a cada uno de  $\text{Mo}_x\text{O}_y$  y  $\text{W}_x\text{O}_y$ , x puede tener cualquier valor, número entero o no entero, entre aproximadamente 0,5 y 100; en algunas realizaciones, puede ser entre aproximadamente 0,5 y 1,5. Análogamente, y puede tener cualquier valor, número entero o no entero, entre aproximadamente 1 y 100. En algunas realizaciones, y puede tener cualquier valor entre aproximadamente 1 y 4. En cuanto a  $\text{V}_x\text{O}_y$ , x puede tener cualquier valor, número entero o no entero, entre aproximadamente 0,5 y 100; en algunas realizaciones, puede ser entre aproximadamente 0,5 y 1,5. Análogamente, y puede tener cualquier valor, número entero o no entero, entre aproximadamente 1 y 100; en determinadas realizaciones, puede ser un valor de número entero o no entero entre aproximadamente 1 y 10.

De manera similar, las referencias que se hacen en algunas realizaciones ilustrativas del presente documento a  $\text{CsSnI}_3$  no tienen por objeto limitar las relaciones de los elementos componentes de los compuestos de cesio, estaño y yodo de acuerdo con diversas realizaciones. Algunas realizaciones pueden incluir cantidades estequiométricas y/o no estequiométricas de estaño y yoduro, y por tanto dichas realizaciones pueden incluir en su lugar o además diversas relaciones de cesio, estaño y yodo, tal como uno cualquiera o más compuestos de cesio-estaño-yodo, teniendo cada uno una relación de  $\text{Cs}_x\text{Sn}_y\text{I}_z$ . En dichas realizaciones, x puede tener cualquier valor, número entero o no entero, entre 0,1 y 100. En algunas realizaciones, x puede ser entre aproximadamente 0,5 y 1,5 (y, de nuevo, no tiene por qué ser un número entero). Análogamente, y puede tener cualquier valor, número entero o no entero, entre 0,1 y 100. En algunas realizaciones, y puede ser entre aproximadamente 0,5 y 1,5 (y, de nuevo, no tiene por qué ser un número entero). Análogamente, z puede tener cualquier valor, número entero o no entero, entre 0,1 y 100. En algunas realizaciones, z puede ser entre aproximadamente 2,5 y 3,5. Adicionalmente,  $\text{CsSnI}_3$  puede doparse o usarse para formar compuestos con otros materiales, tales como  $\text{SnF}_2$ , en relaciones de  $\text{CsSnI}_3:\text{SnF}_2$  que varían de 0,1:1 a 100:1, incluyendo todos los valores (números enteros y no enteros) que se encuentran entre medias.

Además, una IFL de recubrimiento fino puede comprender una bicapa. Por tanto, volviendo al ejemplo en donde la IFL de recubrimiento fino comprende un óxido metálico (tal como alúmina), la IFL de recubrimiento fino puede comprender  $\text{TiO}_2$  más óxido metálico. Una IFL de recubrimiento fino de este tipo puede tener una mayor capacidad para resistir la recombinación de carga en comparación con el  $\text{TiO}_2$  mesoporoso u otro material activo solo. Además, en la formación de una capa de  $\text{TiO}_2$ , con frecuencia es necesario un recubrimiento secundario de  $\text{TiO}_2$  con el fin de proporcionar suficiente interconexión física de las partículas de  $\text{TiO}_2$ , de acuerdo con algunas realizaciones de la presente divulgación. La aplicación de IFL de recubrimiento fino bicapa como recubrimiento sobre  $\text{TiO}_2$  mesoporoso (u otro material activo mesoporoso) puede comprender una combinación de recubrimiento usando un compuesto que comprende tanto óxido metálico como  $\text{TiCl}_4$ , dando como resultado una IFL de recubrimiento fino bicapa que comprende una combinación de óxido metálico y recubrimiento secundario de  $\text{TiO}_2$ , que puede proporcionar mejoras de rendimiento sobre el uso de cualquiera de los materiales por sí solo.

En algunas realizaciones, la IFL puede comprender un titanato. Un titanato de acuerdo con algunas realizaciones puede ser de fórmula general  $\text{M}'\text{TiO}_3$ , donde: M' comprende cualquier catión 2+. En algunas realizaciones, M' puede comprender una forma catiónica de Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ni, Zn, Cd, Hg, Cu, Pd, Pt, Sn o Pb. En algunas realizaciones, la IFL puede comprender una sola especie de titanato, mientras que en otras realizaciones, la IFL puede comprender dos o más especies diferentes de titanatos. En una realización, el titanato tiene la fórmula  $\text{SrTiO}_3$ . En otra realización, el titanato puede tener la fórmula  $\text{BaTiO}_3$ . En otra realización más, el titanato puede tener la fórmula  $\text{CaTiO}_3$ .

A modo de explicación y sin que ello implique ninguna limitación, los titanatos tienen una estructura cristalina de perovskita y siembran fuertemente el proceso de conversión de crecimiento de MAPbI<sub>3</sub>. Los titanatos generalmente también cumplen otros requisitos de la IFL, tales como el comportamiento ferroeléctrico, la suficiente movilidad del transportador de carga, la transparencia óptica, los niveles de energía apareados y la constante dieléctrica alta.

5  
Cualquier material interfacial analizado en el presente documento puede incluir composiciones dopadas. Para modificar las características (por ejemplo, eléctricas, ópticas, mecánicas) de un material interfacial, un material estequiométrico o no estequiométrico puede doparse con uno o más elementos (por ejemplo, Na, Y, Mg, N, P) en cantidades que varían desde tan solo 1 ppb hasta el 50 % molar. Algunos ejemplos de materiales interfaciales incluyen:  
10 NiO, TiO<sub>2</sub>, SrTiO<sub>3</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZrO<sub>2</sub>, WO<sub>3</sub>, V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, MO<sub>3</sub>, ZnO, grafeno y negro de carbón. Los ejemplos de posibles dopantes para estos materiales interfaciales incluyen: Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Sc, Y, Nb, Ti, Fe, Co, Ni, Cu, Ga, Sn, In, B, N, P, C, S, As, un haluro, un pseudohaluro (por ejemplo, cianuro, cianato, isocianato, fulminato, tiocianato, isotiocianato, azida, tetracarbonilcobaltato, carbamoildicianometanida, dicianonitrosometanida, dicianamida y triclanometanida) y Al en cualquiera de sus estados de oxidación. Las referencias del presente documento a materiales interfaciales dopados  
15 no tienen por objeto limitar las relaciones de los elementos componentes en los compuestos de materiales interfaciales.

La FIG. 10 es un diagrama estilizado de un dispositivo **4400** de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes del dispositivo **4400** como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que la FIG. 10 es un diagrama estilizado; por tanto, las realizaciones  
20 de acuerdo con la misma pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. El dispositivo **4400** incluye los sustratos primero y segundo **4401** y **4407**. Un primer electrodo (ITO) **4402** se dispone sobre una superficie interna del primer sustrato **4401** y un segundo electrodo (Ag) **4406** se dispone sobre una superficie interna del segundo sustrato **4407**. Una capa activa **4450** se intercala entre los dos electrodos **4402** y **4406**. La capa activa  
25 **4450** incluye una primera IFL (por ejemplo, SrTiO<sub>3</sub>) **4403**, un material fotoactivo (por ejemplo, MAPbI<sub>3</sub>) **4404** y una capa de transporte de carga (por ejemplo, Espiro-OMeTAD) **4405**.

Las IFL de recubrimiento fino y los métodos para aplicarlas como recubrimiento sobre TiO<sub>2</sub> analizados anteriormente, en algunas realizaciones, pueden emplearse en DSSC que comprenden electrolitos líquidos. Por tanto, volviendo al  
30 ejemplo de una IFL de recubrimiento fino y con referencia de nuevo a la FIG. 1 como ejemplo, la DSSC de la FIG. 1 podría comprender adicionalmente una IFL de recubrimiento fino como se ha descrito anteriormente aplicada como recubrimiento sobre la capa mesoporosa **1505** (es decir, la IFL de recubrimiento fino se insertaría entre la capa mesoporosa **1505** y el colorante **1504**).

En una realización, un dispositivo de material de perovskita puede formularse vaciando Pbl<sub>2</sub> sobre un sustrato de ITO recubierto con SrTiO<sub>3</sub>. El Pbl<sub>2</sub> puede convertirse en MAPbI<sub>3</sub> mediante un proceso de inmersión. Este proceso se describe con más detalle a continuación. Este proceso de conversión es más completo (como se observa mediante  
35 espectroscopia óptica) en comparación con la preparación del sustrato sin SrTiO<sub>3</sub>.

En algunas realizaciones, las IFL de recubrimiento fino, analizadas anteriormente en el contexto de las DSSC, pueden usarse en cualquier capa interfacial de un dispositivo semiconductor tal como un dispositivo FV (por ejemplo, un dispositivo FV híbrida u otro dispositivo FV), transistor de efecto de campo, diodo emisor de luz, dispositivo óptico no lineal, memristor, condensador, rectificador, antena rectificadora, etc. Además, las IFL de capa fina de algunas realizaciones pueden emplearse en cualquiera de los diversos dispositivos en combinación con otros compuestos  
45 analizados en la presente divulgación, incluyendo, pero sin limitación, una cualquiera o más de las siguientes de diversas realizaciones de la presente divulgación: material de transporte de huecos sólido tal como material activo y aditivos (tal como, en algunas realizaciones, ácido quenodesoxicólico o 1,8-diyodo-octano).

En algunas realizaciones, pueden disponerse adyacentes entre sí múltiples IFL fabricadas a partir de diferentes materiales para formar una IFL compuesta. Esta configuración puede implicar dos IFL diferentes, tres IFL diferentes o un número aún mayor de IFL diferentes. La IFL de múltiples capas o la IFL compuesta resultantes pueden usarse en lugar de una IFL de un solo material. Por ejemplo, puede usarse una IFL compuesta como IFL **2626** y/o como IFL  
50 **2627** en la célula **2610**, que se muestra en el ejemplo de la FIG. 4. Aunque la IFL compuesta difiere de la IFL de un solo material, el ensamblaje de una célula fotovoltaica de material de perovskita que tiene IFL de múltiples capas no es sustancialmente diferente del ensamblaje de una célula fotovoltaica de material de perovskita que solo tiene IFL de un solo material.

En general, la IFL compuesta puede fabricarse usando cualquiera de los materiales analizados en el presente documento como adecuados para una IFL. En una realización, la IFL comprende una capa de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y una capa de ZnO o M:ZnO (ZnO dopado, por ejemplo, Be:ZnO, Mg:ZnO, Ca:ZnO, Sr:ZnO, Ba:ZnO, Sc:ZnO, Y:ZnO, Nb:ZnO). En una realización, la IFL comprende una capa de ZrO<sub>2</sub> y una capa de ZnO o M:ZnO. En determinadas realizaciones, la IFL comprende múltiples capas. En algunas realizaciones, una IFL de múltiples capas generalmente tiene una capa conductora, una capa dieléctrica y una capa semiconductor. En realizaciones particulares, las capas pueden repetirse, por ejemplo, una capa conductora, una capa dieléctrica, una capa semiconductor, una capa dieléctrica y una capa semiconductor. Los ejemplos de IFL de múltiples capas incluyen una IFL que tiene una capa de ITO, una capa de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, una capa de ZnO y una segunda capa de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; una IFL que tiene una capa de ITO, una capa de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>,  
65

una capa de ZnO, una segunda capa de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y una segunda capa de ZnO; una IFL que tiene una capa de ITO, una capa de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, una capa de ZnO, una segunda capa de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, una segunda capa de ZnO y una tercera capa de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; y las IFL que tienen tantas capas como sean necesarias para conseguir las características de rendimiento deseadas. Como se ha analizado anteriormente, las referencias a determinadas relaciones estequiométricas no tienen por objeto  
5 limitar las relaciones de los elementos componentes en capas de IFL de acuerdo con diversas realizaciones.

Disponer dos o más IFL adyacentes como una IFL compuesta puede superar el rendimiento de una sola IFL en las células FV de material de perovskita, donde los atributos de cada material de IFL pueden aprovecharse en una sola IFL. Por ejemplo, en la arquitectura que tiene una capa de ITO, una capa de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y una capa de ZnO, donde ITO es un electrodo conductor, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> es un material dieléctrico y ZnO es un semiconductor de tipo n, ZnO actúa como un  
10 aceptor de electrones con propiedades de transporte de electrones de buen rendimiento (por ejemplo, movilidad). Adicionalmente, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> es un material físicamente robusto que se adhiere bien a ITO, homogeneiza la superficie tapando los defectos de la misma (por ejemplo, las trampas de carga) y mejora las características del diodo del dispositivo a través de la supresión de la corriente oscura.

La FIG. 11 es un diagrama estilizado de un dispositivo **4500** de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes del dispositivo **4500** como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que la FIG. 11 es un diagrama estilizado; por tanto, las realizaciones de acuerdo con la misma pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente  
15 entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. El dispositivo **4500** incluye los sustratos primero y segundo **4501** y **4508**. Un primer electrodo (por ejemplo, ITO) **4502** se dispone sobre una superficie interna del primer sustrato **4501** y un segundo electrodo (por ejemplo, Ag) **4507** se dispone sobre una superficie interna del segundo sustrato **4508**. Una capa activa **4550** se intercala entre los dos electrodos **4502** y **4507**. La capa activa **4550** incluye una IFL compuesta que comprende una primera IFL (por ejemplo, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) **4503** y una segunda IFL (por ejemplo, ZnO) **4504**, un material fotoactivo (por ejemplo, MAPbI<sub>3</sub>) **4505** y una capa de transporte de carga (por ejemplo, Espiro-OMeTAD) **4506**.  
20  
25

Las FIG. 13-20 son diagramas estilizados de dispositivos de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes de los dispositivos como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que las FIG. 13-18 son diagramas estilizados; por tanto, las realizaciones de acuerdo con las mismas pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. Los dispositivos de ejemplo incluyen capas y materiales que se describen a lo largo de la presente divulgación. Los dispositivos pueden incluir una capa de sustrato (por ejemplo, vidrio), capas de electrodo (por ejemplo, ITO, Ag), capas interfaciales, que pueden ser IFL compuestas (por ejemplo, ZnO, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Y:ZnO y/o Nb:ZnO), un material fotoactivo (por ejemplo, MAPbI<sub>3</sub>, FAPbI<sub>3</sub>, 5-AVA-HCl: MAPbI<sub>3</sub> y/o CHP: MAPbI<sub>3</sub>) y una capa de transporte de carga (por ejemplo, Espiro-OMeTAD, PCDTBT, TFB, TPD, PTB7, F8BT, PPV, MDMO-PPV, MEH-PPV y/o P3HT).  
30  
35

La FIG. 13 es un diagrama estilizado de un dispositivo **6100** de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes del dispositivo **6100** como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que la FIG. 13 es un diagrama estilizado; por tanto, las realizaciones de acuerdo con la misma pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. El dispositivo **6100** incluye un sustrato (por ejemplo, Vidrio) **6101**. Un primer electrodo (por ejemplo, ITO) **6102** se dispone sobre una superficie interna del sustrato **6101** y un segundo electrodo (por ejemplo, Ag) **6107** se dispone sobre una capa activa **6150** que se intercala entre los dos electrodos **6102** y **6107**. La capa activa **6150** incluye una IFL compuesta que comprende una primera IFL (por ejemplo, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) **6103** y una segunda IFL (por ejemplo, ZnO) **6104**, un material fotoactivo (por ejemplo, MAPbI<sub>3</sub>) **6105** y una capa de transporte de carga (por ejemplo, Espiro-OMeTAD) **6106**.  
40  
45

La FIG. 14 es un diagrama estilizado de un dispositivo **6200** de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes del dispositivo **6200** como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que la FIG. 14 es un diagrama estilizado; por tanto, las realizaciones de acuerdo con la misma pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. El dispositivo **6200** incluye un sustrato (por ejemplo, Vidrio) **6201**. Un primer electrodo (por ejemplo, ITO) **6202** se dispone sobre una superficie interna del sustrato **6201** y un segundo electrodo (por ejemplo, Ag) **6206** se dispone sobre una capa activa **6250** que se intercala entre los dos electrodos **6202** y **6206**. La capa activa **6250** incluye una IFL (por ejemplo, Y:ZnO) **6203**, un material fotoactivo (por ejemplo, MAPbI<sub>3</sub>) **6204** y una capa de transporte de carga (por ejemplo, P3HT) **6205**.  
50  
55  
60

La FIG. 15 es un diagrama estilizado de un dispositivo **6300** de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes del dispositivo **6300** como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que la FIG. 15 es un diagrama estilizado; por tanto, las realizaciones de acuerdo con la misma pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. El dispositivo **6300** incluye un sustrato (por ejemplo, Vidrio) **6301**. Un primer electrodo (por ejemplo, ITO) **6302** se dispone sobre  
65

una superficie interna del sustrato **6301** y un segundo electrodo (por ejemplo, Ag) **6309** se dispone sobre una capa activa **6350** que se intercala entre los dos electrodos **6302** y **6309**. La capa activa **6350** incluye una IFL compuesta que comprende una primera IFL (por ejemplo,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) **6303**, una segunda IFL (por ejemplo, ZnO) **6304**, una tercera IFL (por ejemplo,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) **6305** y una cuarta IFL (por ejemplo, ZnO) **6306**, un material fotoactivo (por ejemplo,  $\text{MAPbI}_3$ ) **6307** y una capa de transporte de carga (por ejemplo, PCDTBT) **6308**.

La FIG. 16 es un diagrama estilizado de un dispositivo **6400** de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes del dispositivo **6400** como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que la FIG. 16 es un diagrama estilizado; por tanto, las realizaciones de acuerdo con la misma pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. El dispositivo **6400** incluye un sustrato (por ejemplo, Vidrio) **6401**. Un primer electrodo (por ejemplo, ITO) **6402** se dispone sobre una superficie interna del sustrato **6401** y un segundo electrodo (por ejemplo, Ag) **6409** se dispone sobre una capa activa **6450** que se intercala entre los dos electrodos **6402** y **6409**. La capa activa **6450** incluye una IFL compuesta que comprende una primera IFL (por ejemplo,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) **6403**, una segunda IFL (por ejemplo, ZnO) **6404**, una tercera IFL (por ejemplo,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) **6405** y una cuarta IFL (por ejemplo, ZnO) **6406**, un material fotoactivo (por ejemplo, 5-AVA-HCL: $\text{MAPbI}_3$ ) **6407** y una capa de transporte de carga (por ejemplo, PCDTBT) **6408**.

La FIG. 17 es un diagrama estilizado de un dispositivo **6500** de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes del dispositivo **6500** como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que la FIG. 17 es un diagrama estilizado; por tanto, las realizaciones de acuerdo con la misma pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. El dispositivo **6500** incluye un sustrato (por ejemplo, Vidrio) **6501**. Un primer electrodo (por ejemplo, ITO) **6502** se dispone sobre una superficie interna del sustrato **6501** y un segundo electrodo (por ejemplo, Ag) **6506** se dispone sobre una capa activa **6550** que se intercala entre los dos electrodos **6502** y **6506**. La capa activa **6550** incluye una IFL (por ejemplo, Nb:ZnO) **6503**, un material fotoactivo (por ejemplo,  $\text{FAPbI}_3$ ) **6504** y una capa de transporte de carga (por ejemplo, P3HT) **6505**.

La FIG. 18 es un diagrama estilizado de un dispositivo **6600** de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes del dispositivo **6600** como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que la FIG. 18 es un diagrama estilizado; por tanto, las realizaciones de acuerdo con la misma pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. El dispositivo **6600** incluye un sustrato (por ejemplo, Vidrio) **6601**. Un primer electrodo (por ejemplo, ITO) **6602** se dispone sobre una superficie interna del sustrato **6601** y un segundo electrodo (por ejemplo, Ag) **6606** se dispone sobre una capa activa **6650** que se intercala entre los dos electrodos **6602** y **6606**. La capa activa **6650** incluye una IFL (por ejemplo, Y:ZnO) **6603**, un material fotoactivo (por ejemplo,  $\text{CHP}:\text{MAPbI}_3$ ) **6604** y una capa de transporte de carga (por ejemplo, P3HT) **6605**.

La FIG. 19 es un diagrama estilizado de un dispositivo **6700** de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes del dispositivo **6700** como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que la FIG. 19 es un diagrama estilizado; por tanto, las realizaciones de acuerdo con la misma pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. El dispositivo **6700** incluye un sustrato (por ejemplo, Vidrio) **6701**. Un primer electrodo (por ejemplo, ITO) **6702** se dispone sobre una superficie interna del sustrato **6701** y un segundo electrodo (por ejemplo, Al) **6707** se dispone sobre una capa activa **6750** que se intercala entre los dos electrodos **6702** y **6707**. La capa activa **6750** incluye una IFL (por ejemplo,  $\text{SrTiO}_3$ ) **6703**, un material fotoactivo (por ejemplo,  $\text{FAPbI}_3$ ) **6704**, una primera capa de transporte de carga (por ejemplo, P3HT) **6705** y una segunda capa de transporte de carga (por ejemplo, MoOx) **6706**.

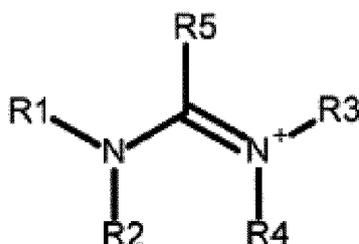
La FIG. 20 es un diagrama estilizado de un dispositivo **6800** de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes del dispositivo **6800** como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que la FIG. 16 es un diagrama estilizado; por tanto, las realizaciones de acuerdo con la misma pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. El dispositivo **6800** incluye un sustrato (por ejemplo, Vidrio) **6801**. Un primer electrodo (por ejemplo, ITO) **6802** se dispone sobre una superficie interna del sustrato **6801** y un segundo electrodo (por ejemplo, Al) **6811** se dispone sobre una capa activa **6850** que se intercala entre los dos electrodos **6802** y **6811**. La capa activa **6850** incluye una IFL compuesta que comprende una primera IFL (por ejemplo,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) **6803**, una segunda IFL (por ejemplo, ZnO) **6804**, una tercera IFL (por ejemplo,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) **6805**, una cuarta IFL (por ejemplo, ZnO) **6806** y una quinta IFL (por ejemplo,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) **6807**, un material fotoactivo (por ejemplo,  $\text{FAPbI}_3$ ) **6808**, una primera capa de transporte de carga (por ejemplo, P3HT) **6809** y una segunda capa de transporte de carga (por ejemplo, MoOx) **6810**.

## 65 Material de perovskita

Puede incorporarse un material de perovskita en varios de uno o más aspectos de un dispositivo FV u otro dispositivo. Un material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones puede tener la fórmula general  $CMX_3$ , donde: C comprende uno o más cationes (por ejemplo, una amina, amonio, un metal del Grupo 1, un metal del Grupo 2 y/u otros cationes o compuestos similares a cationes); M comprende uno o más metales (incluyendo los ejemplos Fe, Co, Ni, Cu, Sn, Pb, Bi, Ge, Ti y Zr); y X comprende uno o más aniones. En algunas realizaciones, C puede incluir uno o más cationes orgánicos.

En determinadas realizaciones, C puede incluir un amonio, un catión orgánico de fórmula general  $[NR_4]^+$  donde los grupos R pueden ser grupos iguales o diferentes. Los grupos R adecuados incluyen, pero sin limitación: metilo, etilo, propilo, butilo, grupo pentilo o isómero de los mismos; cualquier alcano, alqueno o alquino  $C_xH_y$ , donde  $x = 1-20$ ,  $y = 1-42$ , cíclicos, ramificados o de cadena lineal; haluros de alquilo,  $C_xH_yX_z$ ,  $x = 1-20$ ,  $y = 0-42$ ,  $z = 1-42$ ,  $X = F, Cl, Br$  o  $I$ ; cualquier grupo aromático (por ejemplo, fenilo, alquilfenilo, alcoxfenilo, piridina, naftalina); complejos cíclicos donde hay al menos un nitrógeno contenido dentro del anillo (por ejemplo, piridina, pirrol, pirrolidina, piperidina, tetrahidroquinolina); cualquier grupo que contenga azufre (por ejemplo, sulfóxido, tiol, sulfuro de alquilo); cualquier grupo que contenga nitrógeno (nitroxido, amina); cualquier grupo que contenga fósforo (fosfato); cualquier grupo que contenga boro (por ejemplo, ácido borónico); cualquier ácido orgánico (por ejemplo, ácido acético, ácido propanoico); y derivados de éster o amida de los mismos; cualquier aminoácido (por ejemplo, glicina, cisteína, prolina, ácido glutámico, arginina, serina, histidina, ácido 5-amoniovalérico) incluyendo derivados alfa, beta, gamma y superiores; cualquier grupo que contenga silicio (por ejemplo, siloxano); y cualquier alcoxi o grupo,  $-OC_xH_y$ , donde  $x = 0-20$ ,  $y = 1-42$ .

En determinadas realizaciones, C puede incluir un formamidinio, un catión orgánico de fórmula general  $[R_2NCRNR_2]^+$  donde los grupos R pueden ser grupos iguales o diferentes. Los grupos R adecuados incluyen, pero sin limitación: hidrógeno, metilo, etilo, propilo, butilo, grupo pentilo o isómero de los mismos; cualquier alcano, alqueno o alquino  $C_xH_y$ , donde  $x = 1-20$ ,  $y = 1-42$ , cíclicos, ramificados o de cadena lineal; haluros de alquilo,  $C_xH_yX_z$ ,  $x = 1-20$ ,  $y = 0-42$ ,  $z = 1-42$ ,  $X = F, Cl, Br$  o  $I$ ; cualquier grupo aromático (por ejemplo, fenilo, alquilfenilo, alcoxfenilo, piridina, naftalina); complejos cíclicos donde hay al menos un nitrógeno contenido dentro del anillo (por ejemplo, imidazol, bencimidazol, dihidropirimidina, (azolidinilidenmetil)pirrolidina, triazol); cualquier grupo que contenga azufre (por ejemplo, sulfóxido, tiol, sulfuro de alquilo); cualquier grupo que contenga nitrógeno (nitroxido, amina); cualquier grupo que contenga fósforo (fosfato); cualquier grupo que contenga boro (por ejemplo, ácido borónico); cualquier ácido orgánico (ácido acético, ácido propanoico) y derivados de éster o amida de los mismos; cualquier aminoácido (por ejemplo, glicina, cisteína, prolina, ácido glutámico, arginina, serina, histidina, ácido 5-amoniovalérico) incluyendo derivados alfa, beta, gamma y superiores; cualquier grupo que contenga silicio (por ejemplo, siloxano); y cualquier alcoxi o grupo,  $-OC_xH_y$ , donde  $x = 0-20$ ,  $y = 1-42$ .



Fórmula 1

La Fórmula 1 ilustra la estructura de un catión de formamidinio que tiene la fórmula general de  $[R_2NCRNR_2]^+$  como se ha descrito anteriormente. La Fórmula 2 ilustra estructuras de ejemplo de varios cationes de formamidinio que pueden servir como catión "C" en un material de perovskita.

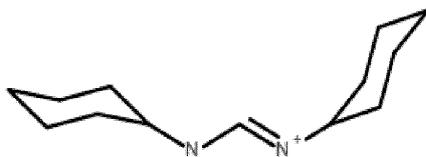


Hidroxi-[(hidroxiamino)metilen]amonio

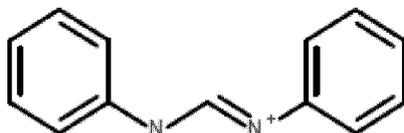


Metil(metilaminometilen)amonio

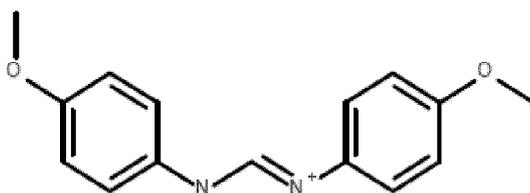
45



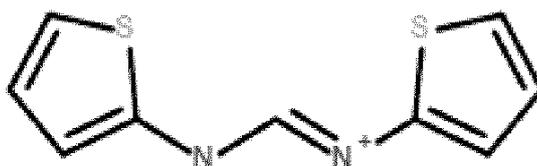
Ciclohexil-[(ciclohexilamino)metilen]amonio



Anilinometilen(fenil)amonio



(Metoxianilino)metilen-(4-metoxifenil)amonio



Tienil-[(2-tienilamino)metilen]amonio

5

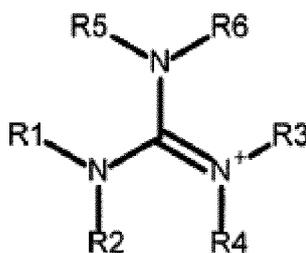
**Fórmula 2**

En determinadas realizaciones, C puede incluir un guanidinio, un catión orgánico de fórmula general  $[(R_2N)_2C=NR_2]^+$  donde los grupos R pueden ser grupos iguales o diferentes. Los grupos R adecuados incluyen, pero sin limitación:

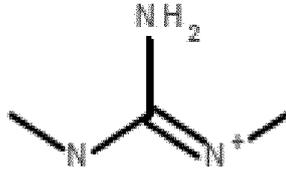
10 hidrógeno, metilo, etilo, propilo, butilo, grupo pentilo o isómero de los mismos; cualquier alcano, alqueno o alquino  $C_xH_y$ , donde  $x = 1-20$ ,  $y = 1-42$ , cíclicos, ramificados o de cadena lineal; haluros de alquilo,  $C_xH_yX_z$ ,  $x = 1-20$ ,  $y = 0-42$ ,  $z = 1-42$ ,  $X = F, Cl, Br$  o  $I$ ; cualquier grupo aromático (por ejemplo, fenilo, alquilfenilo, alcoxifenilo, piridina, naftalina); complejos cíclicos donde hay al menos un nitrógeno contenido dentro del anillo (por ejemplo, octahidropirimido[1,2-

15 a]pirimidina, pirimido[1,2-a]pirimidina, hexahidroimidazo[1,2-a]imidazol, hexahidropirimidin-2-imina); cualquier grupo que contenga azufre (por ejemplo, sulfóxido, tiol, sulfuro de alquilo); cualquier grupo que contenga nitrógeno (nitroxido, amina); cualquier grupo que contenga fósforo (fosfato); cualquier grupo que contenga boro (por ejemplo, ácido borónico); cualquier ácido orgánico (ácido acético, ácido propanoico) y derivados de éster o amida de los mismos; cualquier aminoácido (por ejemplo, glicina, cisteína, prolina, ácido glutámico, arginina, serina, histidina, ácido 5-

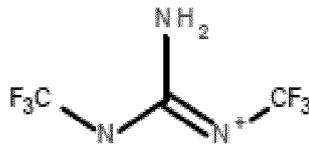
20 amonioaléico) incluyendo derivados alfa, beta, gamma y superiores; cualquier grupo que contenga silicio (por ejemplo, siloxano); y cualquier alcoxi o grupo,  $-OC_xH_y$ , donde  $x = 0-20$ ,  $y = 1-42$ .

**Fórmula 3**

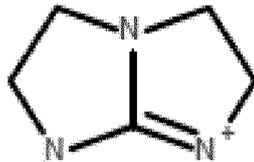
La Fórmula 3 ilustra la estructura de un catión de guanidinio que tiene la fórmula general de  $[(R_2N)_2C=NR_2]^+$  como se ha descrito anteriormente. La Fórmula 4 ilustra ejemplos de estructuras de varios cationes de guanidinio que pueden servir como catión "C" en un material de perovskita.



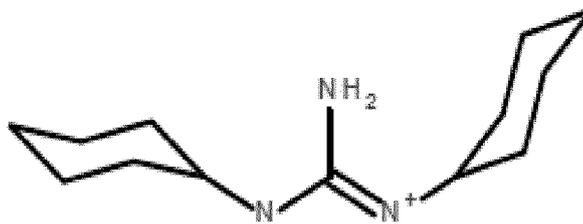
[Amino(metilamino)metilen]-metil-amonio



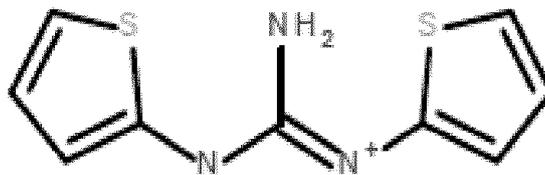
[Amino-(trifluorometilamino)metilen]-(trifluorometil)amonio



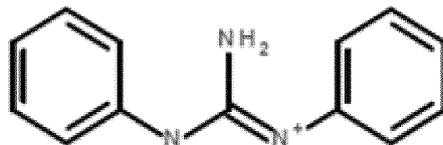
2,3,5,6-Tetrahidro-1H-imidazo[1,2-a]imidazol-7-io



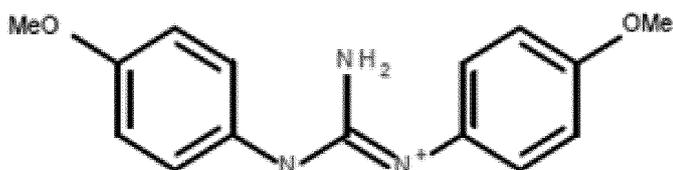
[Amino-(ciclohexilamino)metilen]-ciclohexil-amonio



[Amino-(2-tienilamino)metilen]-(2-tienil)amonio



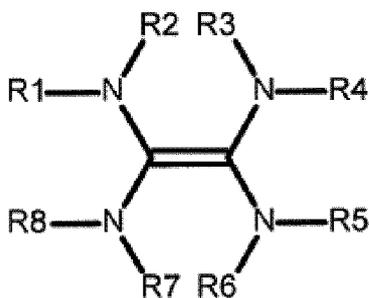
[Amino(anilino)metilen]-fenil-amonio



[Amino-(4-metoxianilino)metileno]-(4-metoxifenil)amonio

**Fórmula 4**

- 5 En determinadas realizaciones, C puede incluir un catión de eteno tetramina, un catión orgánico de fórmula general  $[(R_2N)_2C=C(NR_2)_2]^+$  donde los grupos R pueden ser grupos iguales o diferentes. Los grupos R adecuados incluyen, pero sin limitación: hidrógeno, metilo, etilo, propilo, butilo, grupo pentilo o isómero de los mismos; cualquier alcano, alqueno o alquino  $C_xH_y$ , donde  $x = 1-20$ ,  $y = 1-42$ , cíclicos, ramificados o de cadena lineal; haluros de alquilo,  $C_xH_yX_z$ ,  $x = 1-20$ ,  $y = 0-42$ ,  $z = 1-42$ ,  $X = F, Cl, Br$  o  $I$ ; cualquier grupo aromático (por ejemplo, fenilo, alquilfenilo, alcoxfenilo, piridina, naftalina); complejos cíclicos donde hay al menos un nitrógeno contenido dentro del anillo (por ejemplo, 2-hexahidropirimidin-2-ilidenhexahidropirimidina, octahidropirazino[2,3-b]pirazina, pirazino[2,3-b]pirazina, quinoxalino[2,3-b]quinoxalina); cualquier grupo que contenga azufre (por ejemplo, sulfóxido, tiol, sulfuro de alquilo); cualquier grupo que contenga nitrógeno (nitróxido, amina); cualquier grupo que contenga fósforo (fosfato); cualquier grupo que contenga boro (por ejemplo, ácido borónico); cualquier ácido orgánico (ácido acético, ácido propanoico) y derivados de éster o amida de los mismos; cualquier aminoácido (por ejemplo, glicina, cisteína, prolina, ácido glutámico, arginina, serina, histidina, ácido 5-amoniavalérico) incluyendo derivados alfa, beta, gamma y superiores; cualquier grupo que contenga silicio (por ejemplo, siloxano); y cualquier alcoxi o grupo,  $-OCxHy$ , donde  $x = 0-20$ ,  $y = 1-42$ .

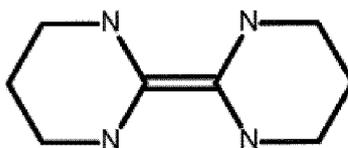


20

**Fórmula 5**

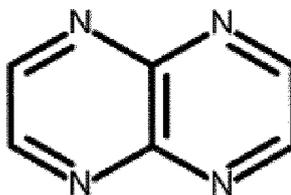
- 25 La Fórmula 5 ilustra la estructura de un catión de eteno tetramina que tiene la fórmula general de  $[(R_2N)_2C=C(NR_2)_2]^+$  como se ha descrito anteriormente. La Fórmula 6 ilustra ejemplos de estructuras de varios iones de eteno tetramina que pueden servir como catión "C" en un material de perovskita.

2-hexahidropirimidin-2-ilidenhexahidropirimidina

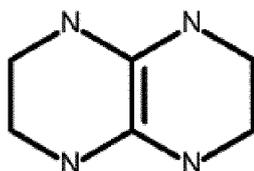


30

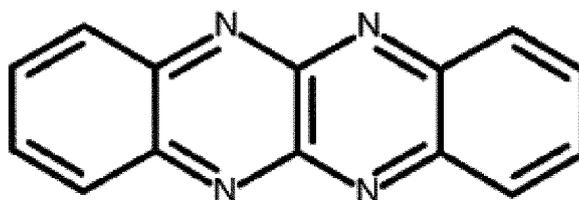
pirazo[2,3-b]pirazina



1,2,3,4,5,6,7,8-octahidropirazo[2,3-b]pirazina



quinoxalino[2,3-b]quinoxalina

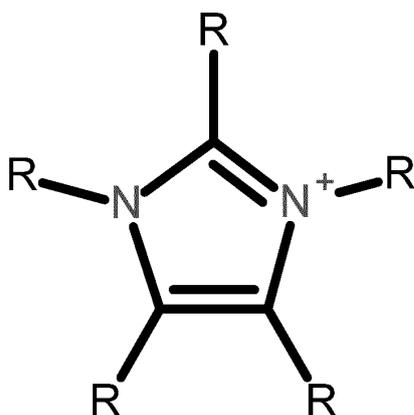


5

**Fórmula 6**

En determinadas realizaciones, C puede incluir un catión de imidazolio, un catión orgánico, cíclico y aromático de fórmula general  $[CRNRCRNRCR]^+$  donde los grupos R pueden ser grupos iguales o diferentes. Los grupos R adecuados pueden incluir, pero sin limitación: hidrógeno, metilo, etilo, propilo, butilo, grupo pentilo o isómero de los mismos; cualquier alcano, alqueno o alquino  $C_xH_y$ , donde  $x = 1-20$ ,  $y = 1-42$ , cíclicos, ramificados o de cadena lineal; haluros de alquilo,  $C_xH_yX_z$ ,  $x = 1-20$ ,  $y = 0-42$ ,  $z = 1-42$ ,  $X = F, Cl, Br$  o  $I$ ; cualquier grupo aromático (por ejemplo, fenilo, alquilfenilo, alcoxifenilo, piridina, naftalina); complejos cíclicos donde hay al menos un nitrógeno contenido dentro del anillo (por ejemplo, 2-hexahidropirimidin-2-ilidhexahidropirimidina, octahidropirazino[2,3-b]pirazina, pirazino[2,3-b]pirazina, quinoxalino[2,3-b]quinoxalina); cualquier grupo que contenga azufre (por ejemplo, sulfóxido, tior, sulfuro de alquilo); cualquier grupo que contenga nitrógeno (nitroxido, amina); cualquier grupo que contenga fósforo (fosfato); cualquier grupo que contenga boro (por ejemplo, ácido borónico); cualquier ácido orgánico (ácido acético, ácido propanoico) y derivados de éster o amida de los mismos; cualquier aminoácido (por ejemplo, glicina, cisteína, prolina, ácido glutámico, arginina, serina, histidina, ácido 5-amoniovalérico) incluyendo derivados alfa, beta, gamma y superiores; cualquier grupo que contenga silicio (por ejemplo, siloxano); y cualquier alcoxi o grupo,  $-OC_xH_y$ , donde  $x = 0-20$ ,  $y = 1-42$ .

20



## Fórmula 7

En algunas realizaciones, X puede incluir uno o más haluros. En determinadas realizaciones, X puede incluir en su lugar o además un anión del Grupo 16. En determinadas realizaciones, el anión del Grupo 16 puede ser sulfuro o seleniuro. En determinadas realizaciones, X puede incluir en su lugar o además uno o más pseudohaluros (por ejemplo, cianuro, cianato, isocianato, fulminato, tiocianato, isotiocianato, azida, tetracarbonilcobaltato, carbamoildicianometanida, dicianonitrosometanida, dicianamida y tricrianometanida). En algunas realizaciones, cada catión orgánico C puede ser más grande que cada metal M y cada anión X puede ser capaz de unirse tanto con un catión C como con un metal M. Los ejemplos de materiales de perovskita de acuerdo con diversas realizaciones incluyen  $\text{CsSnI}_3$  (tratado anteriormente en el presente documento) y  $\text{Cs}_x\text{Sn}_y\text{I}_z$  (variando x, y y z de acuerdo con el análisis anterior). Otros ejemplos incluyen compuestos de fórmula general  $\text{CsSnX}_3$ , donde X puede ser uno cualquiera o más de:  $\text{I}_3$ ,  $\text{I}_{2,95}\text{F}_{0,05}$ ;  $\text{I}_2\text{Cl}$ ;  $\text{ICl}_2$ ; y  $\text{Cl}_3$ . En otras realizaciones, X puede comprender uno cualquiera o más de I, Cl, F y Br en cantidades de manera que la relación total de X en comparación con Cs y Sn dé como resultado la estequiometría general de  $\text{CsSnX}_3$ . En algunas realizaciones, la estequiometría combinada de los elementos que constituyen X puede seguir las mismas reglas que  $\text{I}_2$  como se ha analizado anteriormente con respecto a  $\text{Cs}_x\text{Sn}_y\text{I}_z$ . Otros ejemplos más incluyen compuestos de fórmula general  $\text{RNH}_3\text{PbX}_3$ , donde R puede ser  $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$ , variando n de 0 a 10, y X puede incluir uno cualquiera o más de F, Cl, Br e I en cantidades de manera que la relación total de X en comparación con el catión  $\text{RNH}_3$  y el metal Pb dé como resultado la estequiometría general de  $\text{RNH}_3\text{PbX}_3$ . Además, algunos ejemplos específicos de R incluyen H, cadenas alquílicas (por ejemplo,  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2$  y así sucesivamente) y aminoácidos (por ejemplo, glicina, cisteína, prolina, ácido glutámico, arginina, serina, histidina, ácido 5-amoniovalérico) incluyendo derivados alfa, beta, gamma y superiores.

## Diseño del dispositivo de material de perovskita compuesto

En algunas realizaciones, la presente divulgación puede proporcionar un diseño compuesto de un dispositivo FV y otros dispositivos similares (por ejemplo, baterías, baterías FV híbridas, FET, LED, etc.) que incluye uno o más materiales de perovskita. Por ejemplo, uno o más materiales de perovskita pueden servir como uno o los dos materiales activos primero y segundo de algunas realizaciones (por ejemplo, los materiales activos 2810 y 2815 de la FIG. 5). En términos más generales, algunas realizaciones de la presente divulgación proporcionan un dispositivo FV u otros dispositivos que tienen una capa activa que comprende uno o más materiales de perovskita. En dichas realizaciones, el material de perovskita (es decir, el material que incluye uno o más materiales de perovskita) puede emplearse en capas activas de diversas arquitecturas. Además, el material de perovskita puede cumplir la función o las funciones de uno o más componentes de una capa activa (por ejemplo, material de transporte de carga, material mesoporoso, material fotoactivo y/o material interfacial, cada uno de los cuales se analiza con más detalle a continuación). En algunas realizaciones, los mismos materiales de perovskita pueden cumplir múltiples funciones de este tipo, aunque en otras realizaciones, puede incluirse una pluralidad de materiales de perovskita en un dispositivo, cumpliendo cada material de perovskita una o más de dichas funciones. En determinadas realizaciones, cualquiera sea el papel para el que un material de perovskita pueda servir, puede prepararse y/o estar presente en un dispositivo en diversos estados. Por ejemplo, puede ser sustancialmente sólido en algunas realizaciones. En otras realizaciones, puede ser una solución (por ejemplo, el material de perovskita puede estar disuelto en líquido y presente en dicho líquido en su subespecie iónica individual); o puede ser una suspensión (por ejemplo, de partículas de material de perovskita). Una solución o suspensión puede aplicarse como recubrimiento o depositarse de otro modo dentro de un dispositivo (por ejemplo, sobre otro componente del dispositivo tal como una capa mesoporosa, interfacial, de transporte de carga, fotoactiva u otra capa, y/o sobre un electrodo). Los materiales de perovskita en algunas realizaciones pueden formarse in situ sobre la superficie de otro componente de un dispositivo (por ejemplo, mediante deposición de vapor en forma de un sólido de película fina). Puede emplearse cualquier otro medio adecuado para formar una capa sólida o líquida que comprenda el material de perovskita.

En general, un dispositivo de material de perovskita puede incluir un primer electrodo, un segundo electrodo y una capa activa que comprenda un material de perovskita, la capa activa dispuesta al menos parcialmente entre el primer y el segundo electrodo. En algunas realizaciones, el primer electrodo puede ser uno de entre un ánodo y un cátodo y el segundo electrodo puede ser el otro de entre un ánodo y un cátodo. Una capa activa de acuerdo con determinadas realizaciones puede incluir uno o más componentes de capa activa, incluyendo uno cualquiera o más de: material de transporte de carga; electrolito líquido; material mesoporoso; material fotoactivo (por ejemplo, un colorante, silicio, telurio de cadmio, sulfuro de cadmio, seleniuro de cadmio, seleniuro de cobre indio y galio, arseniuro de galio, fosforo de germanio e indio, polímeros semiconductores, otros materiales fotoactivos); y material interfacial. Cualquiera de estos componentes de capa activa puede incluir uno o más materiales de perovskita. En algunas realizaciones, algunos o todos los componentes de capa activa pueden estar total o parcialmente dispuestos en subcapas. Por ejemplo, la capa activa puede comprender uno cualquiera o más de: una capa interfacial que incluye material interfacial; una capa mesoporosa que incluye material mesoporoso; y una capa de transporte de carga que incluye material de transporte de carga. En algunas realizaciones, el material fotoactivo, tal como un colorante, puede aplicarse como recubrimiento o disponerse de otro modo sobre una cualquiera o más de estas capas. En determinadas realizaciones, una cualquiera o más capas pueden recubrirse con un electrolito líquido. Además, puede incluirse una capa interfacial entre cualesquiera dos o más otras capas de una capa activa de acuerdo con algunas realizaciones, y/o entre una capa y un recubrimiento (tal como entre un colorante y una capa mesoporosa), y/o entre dos

recubrimientos (tal como entre un electrolito líquido y un colorante), y/o entre un componente de capa activa y un electrodo. La referencia a las capas en el presente documento puede incluir una disposición final (por ejemplo, porciones sustancialmente individuales de cada material definibles por separado dentro del dispositivo) y/o la referencia a una capa puede significar la disposición durante la construcción de un dispositivo, a pesar de la posibilidad de la posterior entremezcla de material o materiales en cada capa. En algunas realizaciones, las capas pueden ser individuales y comprender material sustancialmente contiguo (por ejemplo, las capas pueden ser como se ilustra estilísticamente en la FIG. 1). En otras realizaciones, las capas pueden estar sustancialmente entremezcladas (como en el caso de, por ejemplo, BHJ, híbrido y algunas células DSSC), un ejemplo de lo cual se muestra en el primer y el segundo material activo **2618** y **2620** dentro de la capa fotoactiva **2616** en la FIG. 4. En algunas realizaciones, un dispositivo puede comprender una mezcla de estos dos tipos de capas, como también se muestra en el dispositivo de la FIG. 4, que contiene las capas individuales contiguas **2627**, **2626** y **2622**, además de una capa fotoactiva **2616** que comprende capas entremezcladas de material activo primero y segundo **2618** y **2620**. En cualquier caso, cualesquiera dos o más capas de cualquier tipo pueden disponerse, en determinadas realizaciones, adyacentes entre sí (y/o entremezcladas entre sí) de manera que se consiga una gran área superficial de contacto. En determinadas realizaciones, una capa que comprende material de perovskita puede disponerse adyacente a una o más capas más, de manera que se consiga una gran área superficial de contacto (por ejemplo, cuando un material de perovskita presenta una movilidad de carga baja). En otras realizaciones, puede que no sea necesaria una gran área superficial de contacto (por ejemplo, cuando un material de perovskita presenta una movilidad de carga alta).

Un dispositivo de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones puede incluir opcionalmente uno o más sustratos. En algunas realizaciones, uno o ambos electrodos primero y segundo pueden recubrirse o disponerse de otro modo sobre un sustrato, de manera que el electrodo se disponga sustancialmente entre un sustrato y la capa activa. Los materiales de composición de dispositivos (por ejemplo, sustrato, electrodo, capa activa y/o componentes de capa activa) pueden ser en su totalidad o en parte rígidos o flexibles en diversas realizaciones. En algunas realizaciones, un electrodo puede actuar como sustrato, negando de este modo la necesidad de un sustrato separado.

Además, un dispositivo de material de perovskita de acuerdo con determinadas realizaciones puede incluir opcionalmente material de recolección de luz (por ejemplo, en una capa de recolección de luz, tal como la Capa de Recolección de Luz **1601** como se representa en el dispositivo FV de ejemplo representado en la FIG. 2). Además, un dispositivo de material de perovskita puede incluir uno o más aditivos, tales como uno cualquiera o más de los aditivos analizados anteriormente con respecto a algunas realizaciones de la presente divulgación.

La descripción de algunos de los diversos materiales que pueden incluirse en un dispositivo de material de perovskita se hará en parte con referencia a la FIG. 7. La FIG. 7 es un diagrama estilizado de un dispositivo **3900** de material de perovskita de acuerdo con algunas realizaciones. Aunque se ilustran diversos componentes del dispositivo **3900** como capas individuales que comprenden material contiguo, debe entenderse que la FIG. 7 es un diagrama estilizado; por tanto, las realizaciones de acuerdo con la misma pueden incluir dichas capas individuales y/o capas no contiguas, sustancialmente entremezcladas, coherente con el uso de "capas" analizado anteriormente en el presente documento. El dispositivo **3900** incluye los sustratos primero y segundo **3901** y **3913**. Un primer electrodo **3902** se dispone sobre una superficie interna del primer sustrato **3901** y un segundo electrodo **3912** se dispone sobre una superficie interna del segundo sustrato **3913**. Una capa activa **3950** se intercala entre los dos electrodos **3902** y **3912**. La capa activa **3950** incluye una capa mesoporosa **3904**; materiales fotoactivos primero y segundo **3906** y **3908**; una capa de transporte de carga **3910** y varias capas interfaciales. La FIG. 7 ilustra además un ejemplo de dispositivo **3900** de acuerdo con realizaciones en donde subcapas de la capa activa **3950** se separan mediante las capas interfaciales y además en donde se disponen capas interfaciales sobre cada electrodo **3902** y **3912**. En particular, las capas interfaciales segunda, tercera y cuarta **3905**, **3907** y **3909** están respectivamente dispuestas entre cada una de entre la capa mesoporosa **3904**, el primer material fotoactivo **3906**, el segundo material fotoactivo **3908** y la capa de transporte de carga **3910**. Las capas interfaciales primera y quinta **3903** y **3911** se disponen respectivamente entre (i) el primer electrodo **3902** y la capa mesoporosa **3904**; y (ii) la capa de transporte de carga **3910** y el segundo electrodo **3912**. Por tanto, la arquitectura del dispositivo de ejemplo representado en la FIG. 7 puede caracterizarse como: sustrato-electrodo-capa activa-electrodo-sustrato. La arquitectura de la capa activa **3950** puede caracterizarse como: capa interfacial-capa mesoporosa-capa interfacial-material fotoactivo-capa interfacial-material fotoactivo-capa interfacial-capa de transporte de carga-capa interfacial. Como se ha indicado anteriormente, en algunas realizaciones, no tienen por qué haber capas interfaciales presentes; o, pueden incluirse una o más capas interfaciales solo entre determinados, pero no todos, componentes de una capa activa y/o componentes de un dispositivo.

Un sustrato, tal como uno o ambos de los sustratos primero y segundo **3901** y **3913**, puede ser flexible o rígido. Si se incluyen dos sustratos, al menos uno debe ser transparente o translúcido a la radiación electromagnética (EM) (tal como, por ejemplo, radiación UV, visible o IR). Si se incluye un solo sustrato, puede ser igualmente transparente o translúcido, aunque no tiene por qué ser así, siempre que una porción del dispositivo permita que la radiación EM entre en contacto con la capa activa **3950**. Los materiales de sustrato adecuados incluyen uno o más de: vidrio; zafiro; óxido de magnesio (MgO); mica; polímeros (por ejemplo, PET, PEG, polipropileno, polietileno, etc.); cerámica; tejidos (por ejemplo, algodón, seda, lana); madera; pladur; metal; y combinaciones de los mismos.

Como se ha indicado anteriormente, un electrodo (por ejemplo, uno de los electrodos **3902** y **3912** de la FIG. 7) puede ser un ánodo o un cátodo. En algunas realizaciones, un electrodo puede actuar como un cátodo y el otro puede actuar

- como un ánodo. Cualquiera o ambos electrodos **3902** y **3912** pueden acoplarse a conductores, cables, alambres u otros medios que permitan el transporte de carga hacia y/o desde el dispositivo **3900**. Un electrodo puede constituir cualquier material conductor y al menos un electrodo debe ser transparente o translúcido a la radiación EM y/o disponerse de manera que permita que la radiación EM entre en contacto con al menos una porción de la capa activa
- 5 **3950**. Los materiales de electrodo adecuados pueden incluir uno cualquiera o más de: óxido de indio y estaño u óxido de indio dopado con estaño (ITO); óxido de estaño dopado con flúor (FTO); óxido de cadmio (CdO); óxido de cinc, indio y estaño (ZITO); óxido de aluminio y cinc (AZO); aluminio (Al); oro (Au); calcio (Ca); magnesio (Mg); titanio (Ti); acero; carbono (y alótropos del mismo); y combinaciones de los mismos.
- 10 El material mesoporoso (por ejemplo, el material incluido en la capa mesoporosa **3904** de la FIG. 7) puede incluir cualquier material que contenga poros. En algunas realizaciones, los poros pueden tener diámetros que varíen de aproximadamente 1 a aproximadamente 100 nm; en otras realizaciones, el diámetro de los poros puede variar de aproximadamente 2 a aproximadamente 50 nm. El material mesoporoso adecuado incluye uno cualquiera o más de:
- 15 bismuto (Bi); indio (In); molibdeno (Mo); niobio (Nb); níquel (Ni); silicio (Si); titanio (Ti); vanadio (V); cinc (Zn); circonio (Zr); un óxido de uno cualquiera o más de los metales anteriores (por ejemplo, alúmina, ceria, titania, óxido de cinc, circonia, etc.); un sulfuro de uno cualquiera o más de los metales anteriores; un nitruro de uno cualquiera o más de los metales anteriores; y combinaciones de los mismos.
- 20 El material fotoactivo (por ejemplo, el material fotoactivo primero o segundo **3906** o **3908** de la FIG. 7) puede comprender cualquier compuesto fotoactivo, tal como uno cualquiera o más de silicio (en algunos casos, silicio monocristalino), telurio de cadmio, sulfuro de cadmio, seleniuro de cadmio, seleniuro de cobre indio y galio, arseniuro de galio, fosfuro de germanio e indio, uno o más polímeros semiconductores y combinaciones de los mismos. En determinadas realizaciones, el material fotoactivo puede comprender en su lugar o además un colorante (por ejemplo, N719, N3, otros colorantes a base de rutenio). En algunas realizaciones, un colorante (de cualquier composición) puede aplicarse como recubrimiento sobre otra capa (por ejemplo, una capa mesoporosa y/o una capa interfacial). En algunas realizaciones, el material fotoactivo puede incluir uno o más materiales de perovskita. La sustancia fotoactiva que contiene material de perovskita puede tener una forma sólida o, en algunas realizaciones, puede adoptar la forma de un colorante que incluye una suspensión o solución que comprende material de perovskita. Una solución o suspensión de este tipo puede aplicarse como recubrimiento sobre otros componentes del dispositivo de manera similar a otros colorantes. En algunas realizaciones, el material sólido que contiene perovskita puede depositarse mediante cualquier medio adecuado (por ejemplo, deposición de vapor, deposición de solución, colocación directa de material sólido, etc.). Los dispositivos de acuerdo con diversas realizaciones pueden incluir uno, dos, tres o más compuestos fotoactivos (por ejemplo, uno, dos, tres o más materiales de perovskita, o combinaciones de los mismos).
- 25 En determinadas realizaciones que incluyen múltiples colorantes u otros materiales fotoactivos, cada uno de los dos o más colorantes u otros materiales fotoactivos pueden separarse mediante una o más capas interfaciales. En algunas realizaciones, múltiples colorantes y/o compuestos fotoactivos pueden entremezclarse, al menos en parte.
- 30 El material de transporte de carga (por ejemplo, el material de transporte de carga de la capa de transporte de carga **3910** de la FIG. 7) puede incluir material de transporte de carga en estado sólido (es decir, un electrolito etiquetado coloquialmente en estado sólido) o puede incluir un electrolito líquido y/o un líquido iónico. Cualquiera de entre el electrolito líquido, el líquido iónico y el material de transporte de carga en estado sólido puede denominarse material de transporte de carga. Como se usa en el presente documento, "material de transporte de carga" se refiere a cualquier material, sólido, líquido o de otro modo, capaz de recoger transportadores de carga y/o transportar transportadores de carga. Por ejemplo, en dispositivos FV de acuerdo con algunas realizaciones, un material de transporte de carga puede ser capaz de transportar transportadores de carga a un electrodo. Los transportadores de carga pueden incluir huecos (cuyo transporte podría hacer que el material de transporte de carga se etiquetara adecuadamente "material de transporte de huecos") y electrones. Los huecos pueden transportarse hacia un ánodo y los electrones hacia un cátodo, dependiendo de la colocación del material de transporte de carga con respecto a un cátodo o un ánodo en un dispositivo FV u otro dispositivo. Los ejemplos adecuados de material de transporte de carga de acuerdo con algunas realizaciones pueden incluir uno cualquiera o más de: material de perovskita;  $I^+/I_3^-$ ; complejos de Co; politiofenos (por ejemplo, poli(3-hexiltiofeno) y derivados del mismo o P3HT); copolímeros a base de carbazol tales como poliheptadecanilcarbazol, ditienilbenzotiadiazol y derivados de los mismos (por ejemplo, PCDTBT); otros copolímeros tales como policiclopentaditiofeno-benzotiadiazol y derivados del mismo (por ejemplo, PCPDTBT), polibenzoditiofenil-tienotiofenodiilo y derivados del mismo (por ejemplo, PTB6, PTB7, PTB7-th, PCE-10); compuestos de poli(triaril amina) y derivados de los mismos (por ejemplo, PTAA); Espiro-OMeTAD; polifenileno vinileno y derivados de los mismos (por ejemplo, MDMO-PFV, MEH-PFV); fullerenos y/o derivados de fullereno (por ejemplo, C60, PCBM); y combinaciones de los mismos. En determinadas realizaciones, el material de transporte de carga puede incluir cualquier material, sólido o líquido, capaz de recoger transportadores de carga (electrones o huecos) y/o capaz de transportar transportadores de carga. Por tanto, el material de transporte de carga de algunas realizaciones puede ser material semiconductor y/o activo de tipo *n* o *p*. El material de transporte de carga puede disponerse cerca de uno de los electrodos de un dispositivo. En algunas realizaciones, puede disponerse adyacente a un electrodo, aunque en otras realizaciones una capa interfacial puede disponerse entre el material de transporte de carga y un electrodo (como se muestra, por ejemplo, en la FIG. 7 con la quinta capa interfacial **3911**). En determinadas realizaciones, el tipo de material de transporte de carga puede seleccionarse basándose en el electrodo al que está próximo. Por ejemplo, si el material de transporte de carga recoge y/o transporta huecos, puede estar cerca de un ánodo de manera de
- 35  
40  
45  
50  
55  
60  
65

transportar los huecos al ánodo. Sin embargo, el material de transporte de carga puede, en cambio, colocarse cerca de un cátodo y seleccionarse o construirse de manera que transporte electrones al cátodo.

5 Como se ha indicado anteriormente, los dispositivos de acuerdo con diversas realizaciones pueden incluir opcionalmente una capa interfacial entre cualesquiera dos otras capas y/o materiales, aunque los dispositivos, de acuerdo con algunas realizaciones, no tienen por qué contener capas interfaciales. Por tanto, por ejemplo, un dispositivo de material de perovskita puede contener cero, uno, dos, tres, cuatro, cinco o más capas interfaciales (tal como el dispositivo de ejemplo de la FIG. 7, que contiene cinco capas interfaciales **3903**, **3905**, **3907**, **3909**, and **3911**).  
 10 Una capa interfacial puede incluir una capa interfacial de recubrimiento fino de acuerdo con realizaciones analizadas anteriormente en el presente documento (por ejemplo, que comprenda alúmina y/u otras partículas de óxido metálico, y/o una bicapa de titania/óxido metálico, y/u otros compuestos de acuerdo con capas interfaciales de recubrimiento fino como se han analizado en otro lugar en el presente documento). Una capa interfacial de acuerdo con algunas realizaciones puede incluir cualquier material adecuado para potenciar el transporte y/o la recogida de carga entre dos capas o materiales; también puede ayudar a evitar o reducir la probabilidad de recombinación de cargas una vez que  
 15 se ha transportado una carga lejos de uno de los materiales adyacentes a la capa interfacial. Los materiales interfaciales adecuados pueden incluir uno cualquiera o más de: cualquier material mesoporoso y/o material interfacial analizado en otro lugar del presente documento; Al; Bi; Co; Cu; Fe; In; Mn; Mo; Ni; platino (Pt); Si; Sn; Ta; Ti; V; W; Nb; Zn; Zr; óxidos de cualquiera de los metales anteriores (por ejemplo, alúmina, sílice, titania); un sulfuro de cualquiera de los metales anteriores; un nitruro de cualquiera de los metales anteriores; grupos de alquil sililo funcionalizados o no funcionalizados; grafito; grafeno; fullerenos; nanotubos de carbono; y combinaciones de los mismos (incluyendo, en algunas realizaciones, bicapas de materiales combinados). En algunas realizaciones, una capa interfacial puede incluir material de perovskita.

25 Un dispositivo de acuerdo con la representación estilizada de la FIG. 7 puede ser, en algunas realizaciones, un dispositivo FV, tal como una DSSC, BHJ o célula solar híbrida. En algunas realizaciones, los dispositivos de acuerdo con la FIG. 7 pueden constituir dispositivos FV multicelulares en paralelo o en serie, baterías, baterías FV híbridas, FET, LEDs y/o cualquier otro dispositivo analizado en el presente documento. Por ejemplo, una BHJ de algunas realizaciones puede incluir dos electrodos correspondientes a los electrodos **3902** y **3912**, y una capa activa que comprende al menos dos materiales en una interfaz de heterounión (por ejemplo, dos cualesquiera de los materiales  
 30 y/o capas de la capa activa **3950**). En determinadas realizaciones, otros dispositivos (tales como baterías FV híbridas, dispositivos FV multicelulares en paralelo o en serie, etc.) pueden comprender una capa activa que incluye un material de perovskita, correspondiente a la capa activa **3950** de la FIG. 7. En resumen, la naturaleza estilizada de la representación del dispositivo de ejemplo de la FIG. 7 no debe limitar de ninguna manera la estructura o arquitectura permitida de los dispositivos de diversas realizaciones de acuerdo con la FIG. 7.

35 Se analizarán realizaciones de ejemplo adicionales, más específicas, de dispositivos de perovskita, en términos de representaciones estilizadas adicionales de dispositivos de ejemplo. La naturaleza estilizada de estas representaciones, las FIG. 8-18, de forma similar, no tiene por objeto restringir el tipo de dispositivo que en algunas realizaciones puede construirse de acuerdo con una o más de las FIG. 8-18. Es decir, las arquitecturas que se presentan en las FIG. 8-18 pueden adaptarse de manera de proporcionar las BHJ, baterías, FET, baterías FV híbridas, dispositivos FV multicelulares en serie, dispositivos FV multicelulares en paralelo y otros dispositivos similares de otras realizaciones de la presente divulgación, de acuerdo con cualesquier medios adecuados (incluyendo tanto los que se analizan expresamente en el presente documento, como otros medios adecuados, que serán evidentes para los expertos en la materia con el beneficio de la presente divulgación).

45 La FIG. 8 muestra un dispositivo de ejemplo **4100** de acuerdo con diversas realizaciones. El dispositivo **4100** ilustra realizaciones que incluyen los sustratos de vidrio primero y segundo **4101** y **4109**. Cada sustrato de vidrio tiene un electrodo de FTO dispuesto sobre su superficie interna (primer electrodo **4102** y segundo electrodo **4108**, respectivamente) y cada electrodo tiene una capa interfacial depositada sobre su superficie interna: la primera capa interfacial de TiO<sub>2</sub> **4103** se deposita sobre el primer electrodo **4102** y la segunda capa interfacial de Pt **4107** se deposita sobre el segundo electrodo **4108**. Entre las dos capas interfaciales se encuentran: una capa mesoporosa **4104** (que comprende TiO<sub>2</sub>); material fotoactivo **4105** (que comprende el material de perovskita MAPbI<sub>3</sub>); y una capa de transporte de carga **4106** (en el presente documento que comprende CsSnI<sub>3</sub>).

55 La FIG. 9 muestra un dispositivo de ejemplo **4300** que omite una capa mesoporosa. El dispositivo **4300** incluye un compuesto fotoactivo de material de perovskita **4304** (que comprende MAPbI<sub>3</sub>) intercalado entre las capas interfaciales primera y segunda **4303** y **4305** (que comprenden titania y alúmina, respectivamente). La capa interfacial de titania **4303** se aplica como recubrimiento sobre un primer electrodo de FTO **4302**, que a su vez se dispone sobre una superficie interna de un sustrato de vidrio **4301**. La capa de transporte de carga **4306** de espiro-OMeTAD se aplica como recubrimiento sobre una capa interfacial de alúmina **4305** y se dispone sobre una superficie interna de un  
 60 segundo electrodo de oro **4307**.

65 Como será evidente para un experto habitual en la materia con el beneficio de la presente divulgación, son posibles diversas otras realizaciones, tales como un dispositivo con múltiples capas fotoactivas (como se ejemplifica mediante las capas fotoactivas **3906** y **3908** del dispositivo de ejemplo de la FIG. 7). En algunas realizaciones, como se ha analizado anteriormente, cada capa fotoactiva puede separarse mediante una capa interfacial (como se muestra en la

tercera capa interfacial **3907** en la FIG. 7). Además, una capa mesoporosa puede disponerse sobre un electrodo tal como se ilustra en la FIG. 7 disponiendo la capa mesoporosa **3904** sobre el primer electrodo **3902**. Aunque la FIG. 7 representa una capa interfacial interpuesta **3903** dispuesta entre las dos, en algunas realizaciones, puede disponerse una capa mesoporosa directamente sobre un electrodo.

5

### Ejemplos adicionales de dispositivos de material de perovskita

Otros ejemplos de arquitecturas de dispositivos de material de perovskita serán evidentes para los expertos en la materia con el beneficio de la presente divulgación. Los ejemplos incluyen, pero sin limitación, dispositivos que contienen capas activas que tienen cualquiera de las siguientes arquitecturas: (1) electrolítico líquido-material de perovskita-capas mesoporosa; (2) material de perovskita-colorante-capas mesoporosa; (3) primer material de perovskita-segundo material de perovskita-capas mesoporosa; (4) primer material de perovskita-segundo material de perovskita; (5) primer material de perovskita-colorante-segundo material de perovskita; (6) material de transporte de carga en estado sólido-material de perovskita; (7) material de transporte de carga en estado sólido-colorante-material de perovskita-capas mesoporosa; (8) material de transporte de carga en estado sólido-material de perovskita-colorante-capas mesoporosa; (9) material de transporte de carga en estado sólido-colorante-material de perovskita-capas mesoporosa; y (10) material de transporte de carga en estado sólido-material de perovskita-colorante-capas mesoporosa. Los componentes individuales de cada arquitectura de ejemplo (por ejemplo, capa mesoporosa, material de transporte de carga, etc.) puede estar de acuerdo con el análisis anterior para cada componente. Además, cada arquitectura de ejemplo se analiza con más detalle a continuación.

Como ejemplo particular de algunas de las capas activas mencionadas anteriormente, en algunas realizaciones, una capa activa puede incluir un electrolito líquido, material de perovskita y una capa mesoporosa. La capa activa de algunas de estas realizaciones puede tener sustancialmente la arquitectura: electrolítico líquido-material de perovskita-capas mesoporosa. Cualquier electrolito líquido puede ser adecuado; y cualquier capa mesoporosa (por ejemplo,  $\text{TiO}_2$ ) puede ser adecuada. En algunas realizaciones, el material de perovskita puede depositarse sobre la capa mesoporosa y posteriormente recubrirse con el electrolito líquido. El material de perovskita de algunas de dichas realizaciones puede actuar, al menos en parte, como colorante (por tanto, puede ser fotoactivo).

En otras realizaciones de ejemplo, una capa activa puede incluir material de perovskita, un colorante y una capa mesoporosa. La capa activa de algunas de estas realizaciones puede tener sustancialmente la arquitectura: material de perovskita-colorante-capas mesoporosa. El colorante puede aplicarse como recubrimiento sobre la capa mesoporosa y el material de perovskita puede disponerse sobre la capa mesoporosa recubierta con colorante. El material de perovskita puede actuar como material de transporte de huecos en algunas de estas realizaciones.

En otras realizaciones de ejemplo, una capa activa puede incluir un primer material de perovskita, un segundo material de perovskita y una capa mesoporosa. La capa activa de algunas de estas realizaciones puede tener sustancialmente la arquitectura: primer material de perovskita-segundo material de perovskita-capas mesoporosa. El primer y el segundo material de perovskita pueden comprender cada uno el mismo o los mismos materiales de perovskita o pueden comprender diferentes materiales de perovskita. Cualquiera de los materiales de perovskita primero y segundo puede ser fotoactivo (por ejemplo, un primer y/o segundo material de perovskita de dichas realizaciones puede actuar al menos en parte como colorante).

En determinadas realizaciones de ejemplo, una capa activa puede incluir un primer material de perovskita y un segundo material de perovskita. La capa activa de algunas de estas realizaciones puede tener sustancialmente la arquitectura: primer material de perovskita-segundo material de perovskita. Los materiales de perovskita primero y segundo pueden comprender cada uno el mismo o los mismos materiales de perovskita o pueden comprender diferentes materiales de perovskita. Cualquiera de los materiales de perovskita primero y segundo puede ser fotoactivo (por ejemplo, un primer y/o segundo material de perovskita de dichas realizaciones puede actuar al menos en parte como colorante). Además, cualquiera de los materiales de perovskita primero y segundo puede ser capaz de actuar como material de transporte de huecos. En algunas realizaciones, uno de los materiales de perovskita primero y segundo actúa como un material de transporte de electrones y el otro de los materiales de perovskita primero y segundo actúa como un colorante. En algunas realizaciones, los materiales de perovskita primero y segundo pueden disponerse dentro de la capa activa de manera que se consiga una gran área interfacial entre el primer material de perovskita y el segundo material de perovskita, tal como en la disposición que se muestra para el primer y segundo material activo **2810** y **2815**, respectivamente, en la FIG. 5 (o como se muestra de manera similar mediante el material de tipo p y n **2618** y **2620**, respectivamente, en la FIG. 4).

En realizaciones de ejemplo adicionales, una capa activa puede incluir un primer material de perovskita, un colorante y un segundo material de perovskita. La capa activa de algunas de estas realizaciones puede tener sustancialmente la arquitectura: primer material de perovskita-colorante-segundo material de perovskita. Cualquiera de los materiales de perovskita primero y segundo puede actuar como material de transporte de carga y el otro de los materiales de perovskita primero y segundo puede actuar como colorante. En algunas realizaciones, los materiales de perovskita tanto primero como segundo pueden servir, al menos en parte, para funciones solapadas, similares y/o idénticas (por ejemplo, ambos pueden servir como colorante y/o ambos pueden servir como material de transporte de huecos).

65

En algunas otras realizaciones de ejemplo, una capa activa puede incluir un material de transporte de carga en estado sólido y un material de perovskita. La capa activa de algunas de estas realizaciones puede tener sustancialmente la arquitectura: material de transporte de carga en estado sólido-material de perovskita. Por ejemplo, el material de perovskita y el material de transporte de carga en estado sólido pueden disponerse dentro de la capa activa de manera que se consiga una gran área interfacial, tal como en la disposición que se muestra para el primer y segundo material activo **2810** y **2815**, respectivamente, en la FIG. 5 (o como se muestra de manera similar mediante el material de tipo p y n **2618** y **2620**, respectivamente, en la FIG. 4).

En otras realizaciones de ejemplo, una capa activa puede incluir un material de transporte de carga en estado sólido, un colorante, material de perovskita y una capa mesoporosa. La capa activa de algunas de estas realizaciones puede tener sustancialmente la arquitectura: material de transporte de carga en estado sólido-colorante-material de perovskita-capas mesoporosa. La capa activa de algunas otras de estas realizaciones puede tener sustancialmente la arquitectura: material de transporte de carga en estado sólido-material de perovskita-colorante-capas mesoporosa. El material de perovskita puede servir en algunas realizaciones como un segundo colorante. El material de perovskita puede, en dichas realizaciones, aumentar la amplitud del espectro de la luz visible absorbida por un dispositivo FV u otro dispositivo que incluya una capa activa de dichas realizaciones. En determinadas realizaciones, el material de perovskita puede también, o en su lugar, servir como capa interfacial entre el colorante y la capa mesoporosa, y/o entre el colorante y el material de transporte de carga.

En algunas realizaciones de ejemplo, una capa activa puede incluir un electrolito líquido, un colorante, un material de perovskita y una capa mesoporosa. La capa activa de algunas de estas realizaciones puede tener sustancialmente la arquitectura: material de transporte de carga en estado sólido-colorante-material de perovskita-capas mesoporosa. La capa activa de algunas otras de estas realizaciones puede tener sustancialmente la arquitectura: material de transporte de carga en estado sólido-material de perovskita-colorante-capas mesoporosa. El material de perovskita puede servir como material fotoactivo, una capa interfacial y/o una combinación de los mismos.

Algunas realizaciones proporcionan dispositivos FV de BHJ que incluyen materiales de perovskita. Por ejemplo, una BHJ de algunas realizaciones puede incluir una capa fotoactiva (por ejemplo, la capa fotoactiva **2404** de la FIG. 3), que puede incluir uno o más materiales de perovskita. La capa fotoactiva de una BHJ de este tipo puede también, o en su lugar, incluir uno cualquiera o más de los componentes de ejemplo enumerados anteriormente con respecto a las capas activas de DSSC. Además, en algunas realizaciones, la capa fotoactiva de BHJ puede tener una arquitectura de acuerdo con una cualquiera de las realizaciones de ejemplo de capas activas de DSSC analizadas anteriormente.

En algunas realizaciones, cualquiera de las capas activas que incluyen materiales de perovskita incorporadas en los dispositivos FV u otros dispositivos como se analizan en el presente documento, puede incluir adicionalmente cualquiera de los diversos materiales adicionales que también se analizan en el presente documento como adecuados para su inclusión en una capa activa. Por ejemplo, cualquier capa activa que incluya material de perovskita puede incluir adicionalmente una capa interfacial de acuerdo con diversas realizaciones analizadas en el presente documento (tal como, por ejemplo, una capa interfacial de recubrimiento fino). A modo de ejemplo adicional, una capa activa que incluya material de perovskita puede incluir adicionalmente una capa de recolección de luz, tal como la Capa de Recolección de Luz **1601** como se representa en el dispositivo FV de ejemplo representado en la FIG. 2.

#### **Formulación de la capa activa de material de perovskita**

Como se ha analizado anteriormente, en algunas realizaciones, un material de perovskita en la capa activa puede tener la formulación  $CMX_{3-y}X'_y$  ( $0 \geq y \geq 3$ ), donde: C comprende uno o más cationes (por ejemplo, una amina, amonio, un metal del Grupo 1, un metal del Grupo 2, formamidio, guanidino, eteno tetramina y/u otros cationes o compuestos similares a cationes); M comprende uno o más metales (por ejemplo, Fe, Cd, Co, Ni, Cu, Hg, Sn, Pb, Bi, Ge, Ti, Zn y Zr); y X y X' comprenden uno o más aniones. En una realización, el material de perovskita puede comprender  $CPbI_{3-y}Cl_y$ . En determinadas realizaciones, el material de perovskita puede depositarse como capa activa en un dispositivo FV mediante, por ejemplo, vaciado por goteo, vaciado por agitación, impresión por boquilla de ranura ancha, serigrafía o impresión por inyección de tinta sobre una capa de sustrato usando las etapas que se describen a continuación.

En primer lugar, se forma una tinta precursora de haluro de plomo. Una cantidad de haluro de plomo puede concentrarse en un vial limpio y seco, dentro de una caja de manipulación con guantes (es decir, una caja de atmósfera controlada con orificios que contienen guantes que permite la manipulación de materiales en un ambiente sin aire). Los haluros de plomo adecuados incluyen, pero sin limitación, yoduro de plomo (II), bromuro de plomo (II), cloruro de plomo (II) y fluoruro de plomo (II). El haluro de plomo puede comprender una sola especie de haluro de plomo o puede comprender una mezcla de haluro de plomo en una relación precisa. En determinadas realizaciones, la mezcla de haluro de plomo puede comprender cualquier relación binaria, ternaria o cuaternaria del 0,001-100 % molar de yoduro, bromuro, cloruro o fluoruro. En una realización, la mezcla de haluro de plomo puede comprender cloruro de plomo (II) y yoduro de plomo (II) en una relación de aproximadamente 10:90 mol:mol. En otras realizaciones, la mezcla de haluro de plomo puede comprender cloruro de plomo (II) y yoduro de plomo (II) en una relación de aproximadamente 5:95, aproximadamente 7,5:92,5, o aproximadamente 15:85 mol:mol.

Como alternativa, pueden usarse otros precursores de sales de plomo junto con, o en lugar de, sales de haluro de

plomo para formar la tinta precursora. Las sales precursoras adecuadas pueden comprender cualquier combinación de plomo (II) o plomo (IV) y los siguientes aniones: nitrato, nitrito, carboxilato, acetato, formiato, oxilato, sulfato, sulfito, tiosulfato, fosfato, tetrafluoroborato, hexafluorofosfato, tetra(perfluorofenil) borato, hidruro, óxido, peróxido, hidróxido, nitruro, arseniato, arsenito, perclorato, carbonato, bicarbonato, cromato, dicromato, yodato, bromato, clorato, clorito, hipoclorito, hipobromito, cianuro, cianato, isocianato, fulminato, tiocianato, isotiocianato, azida, tetracarbonilcobaltato, carbamoildicianometanida, dicianonitrosometanida, dicianamida, tricianometanida, amida y permanganato.

La tinta precursora puede comprender adicionalmente una sal de plomo (II) o plomo (IV) en relaciones molares del 0 al 100 % con respecto a los siguientes iones metálicos Fe, Cd, Co, Ni, Cu, Hg, Sn, Pb, Bi, Ge, Ti, Zn y Zr como sal de los aniones mencionados anteriormente.

Puede añadirse un disolvente al vial para disolver los sólidos de plomo para formar la tinta precursora de haluro de plomo. Los disolventes adecuados incluyen, pero sin limitación, N-ciclohexil-2-pirrolidona seca, alquil-2-pirrolidona, dimetilformamida, dialquil-formamida, dimetilsulfóxido (DMSO), metanol, etanol, propanol, butanol, tetrahidrofurano, formamida, *terc*-butilpiridina, piridina, alquilpiridina, pirrolidina, clorobenceno, diclorobenceno, diclorometano, cloroformo y combinaciones de los mismos. En una realización, los sólidos de plomo se disuelven en dimetilformamida seca (DMF). Los sólidos de plomo pueden disolverse a una temperatura de entre aproximadamente 20 °C y aproximadamente 150 °C. En una realización, los sólidos de plomo se disuelven a aproximadamente 85 °C. Los sólidos de plomo pueden disolverse durante el tiempo necesario para formar una solución, que puede tener lugar en un período de tiempo de hasta aproximadamente 72 horas. La solución resultante forma la base de la tinta precursora de haluro de plomo. En algunas realizaciones, la tinta precursora de haluro de plomo puede tener una concentración de haluro de plomo de entre aproximadamente 0,001 M y aproximadamente 10 M. En una realización, la tinta precursora de haluro de plomo tiene una concentración de haluro de plomo de aproximadamente 1 M.

Opcionalmente, pueden añadirse determinados aditivos a la tinta precursora de haluro de plomo para afectar a la cristalinidad y la estabilidad finales de la perovskita. En algunas realizaciones, la tinta precursora de haluro de plomo puede contener adicionalmente un aminoácido (por ejemplo, ácido 5-aminovalérico, histidina, glicina, licina), un hidrohhaluro de aminoácido (por ejemplo, clorhidrato del ácido 5-amino valérico), un agente modificador de superficie de IFL (SAM, por sus siglas en inglés) (tales como los analizados anteriormente en la memoria descriptiva) o una combinación de los mismos. En una realización, puede añadirse cloruro de formamidinio a la tinta precursora de haluro de plomo. En otras realizaciones, puede usarse el haluro de cualquier catión analizado anteriormente en la memoria descriptiva. En algunas realizaciones, pueden añadirse combinaciones de aditivos a la tinta precursora de haluro de plomo, incluyendo, por ejemplo, la combinación de cloruro de formamidinio y clorhidrato del ácido 5-amino valérico.

A modo de explicación y sin limitar la divulgación a ninguna teoría de mecanismo particular, se ha descubierto que el formamidinio y el ácido 5-amino valérico mejoran la estabilidad del dispositivo FV de perovskita cuando se usan como aditivos o contracaciones en la fabricación de un dispositivo de perovskita de una sola etapa. También se ha descubierto que el cloruro, en forma de  $PbCl_2$ , mejora el rendimiento del dispositivo FV de perovskita cuando se añade a una solución precursora de  $PbI_2$  en un método de dos etapas. Se ha comprobado que el proceso de deposición de película fina de perovskita en dos etapas puede mejorarse añadiendo cloruro de formamidinio y/o clorhidrato del ácido 5-amino valérico directamente a una solución precursora de haluro de plomo (por ejemplo,  $PbI_2$ ) para aprovechar ambas ventajas con un único material. Otros procesos de deposición de película de perovskita pueden mejorarse análogamente mediante la adición de cloruro de formamidinio, clorhidrato del ácido 5-amino valérico o  $PbCl_2$  a una solución precursora de haluro de plomo.

Los aditivos, incluyendo el cloruro de formamidinio y/o el clorhidrato del ácido 5-amino valérico, pueden añadirse a la tinta precursora de haluro de plomo a diversas concentraciones, dependiendo de las características deseadas del material de perovskita resultante. En una realización, los aditivos pueden añadirse en una concentración de aproximadamente 1 nM a aproximadamente n M. En otra realización, los aditivos pueden añadirse en una concentración de aproximadamente  $\mu$ M a aproximadamente 1 M. En otra realización, los aditivos pueden añadirse en una concentración de aproximadamente 1  $\mu$ M a aproximadamente 1 mM.

Opcionalmente, en determinadas realizaciones, puede añadirse agua a la tinta precursora de haluro de plomo. A modo de explicación y sin limitar la divulgación a ninguna teoría o mecanismo particular, la presencia de agua afecta al crecimiento cristalino de la película fina de perovskita. En circunstancias normales, puede absorberse agua en forma de vapor del aire. Sin embargo, es posible controlar la cristalinidad del FV de perovskita a través de la adición directa de agua a la tinta precursora de haluro de plomo en concentraciones específicas. El agua adecuada incluye agua destilada, agua desionizada o cualquier otra fuente de agua que esté sustancialmente libre de contaminantes (incluyendo minerales). Se ha encontrado que, basándose en barridos de luz I-V, que la eficiencia de conversión de luz en energía del dispositivo FV de perovskita puede casi triplicarse con la adición de agua en comparación con un dispositivo completamente seco.

El agua puede añadirse a la tinta precursora de haluro de plomo a diversas concentraciones, dependiendo de las características deseadas del material de perovskita resultante. En una realización, el agua puede añadirse en una concentración de aproximadamente 1 nl/ml a aproximadamente 1 ml/ml. En otra realización, el agua puede añadirse en una concentración de aproximadamente 1  $\mu$ l/ml a aproximadamente 0,1 ml/ml. En otra realización, el agua puede

añadirse en una concentración de aproximadamente 1 µl/ml a aproximadamente 20 µl/ml.

5 La FIG. 12 muestra imágenes de un microscopio electrónico de barrido transversal que compara un dispositivo FV de perovskita fabricado con agua (5110) y sin agua (5120). Como puede verse en la FIG. 12, hay un cambio estructural considerable en la capa de material de perovskita (5111 y 5121) cuando se excluye el agua (abajo) durante la fabricación, en comparación con cuando se incluye el agua (arriba). La capa de material de perovskita **5111** (fabricada con agua) es considerablemente más contigua y densa que la capa de material de perovskita **5121** (fabricada sin agua).

10 La tinta precursora de haluro de plomo puede entonces depositarse sobre el sustrato deseado. Las capas de sustrato adecuadas pueden incluir cualquiera de las capas de sustrato identificadas anteriormente en la presente divulgación. Como se ha señalado anteriormente, la tinta precursora de haluro de plomo puede depositarse a través de una diversidad de medios, incluyendo, pero sin limitación, vaciado por goteo, vaciado por agitación, impresión por boquilla de ranura ancha, serigrafía o impresión por inyección de tinta. En determinadas realizaciones, la tinta precursora de haluro de plomo puede aplicarse como recubrimiento por centrifugado sobre el sustrato a una velocidad de aproximadamente 500 rpm a aproximadamente 10.000 rpm durante un período de tiempo de aproximadamente 5 a aproximadamente 600 segundos. En una realización, la tinta precursora de haluro de plomo puede aplicarse como recubrimiento por centrifugado sobre el sustrato a aproximadamente 3000 rpm durante aproximadamente 30 segundos. La tinta precursora de haluro de plomo puede depositarse sobre el sustrato en una atmósfera ambiental en un intervalo de humedad de aproximadamente el 0 % a aproximadamente el 50 % de humedad relativa. La tinta precursora de haluro de plomo puede entonces dejarse secar en una atmósfera sustancialmente exenta de agua, es decir, con una humedad relativa inferior al 20 %, para formar una película fina.

25 La película fina puede entonces recocerse térmicamente durante un período de tiempo de hasta aproximadamente 24 horas a una temperatura de aproximadamente 20 °C a aproximadamente 300 °C. En una realización, la película fina puede recocerse térmicamente durante aproximadamente diez minutos a una temperatura de aproximadamente 50 °C. La capa activa de material de perovskita puede entonces completarse mediante un proceso de conversión en el que la película precursora se sumerge o se aclara con una solución que comprende un disolvente o una mezcla de disolventes (por ejemplo, DMF, isopropanol, metanol, etanol, butanol, cloroformo, clorobenceno, dimetilsulfóxido, agua) y sal (por ejemplo, yoduro de metilamonio, yoduro de formamidinio, yoduro de guanidinio, yoduro de 1,2,2-triaminovinilamonio, yodhidrato del ácido 5-aminovalérico) en una concentración de entre 0,001 M y 10 M. En determinadas realizaciones, las películas delgadas también pueden recocerse térmicamente posteriormente de la misma manera que en la primera línea de este párrafo.

35 Por tanto, la presente invención está bien adaptada para lograr los fines y ventajas mencionados, así como aquellos que son inherentes a la misma. Las realizaciones particulares desveladas anteriormente son solamente ilustrativas, ya que la presente invención puede modificarse y ponerse en práctica de maneras diferentes pero equivalentes que son evidentes para los expertos en la técnica que tienen el beneficio del contenido del presente documento. Además, no se pretende imponer limitaciones a los detalles de construcción o diseño que se muestran en el presente documento, distintas de las que se describen en las reivindicaciones a continuación. Por tanto, es evidente que las realizaciones ilustrativas particulares desveladas anteriormente pueden alterarse y modificarse, y todas dichas variaciones se consideran dentro del alcance de la presente invención. En particular, cada intervalo de valores (de la forma, "de aproximadamente a a aproximadamente b", o, de forma equivalente, "de aproximadamente a a b", o, de forma equivalente, "de aproximadamente a-b") que se desvela en el presente documento debe entenderse que se refiere al conjunto potencia (el conjunto de todos los subconjuntos) del intervalo respectivo de valores, y que expone todos los intervalos comprendidos dentro del intervalo más amplio de valores. Además, los términos de las reivindicaciones tienen su significado claro y habitual, a menos que el titular de la patente defina explícita y claramente lo contrario.

**REIVINDICACIONES**

1. Un dispositivo fotovoltaico que comprende:

5 un primer electrodo (6802);  
 un segundo electrodo (6811);  
 una capa activa (6850) dispuesta al menos parcialmente entre los electrodos primero y segundo, comprendiendo la capa activa:

10 una capa de material fotoactivo (6808) que comprende un material de perovskita; y  
 una primera capa interfacial (6803) dispuesta adyacente a y en contacto con una segunda capa interfacial (6804);  
 y una tercera capa interfacial (6805) dispuesta adyacente a y en contacto con la segunda capa interfacial (6804), en donde la primera capa interfacial (6803) y la tercera capa interfacial (6805) comprenden un material  
 15 diferente al de la segunda capa interfacial (6804);

en donde la primera capa interfacial (6803) comprende A12O3, la segunda capa interfacial (6804) comprende ZnO y la tercera capa interfacial (6805) comprende A12O3.

20 2. El dispositivo fotovoltaico de la reivindicación 1, en donde el material de perovskita tiene la fórmula CMX3, en donde C comprende uno o más cationes, cada uno seleccionado entre el grupo que consiste en los metales del Grupo 1, los metales del Grupo 2, cationes orgánicos y combinaciones de los mismos;  
 en donde M comprende uno o más metales, cada uno seleccionado entre el grupo que consiste en Fe, Co, Ni, Cu, Sn, Pb, Bi, Ge, Ti, Zn y combinaciones de los mismos; y  
 25 en donde X comprende uno o más aniones, cada uno seleccionado entre el grupo que consiste en haluros, pseudohaluros, sulfuro, seleniuro y combinaciones de los mismos.

3. El dispositivo fotovoltaico de la reivindicación 1, en donde la capa activa (6850) comprende adicionalmente un material mesoporoso (3904).  
 30

4. El dispositivo fotovoltaico de la reivindicación 1, en donde la capa activa (6850) comprende adicionalmente:  
 una cuarta capa interfacial (6806) dispuesta adyacente a la primera capa interfacial (6803), la segunda capa interfacial (6804) o la tercera capa interfacial (6805).

35 5. El dispositivo fotovoltaico de la reivindicación 4, en donde la capa activa (6850) comprende adicionalmente:  
 una quinta capa interfacial (6807) dispuesta adyacente a la primera capa interfacial (6803), la segunda capa interfacial (6804), la tercera capa interfacial (6805) o la cuarta capa interfacial (6806).

6. El dispositivo fotovoltaico de la reivindicación 1, en donde:  
 40 el primer electrodo (6802) comprende adicionalmente un ánodo;  
 el segundo electrodo (6811) comprende adicionalmente un cátodo; y  
 la primera capa interfacial (6803) y la segunda capa interfacial (6804) se disponen entre la capa fotoactiva (6808) y el primer electrodo (6802).  
 45

7. El dispositivo fotovoltaico de la reivindicación 2, en donde:

C es metilamonio o formamidinio;  
 M es Pb o Sn; y  
 50 X comprende uno o más haluros.

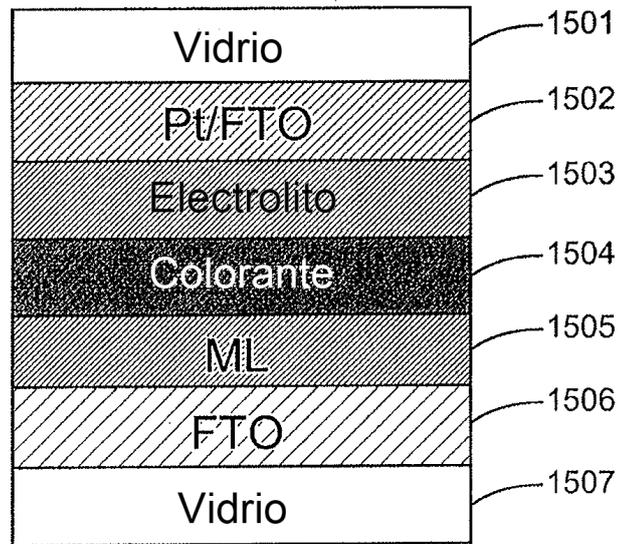


Fig. 1

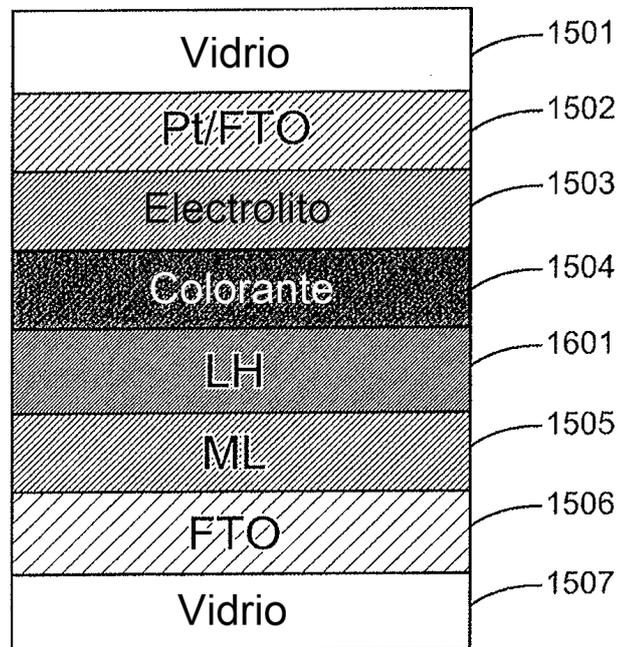


Fig. 2

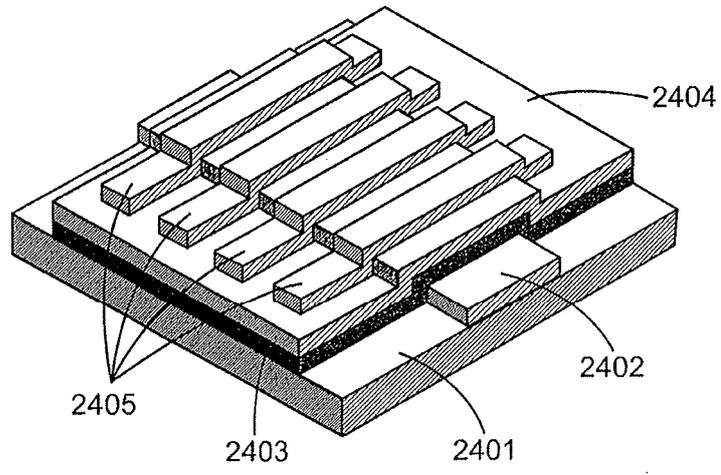


Fig. 3

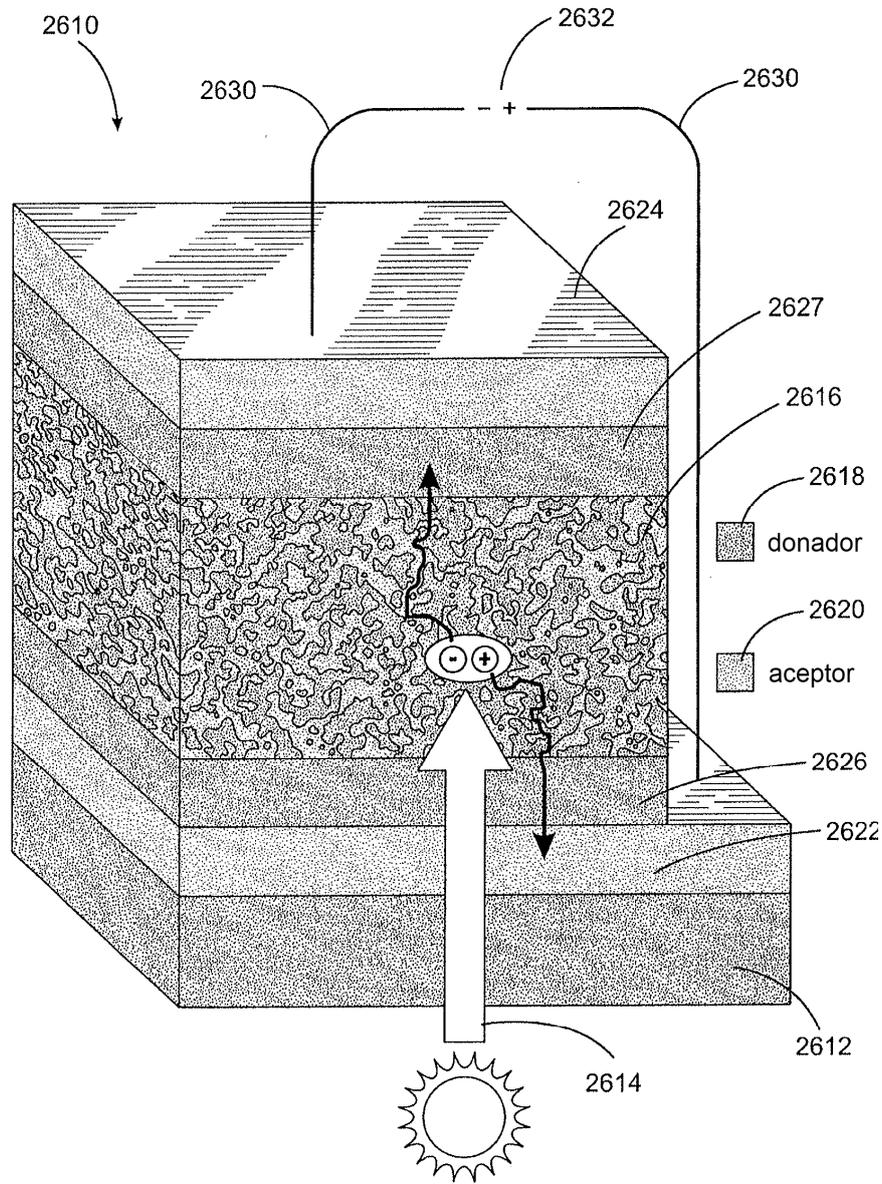


Fig. 4

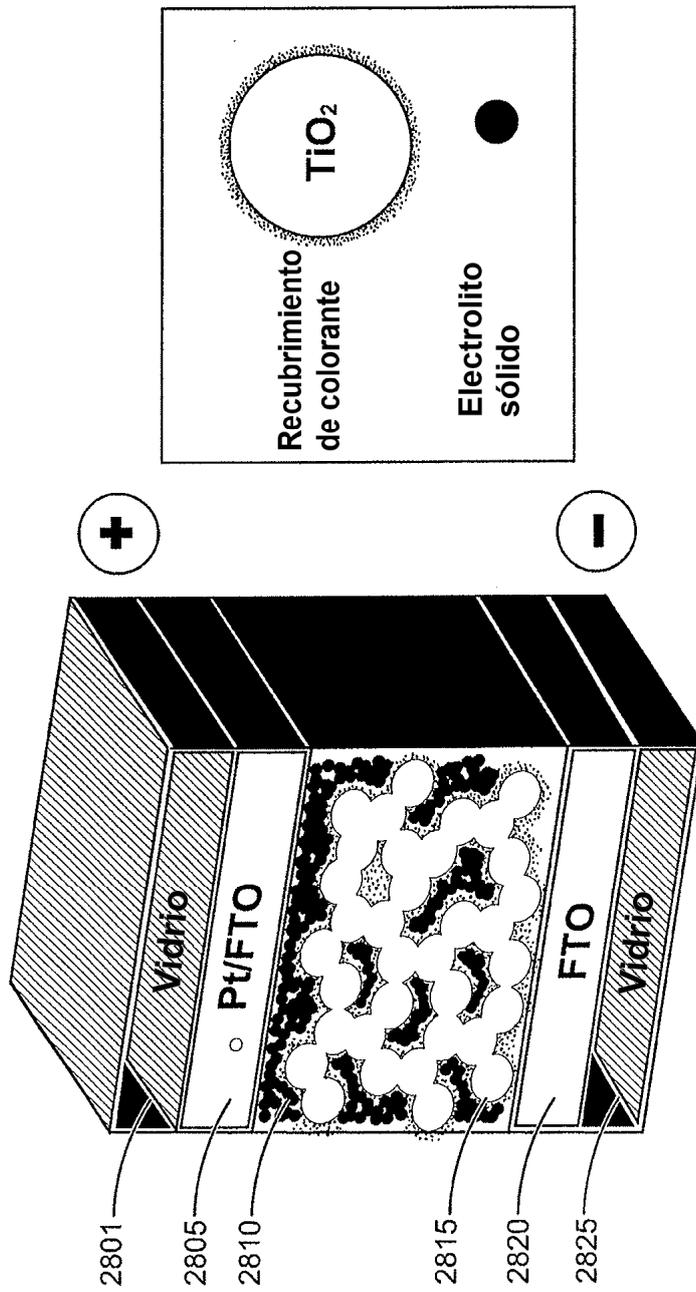


Fig. 5

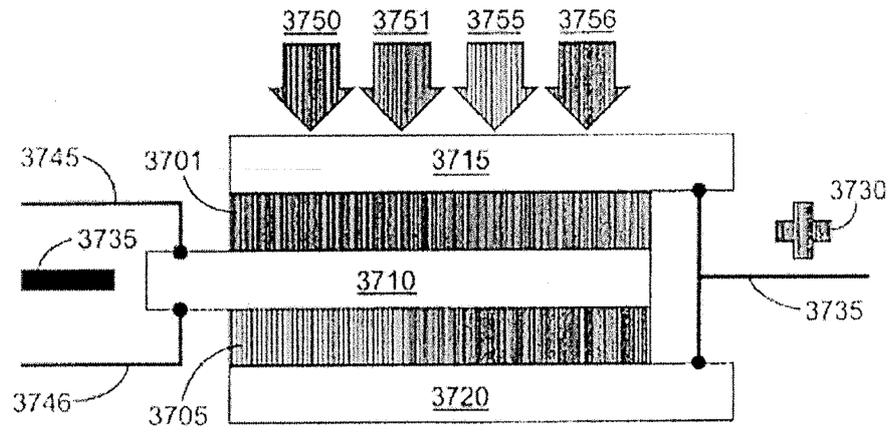


Fig. 6

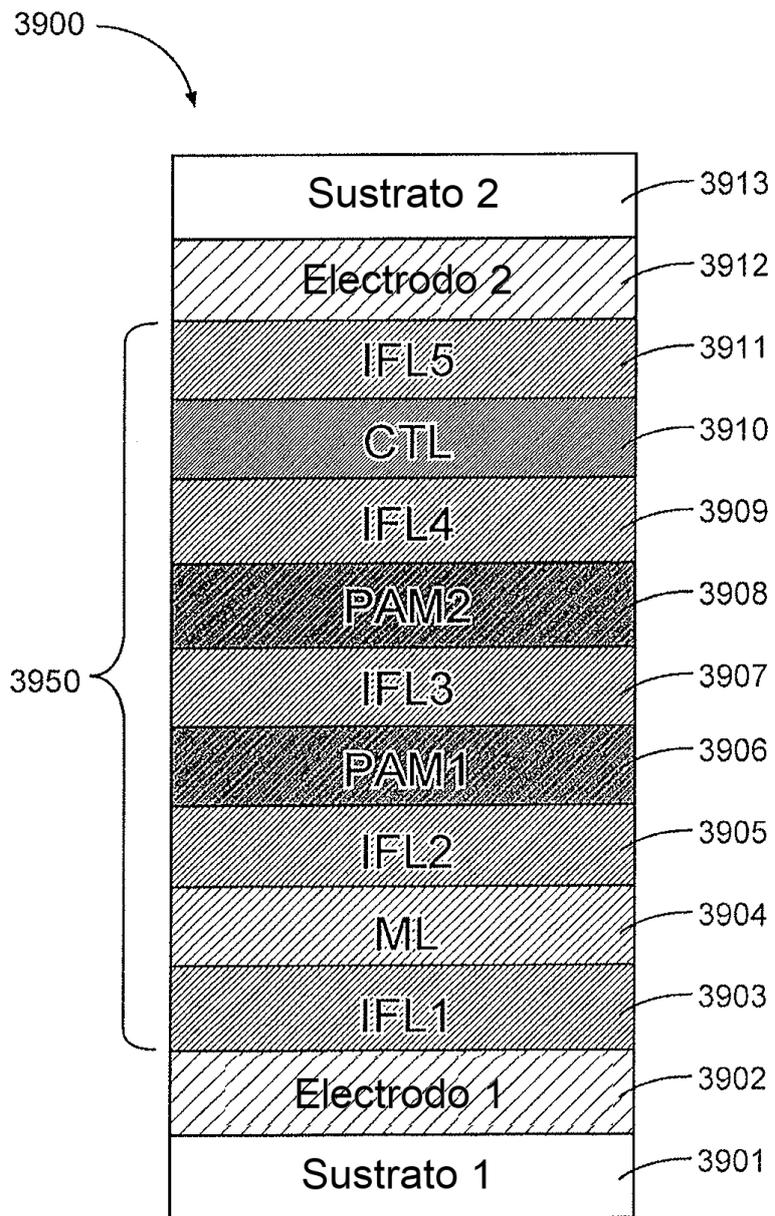


Fig. 7

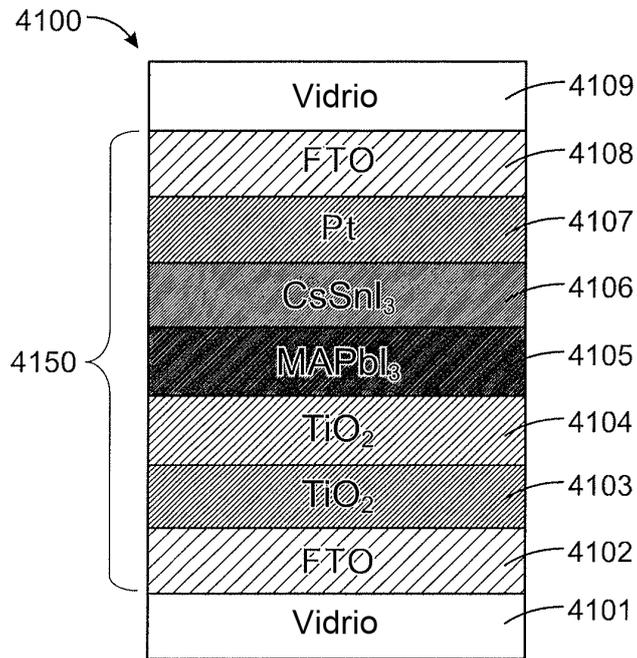


Fig. 8

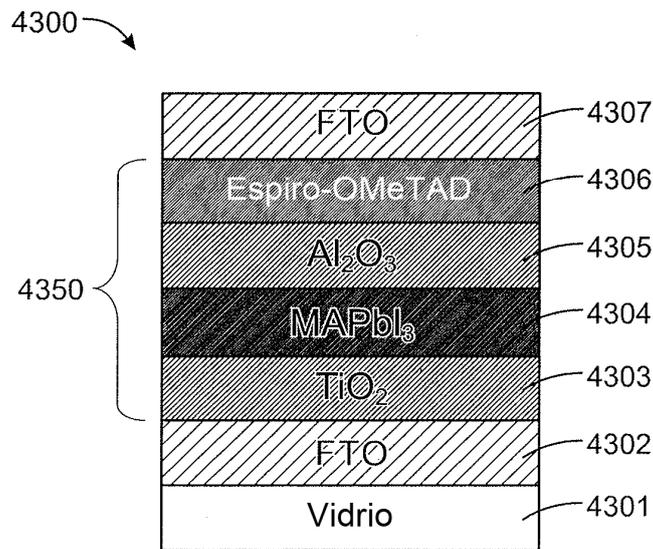


Fig. 9

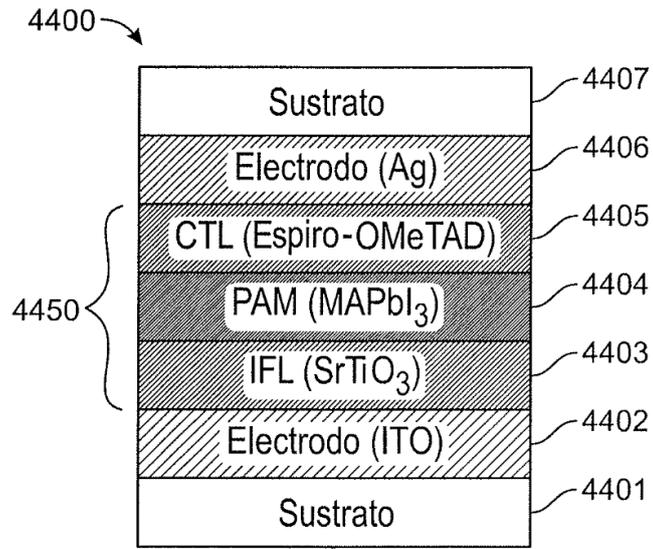


Fig. 10

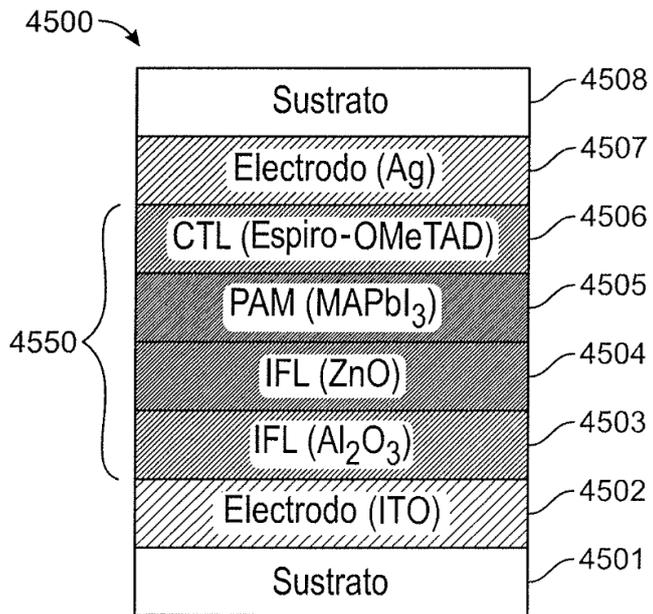


Fig. 11

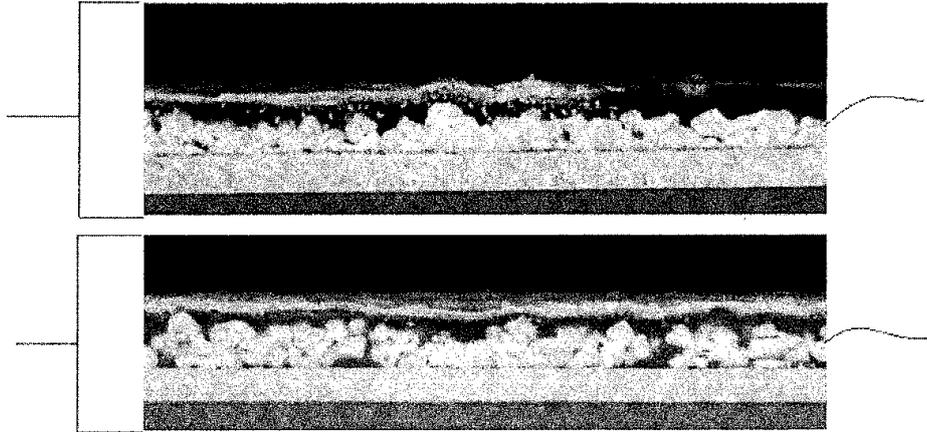


Fig. 12

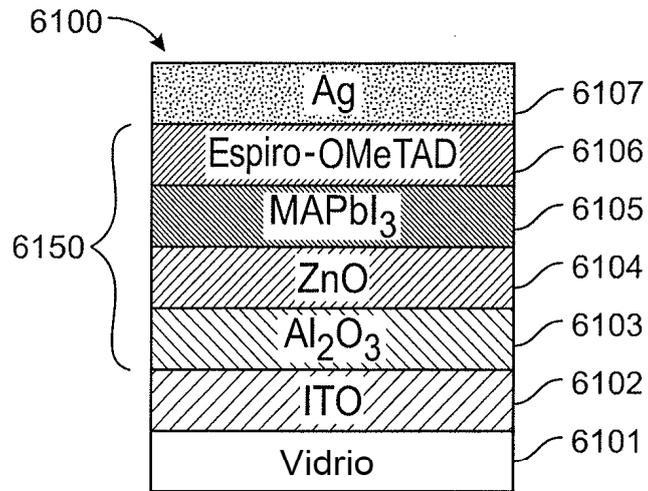


Fig. 13

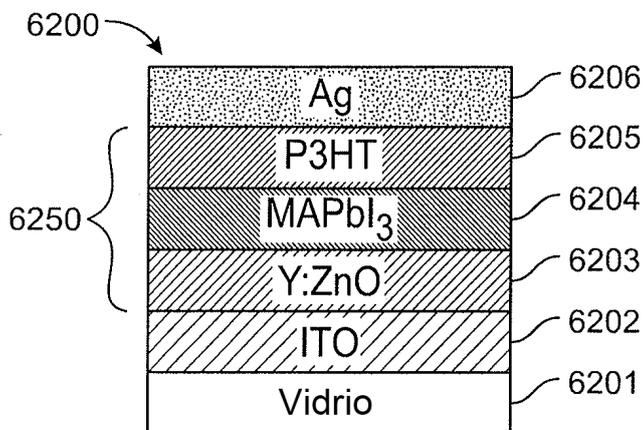


Fig. 14

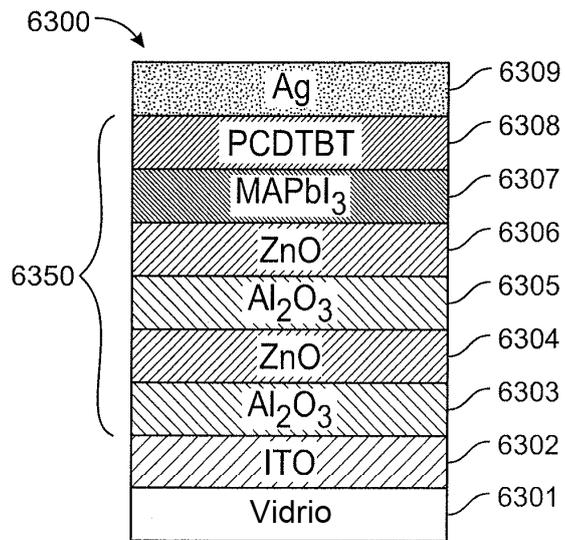


Fig. 15

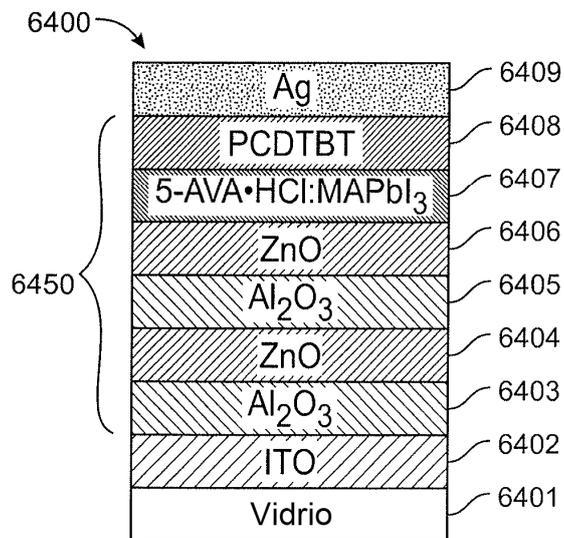


Fig. 16

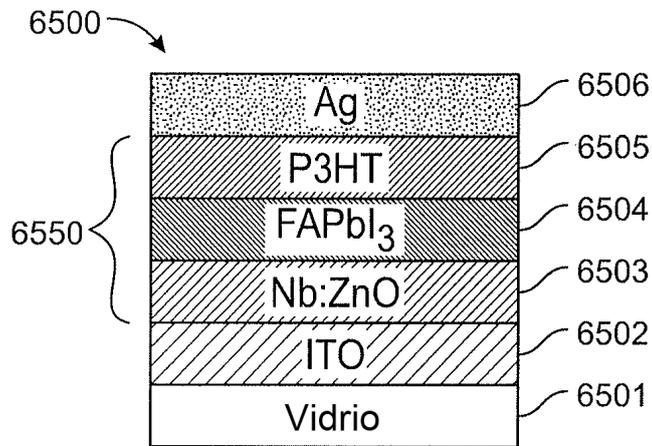


Fig. 17

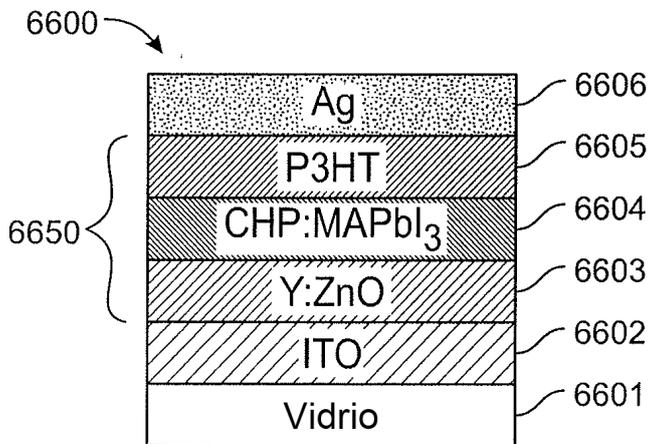


Fig. 18

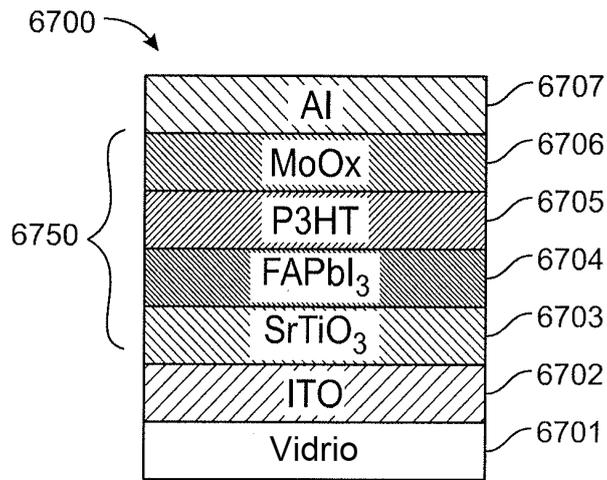


Fig. 19

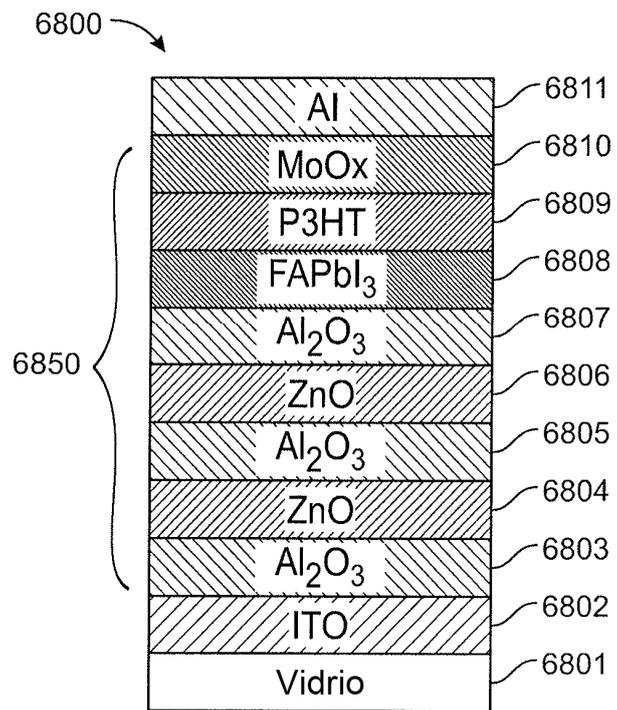


Fig. 20