

Resumen

Las energía solar fotovoltaica ha emergido como una fuente de energía nueva y sostenible, que es ecológica y rentable si la producción es a gran escala. En el escenario actual, los dispositivos fotovoltaicos económicos y de alta eficiencia de conversión sin que se degraden sus componentes están bien posicionados para la generación de electricidad. Las células solares basadas en silicio dominan este mercado desde hace muchos años. Para la fabricación y producción de células solares basadas en silicio, se requieren sofisticadas técnicas de fabricación que hacen que el panel solar sea costoso. Por otra parte están las células solares de película delgada, las cuales, debido a la intensificación de las capacidades de fabricación están ganando importancia. La tecnología de película delgada es una de las tecnologías más rentables y eficientes para la fabricación de células solares, y es un tema de intensa investigación en la industria fotovoltaica. La tecnología de película delgada es más económica que otras tecnologías porque los dispositivos utilizan menos material y están basados en varios tipos de materiales semiconductores que absorben la luz. Entre estos materiales, las células solares de kesterita que utilizan $CZTS$, $CZTSe$ y sus aleaciones $CZTSSe$ pueden convertirse en el reemplazo óptimo a los absorbentes de calcopirita. Estos materiales presentan unas características ópticas y eléctricas sobresalientes y tienen un gap óptico directo con una banda prohibida que oscila entre $1,4 eV$ y $1,5 eV$ y un coeficiente de absorción, $\alpha > 10^4 cm^{-1}$. Estas características han propiciado que las kesteritas estén siendo muy investigadas por la comunidad fotovoltaica de películas delgadas. De acuerdo con el límite de Shockley-Queisser, la eficiencia de conversión para una célula solar basada en $CZTS$ es alrededor del 28%. Esta eficiencia es teóricamente posible mediante el ajuste de la banda prohibida, pero aún así, todavía no se ha podido alcanzar experimentalmente, probablemente debido a la falta de comprensión de las características de los dispositivos. Para una mejor comprensión de las características de los dispositivos, la modelación numérica puede jugar un papel importante al permitir estudiar diferentes estructuras de dispositivos que pueden ahorrar tiempo y costos a la comunidad científico-técnica. En este trabajo, se ha llevado a cabo una modelación numérica para estimar y analizar el efecto de parámetros físicos como el espesor y la concentración de dopado de la capa absorbente, la capa tampón y las capas ventana, además de estudiar el efecto de la temperatura y el efecto de la potencia de iluminación del sol en el rendimiento del dispositivo. El análisis numérico de los dispositivos se realizó con el software de simulación denominado "Solar Cell Capacitance Simulator" ($SCAPS - 1D$). Para ello se analizó una estructura simple $p - n - n^+$ usando

molibdeno como contacto posterior y *FTO* como ventana óptica y contacto frontal y siguiendo la secuencia de materiales *Mo/CZTS/CdS/ZnO/FTO*. A través del análisis, se estudió el rendimiento de las células solares con la variación en el espesor del absorbente para encontrar el espesor óptimo de la capa absorbente. También se estudió el efecto de la concentración del dopado y de la función de trabajo del metal. Después de la visualización de una estructura de dispositivo básica en *SCAPS – 1D*, se modeló una célula solar experimental basada en *CZTS*. Los resultados de las células solares *CZTS* diseñados experimentalmente se simuló por primera vez en el entorno *SCAPS – 1D*. Los resultados simulados de *SCAPS – 1D* se compararon con los resultados experimentales. Después de la optimización de los parámetros de la celda, se incrementó la eficiencia de conversión de un dispositivo optimizado y, a partir del modelado, se descubrió que el rendimiento del dispositivo mejora al aumentar el tiempo de vida de los portadores minoritarios, cosa que se consigue con la incorporación de un campo eléctrico en la superficie del contacto posterior. Sobre la base de los resultados obtenidos, se encontró que la recombinación en una célula solar puede afectar en gran medida el rendimiento de una célula solar. Por lo tanto, se modeló y analizó una nueva estructura (*contacto posterior/CFTS/ZnS/Zn(O,S)/FTO*) en la que se reduce la recombinación de la interfase optimizando la anchura de la banda prohibida de la capa *Zn(O,S)*. Sobre la base de diferentes modelos de estructuras de dispositivos, se encontró que la célula solar con estructura *CFTS/ZnS/Zn(O,S)/FTO* puede alcanzar una eficiencia del 26,11%, después de optimizar algunos parámetros físicos como son el espesor de la capa absorbente de $4\mu\text{m}$ y la densidad de aceptores de $2 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$. Los resultados obtenidos aportarán una valiosa guía para la fabricación y el diseño de células solares de alta eficiencia de conversión.