

Resum

L'energia solar fotovoltaica ha emergit com una font d'energia nova i sostenible, que és ecològica i rendible si la producció és a gran escala. En l'escenari actual, els dispositius fotovoltaics econòmics i de gran eficiència de conversió estan ben posicionats per a la generació d'electricitat neta i sostenible. Les cèl·lules solars basades en silici dominen aquest mercat des de fa molts anys. Per a la fabricació i producció de cèl·lules solars basades en silici, es requereixen tècniques de fabricació sofisticades que fan que el panell solar sigui costós. Per altra banda estan les cel·les solars de capa fina, que estan guanyant importància a causa de l'intensificació de les capacitats de fabricació. La tecnologia de capa fina és una de les tecnologies més rentables i eficients per a la fabricació de cel solars, i és un tema d'intensa investigació en la fotovoltaica industrial. La tecnologia de capa fina és més econòmica que altres tecnologies perquè els dispositius utilitzen menys material i estan basats en diversos tipus de materials semiconductors que absorbeixen la llum. Entre aquests materials, les cèl·lules solars de kesterita que utilitzen $CZTS$, $CZTSe$ i les seves aleacions $CZTSSe$ poden convertir-se en el reemplaçament òptim als absorbents de calcopirita. Aquests materials presenten unes característiques òptiques i elèctriques sobresalientes i tenen un gap òptic directe amb una banda prohibida que oscil·la entre $1,4eV$ i $1,5eV$ i un coeficient d'absorció, $\alpha > 10^4 cm^{-1}$. Aquestes característiques han propiciat que les kesteritas estan sent molt investigades per la comunitat fotovoltaica de capes primes. D'acord amb el límit de Shockley-Queisser, l'eficiència de conversió per a una cel·la solar basada en $CZTS$ és d'aproximadament 28%. Aquesta eficiència és teòricament possible a través de l'ajust de la banda prohibida, però tot i així, encara no s'ha pogut assolir experimentalment, probablement a causa de la incomprensió del funcionament dels dispositius. Per a una millor comprensió de les característiques i funcionament dels dispositius, la modelització numèrica pot jugar un paper important al permetre estudiar diferents estructures de sistemes que poden estalviar temps i costos a la comunitat científica-tècnica. En aquest treball, s'ha dut a terme una modelització numèrica per estimar i analitzar l'efecte de paràmetres físics com l'espessor i la concentració de dopatge de la capa absorbent, la capa tampó i la capa finestra, a més d'estudiar l'efecte de la temperatura i l'efecte de la potència d'il·luminació del sol en el rendiment del dispositiu. L'anàlisi numèrica dels dispositius es va realitzar amb el programari de simulació denominat "Solar Cell Capacitance Simulator" ($SCAPS - 1D$). Per això es va analitzar una estructura senzilla $p - n - n^+$ utilitzant molibdè com contacte posterior i FTO

com a finestra òptica i contacte frontal i seguint la seqüència de materials *Mo/CZTS/CdS/ZnO/FTO*. A través de l'anàlisi, es va estudiar el rendiment de les cel·les solars amb la variació en l'espessor de l'absorbent per trobar l'espessor òptim de la capa absorbent. També es va estudiar l'efecte de la concentració del dopatge i de la funció de treball del metall. Després de la visualització d'una estructura de dispositiu bàsic en *SCAPS – 1D*, es modela una cel·la solar experimental basada en *CZTS*. Els resultats de les cel·les solars *CZTS* dissenyats experimentalment es simularen per primera vegada en l'entorn *SCAPS – 1D*. Els resultats simulats de *SCAPS – 1D* es van comparar amb els resultats experimentals. Després de l'optimització dels paràmetres de la celda, es va incrementar l'eficiència de conversió d'un dispositiu optimitzat i, a partir del modelatge, es va descobrir que el rendiment del dispositiu es millora a l'augmentar la vida útil dels minoritaris, cosa que es aconsegueix amb la incorporació d'un camp elèctric a la superfície del contacte posterior. Sobre la base dels resultats obtinguts, es va trobar que la recombinació en una cel·la solar pot afectar en gran mesura el rendiment d'una cel·la solar. Per tant, es va modelar i analitzar una nova estructura (*contacte posterior/CFTS/ZnS/Zn(O,S)/FTO*) en què es redueix la recombinació de la interfície optimitzant l'amplada de la banda prohibida de la capa *Zn(O,S)*. Sobre la base de diferents models d'estructures d'equips, es va trobar que la cel·la solar amb estructura *CFTS/ZnS/Zn(O,S)/FTO* pot aconseguir una eficiència del 26,11%, després d'optimitzar alguns paràmetres físics com són l'espessor de la capa absorbent de $4\mu\text{m}$ i la densitat d'acceptors de $2 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$. Els resultats obtinguts aportaran una valiosa guia per a la fabricació i el disseny de solars cel·lulars de gran conversió d'eficiència.