

Resumen

Desde hace una década se está investigando intensamente la forma de mejorar la eficiencia de conversión de energía (PCE) de las células solares de silicio (Si) y reducir sus precios. Sin embargo, a pesar de las mejoras obtenidas, la fabricación de células solares de Si sigue siendo costosa y puede rebajarse usando materiales en forma de capa fina. Por ello la búsqueda de materiales absorbentes alternativos, no tóxicos, abundantes en la naturaleza y con buenos rendimientos de conversión se ha intensificado en los últimos años. Entre los diferentes materiales absorbentes el sulfuro de estaño (SnS), con una banda prohibida de 1.3 eV cercana a la óptima, es un candidato adecuado para la conversión fotovoltaica. Pero para células experimentales de SnS el rendimiento alcanzado hasta ahora es de 4.6%, que es mucho menos que el PCE para dispositivos de silicio, mientras que entre otras células híbridas (orgánicas-no orgánicas) como la perovskita de metilamonio de plomo y yodo (MAPbI₃) se demuestra que es un candidato adecuado con PCE que alcanza un valor del 23%. Aparte de la estabilidad, uno de los problemas para la comercialización de células de MAPbI₃ es la naturaleza tóxica del plomo (Pb). Por este motivo, se ha utilizado el análisis numérico para revisar los parámetros de diseño de las células solares de perovskita híbrida sustituyendo el absorbente MAPbI₃ por MASnI₃ y estudiar el efecto del resto de parámetros de diseño en el rendimiento de estas células solares. Hay varios softwares de simulación disponibles que se utilizan para el análisis numérico de células solares. En este trabajo hemos usado un software llamado “A Solar Cell Capacitance Simulator” (SCAPS), está disponible de forma gratuita y es muy popular entre la comunidad científica y tecnológica. Para lograr un diseño efectivo para una célula solar eficiente, se propuso una aproximación numérica basada en la mejora de la PCE de una célula solar experimental. Esto se hizo reproduciendo los resultados para la célula solar diseñada experimentalmente en un entorno SCAPS con estructura p-SnS / n-CdS con una eficiencia de conversión del 1,5%. Después de la reproducción de los resultados experimentales, el rendimiento del dispositivo se optimizó ajustando el grosor de la capa absorbente y la capa tampón, la vida de los portadores minoritarios, la concentración del dopado en las capas absorbente, tampón y en la capa de la ventana. Mediante la optimización gradual de los parámetros del dispositivo, se alcanzó un valor de 14.01% en PCE de células solares diseñadas con SCAPS con arquitectura p-SnS / n-CdS / n-ZnO. A partir del análisis, se encontró que la PCE de una célula solar depende en gran medida de la concentración de

dopaje de la capa absorbente, el espesor de la capa absorbente y los defectos de la interfaz. Sobre la base de los resultados obtenidos, se realizó un análisis para determinar el efecto de la recombinación de la interfaz en el rendimiento de las células solares y cómo se puede controlar. Para realizar esta tarea, se realizó un análisis para la selección de la capa tampón adecuada para la célula solar de perovskita metilamonio de estaño y yodo (MASnI₃) y se encontró que el PCE de la célula solar también depende de la alineación de la banda entre el absorbedor y la capa de tampón. Por otra parte, se ha propuesto una nueva estructura para la célula solar de perovskita libre de Pb (contacto posterior / MASnBr₃ / MASnI₃ / CdZnS / FTO) con un PCE de 18.71% para un espesor del absorbedor de 500 nm y una concentración de dopado en el aceptor de $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Los resultados obtenidos en esta tesis proporcionarán una guía para que los investigadores experimentales puedan construir células solares más eficientes.