



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI "FEDERICO II"
Dipartimento di Scienze Chimiche

Dottorato in Scienze Chimiche - XXXVI

***Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche
XXXVI Ciclo***

Proponente: Michele Pavone

Titolo del Progetto di Ricerca:

Design razionale di materiali trasportatori di carica in celle solari a perovskite.

Parole chiave: Fotovoltaico, Ossidi di metalli, Trasporto di carica, Perovskite di piombo alogenuri, Interfacce eterogenee.

Descrizione sintetica del progetto di ricerca

Le celle solari a perovskite (PSC) sono una tecnologia promettente per la conversione della luce solare in elettricità ad alta efficienza e con costi contenuti. Tuttavia, alcuni aspetti dei dispositivi attuali ne minano la stabilità a lungo termine. In particolare, alcuni di questi riguardano processi indesiderati all'interfaccia tra perovskite foto-attiva e strato trasportatore di lacune (HTL), ad esempio ricombinazione di carica, barriere di polarizzazione e processi di ossidazione. Una strategia per risolvere questi problemi è la sostituzione del HTL a base organica (Spiro-OMeTAD) con materiali inorganici allo stato solido, più durevoli e chimicamente inerti. In questo contesto, obiettivo del progetto è il design di nuovi ossidi conduttori trasparenti di tipo p che possano essere applicati come HTL con le perovskiti di alogenuro di piombo più usate. A tal fine, implementeremo una nuova strategia di progettazione computazionale, basata sulla chimica quantistica, per caratterizzare sia i processi elettronici (allineamento di banda, trasporto di carica) che le interazioni chimiche all'interfaccia perovskite-HTL. I materiali HTL più promettenti saranno valutati in dispositivi PSC sperimentali presso il Centro di Ricerca ENEA di Portici.