

Resumen en castellano

La obtención de dispositivos fotovoltaicos más eficientes y de bajo coste es uno de los desafíos tecnológicos más importantes de las últimas décadas. Existe la necesidad de desarrollar técnicas de fabricación escalables y de alto rendimiento que puedan reducir los costos y mejorar la fabricación de células solares de capa fina. Las células solares de heterounión de capas finas de seleniuro (o sulfuro) de cobre, indio y galio (CIGS) parecen estar bien adaptadas lograr este reto debido a su bajo costo, facilidad de fabricación y elevado rendimiento de los dispositivos.

En la actualidad, Cu(In, Ga)Se_2 ostenta el record de eficiencia de células solares con 22,3% a escala de laboratorio y esta eficiencia todavía puede ser acrecentada si se mejoran las diferentes capas de los dispositivos fotovoltaicos. Además, las capas absorbedoras de calcogenuros CIGS son un material candidato importante en dispositivos fotovoltaicos para capas delgadas celdas solares para aplicaciones espaciales debido a sus propiedades electrónicas, así como a su resistencia a la radiación.

En el presente trabajo, las películas delgadas de $\text{Cu(In, Ga)(Se, S)}_2$ se depositaron a temperatura ambiente sobre sustratos de vidrio recubiertos con ITO y Mo mediante técnicas electroquímicas. Las películas finas policristalinas obtenidas se caracterizaron por espectroscopia óptica UV-Vis, difracción de rayos X (XRD), microscopía electrónica de barrido (SEM), microscopía de fuerza atómica (AFM), microscopía electrónica de transmisión (TEM) y espectroscopia de energía dispersiva (EDS).

Las películas finas de $\text{Cu(In, Ga)(Se, S)}_2$ crecidas por electrodeposición se procesaron posteriormente en varios conjuntos de condiciones que incluían tratamiento térmico en vacío, tratamiento térmico en presencia de selenio o de azufre, tratamiento térmico en atmósfera gas nitrógeno (N_2) a diferentes temperaturas y tiempos de procesado.

Para mejorar la composición y la estructura cristalina de las capas finas y para optimizar las propiedades electro-ópticas se desarrolló un tratamiento térmico de las películas finas en dos etapas posteriores a la electrodeposición. Se observó que la primera etapa de recocido (tratamiento térmico a 450 °C en una atmósfera de selenio durante 40 minutos) producía una mejora apreciable en la estructura cristalina y en la composición de la capa fina.

En una segunda etapa se realizó una sulfuración de las películas de CuGaSe_2 se realizó a 400°C durante 10 min en presencia de azufre molecular y bajo la atmósfera reductora de gas nitrógeno. El efecto de la sulfuración fue la completa conversión del selenio en azufre y, por tanto, la transformación de CuGaSe_2 en CuGaS_2 .

La formación de películas delgadas de CuGaS_2 se evidenció por el desplazamiento de los picos de difracción de las capas de CuGaSe_2 hacia ángulos más altos hasta lo que hace que el patrón de difracción de rayos X lo que hace que coincida con el patrón de difracción del CuGaS_2 y por el desplazamiento hacia el azul (energías más altas) del gap óptico. El gap óptico encontrado para las capas de CuGaSe_2 era de 1,66 eV, mientras que el gap óptico para las capas de CuGaS_2 se elevó hasta 2,2 eV.

Las películas delgadas de CdS se han utilizado ampliamente como capa tampón en células solares CIGS. Sin embargo, cuando se alea con Zn, para formar el ternario ZnCdS, todavía puede mejorar su rendimiento como capa buffer. ZnCdS puede utilizarse como tampón y como ventana óptica en dispositivos fotoconductores y en células solares de capa fina de heterounión debido a la posibilidad de ajustar el bandgap con el contenido de Zn. La separación entre bandas de este material ternario puede oscilar entre 2,42 a 3,50 eV, dependiendo de la relación Cd / Zn.

Por último, se abordó el dopado de las capas de CuGaS_2 con cromo para formar una banda de absorción intermedia que permita absorber fotones de energía menor del gap y enviar electrones de la banda de valencia a la banda de conducción por absorción de dos fotones de energía menores que el gap. Para ello se añadieron diversas concentraciones de iones Cr al electrolito inicial, se obtuvieron capas de $\text{CuGaSe}_2\text{:Cr}$ que fueron transformadas en $\text{CuGaS}_2\text{:Cr}$ por sulfurización. Las películas resultantes de $\text{CuGaS}_2\text{:Cr}$ mostraban una banda de absorción localizada en el gap del semiconductor y centrada a 1,63 eV que se puede atribuir a átomos de Cr en sitios Ga. Mediante EDX se constató que la concentración de Cr podía alcanzar el 8%.

Posteriormente se realizó un análisis numérico de las propiedades de células solares basadas en capas absorbentes de banda intermedia, como el $\text{CuGaS}_2\text{:Cr}$, mediante el software específico denominado SCAPS. Se estudió el comportamiento de células solares de Mo/

CuGaS₂/CdS/ZnO y se comparó con una absorbente de banda intermedia: Mo/CuGaS₂:Cr/CdS/ZnO.

Mediante SCAPS se obtuvieron los parámetros fotovoltaicos (tensión en circuito abierto, corriente en corto circuito, factor de llenado y eficiencia de conversión) así como la eficiencia de las células solares analizadas. Tanto la eficiencia cuántica como la corriente de cortocircuito y la tensión en circuito abierto de las células solares Mo/CuGaS₂:Cr/CdS/ZnO simuladas aumentaron proporcionalmente a la cantidad de Cr presente en los absorbedores de CuGaS₂:Cr. Como resultado, la eficiencia de conversión de los dispositivos fotovoltaicos simulados pasó de 14,7% para CuGaS₂ a 34% para CuGaS₂:Cr.

Sin embargo, cuando se introdujeron defectos neutros relacionados con el dopaje con Cr en la capa absorbente, el efecto positivo de la mejora de la recolección de fotones debido al efecto de la banda intermedia se compensó con una disminución en la extracción de los portadores y la eficiencia global del dispositivo disminuyó en una relación inversamente proporcional a la concentración de defectos.