

Perowskitowe materiały fotowoltaiczne, takie jak  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  oraz  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ , są tanie w produkcji i coraz bardziej wydajne – 22% w tej chwili. Zdecydowanie przewyższają inne baterie słoneczne pod względem napięcia wytworzonego na elektrodach – 1.3 V. Problemami wdrożeniowymi są brak odporności na wilgoć i degradacja urządzeń podczas pracy. Pierwszy problem można rozwiązać stosując domieszkowane szkła tlenkowe, takie jak ZnO domieszkowane B, Al, Ga, In. Uważa się, że drugi problem jest związany z akumulacją ładunków w obszarze złącz – nad jego rozwiązaniem będziemy pracować.

Przewaga ZnO nad bardziej popularnym w tej chwili  $\text{TiO}_2$  to znacznie mniejszy opór elektryczny tego pierwszego oraz prostsze i tańsze otrzymywanie tlenku cynku, szczególnie na elastycznych polimerach; w celu otrzymywania urządzeń, które można zwijać. Jednakże jest jedna cecha utrudniająca zastosowania ZnO w złączach z perowskitami – dekompozycja  $\text{PbI}_3$  do  $\text{PbI}_2$ . Reakcja chemiczna, która do niej prowadzi jest zależna od struktury atomowej złącza. Dlatego będziemy pracować nad wyborem różnych powierzchni badanych materiałów oraz sposobami domieszkowania, aby zredukować to niepożądane zjawisko.

Rekombinacja ładunków w obszarze złącza jest również bardzo niepożądana, gdyż prowadzi do osłabienia efektywności urządzenia. Zależy ona od wzajemnego położenia pasm walencyjnego i przewodnictwa dwóch materiałów. Będziemy przesuwac te pasma poprzez odpowiednie domieszkowanie i wybór powierzchni dwóch materiałów składających się na złącze.

W przemysłowych bateriach słonecznych, tuż przed katodą i anodą, wprowadza się warstwy selekcyjujące ładunki. Domieszkowany elektronowo tlenek cynku może zastąpić warstwę przepuszczającą elektrony i jednocześnie ograniczać przepływ dziur. Projektowanie parametrów pod tym kątem jest naszym priorytetem, gdyż pozwoli znacznie obniżyć koszty wytwarzania baterii słonecznych.

Projekt jest realizowany poprzez modelowanie teoretyczne metodami kwantowo-chemicznymi, przy użyciu ogólnie dostępnych pakietów programów, działających równolegle na setkach procesorów tak aby można było efektywnie symulować układy składające się z tysiąca atomów.