

# RESUMEN

La modelización numérica de las células solares resulta muy útil para comprender los fenómenos físicos que gobiernan el comportamiento de los dispositivos fotovoltaicos y permite explorar nuevos conceptos de diseño de células solares, así como simular y analizar el comportamiento de tales dispositivos. Actualmente existen varias herramientas de modelización específicas para dispositivos fotovoltaicos de capa fina. Estas herramientas son útiles por dos razones fundamentales. En primer lugar, es importante conocer los fundamentos teóricos sobre los que se basan los dispositivos. Esto ayuda a mantener la motivación para entender trabajo experimental y puede ayudar a mejorar el rendimiento de los dispositivos. En segundo lugar, las simulaciones de los dispositivos físicos permiten analizar y optimizar diversos parámetros de los dispositivos experimentales sin necesidad de construir físicamente tales dispositivos. Esto permite un ahorro importante de los recursos y dejar la experimentación y fabricación de los dispositivos para cuando se tiene optimizado el dispositivo. Sin duda los avances realizados en el modelado y simulación de dispositivos ayudan al desarrollo de nuevos dispositivos fotovoltaicos y a su realización experimental. Un programa de simulación adaptado a células solares de capa fina y conocido como Solar Cell Capacitance Simulator (SCAPS) se ha utilizado para este propósito.

Hemos utilizado el SCAPS para modelar y estudiar el comportamiento de las células solares de película delgada basadas en materiales diversos como CdTe, CIGS, SnS y ZnTe. Además hemos usado la simulación para explorar nuevos conceptos en fotovoltaica como las células solares multicapas, el efecto de la concentración solar y los materiales de banda intermedia.

Se han estudiado y discutido en detalle los parámetros básicos que gobiernan el comportamiento de las células solares de película delgada. El análisis comparativo de dispositivos basados en CIGS y CdTe revela que el CdTe tiene una mayor tensión en circuito abierto ( $V_{OC}$ ) que el CIGS mientras que la corriente de cortocircuito ( $J_{SC}$ ) son similares. a CIGS. Esto es consecuencia de la mayor anchura de la banda prohibida del CdTe. Por el contrario, CIGS tiene mejor eficiencia cuántica (QE) que el CdTe.

Por otra parte el ZnTe tiene una banda prohibida de mayor energía, lo que significa un elevado  $V_{OC}$  pero tanto la corriente en corto circuito como ( $J_{SC}$ ) pero su la eficiencia cuántica (QE) son bajas. Sin embargo el elevado valor de la banda prohibida del ZnTe hacen de este material un candidato interesante para alojar una banda de absorción intermedia que permite incrementar drásticamente la QE.

Las modernas células solares de capa fina basada en calcógenos tipo p como el  $CuIn_{(1-x)}Ga_xSe_2$  son candidatos prometedores para la generación de electricidad limpia. Las capas finas de CIGS tienen energías de las bandas prohibidas bien adaptadas a la absorción de la luz solar.

Las capas finas basadas en indio,  $\text{CuInSe}_2$  (CIS), tienen una banda prohibida de 1.0 eV mientras que las de galio,  $\text{CuGaSe}_2$  (CGS) tienen 1.76 eV. Por tanto, jugando con la concentración relativa de Ga e In es posible ajustar la energía de la banda prohibida entre 1.0 y 1.76 eV.

Los principales parámetros fotovoltaicos de una célula solar de  $\text{ZnO/CdS/CIGS}$  han sido obtenidos por simulación numérica con SCAPS. Para este dispositivo hemos realizado un estudio detallado del efecto del contenido de Ga en los parámetros fotovoltaicos de las células solares. Los resultados obtenidos han puesto de manifiesto que el aumento de la concentración de Ga en los resultados capa absorbente produce una mayor eficiencia en el dispositivo alcanzando la máxima eficiencia para el contenido de Ga alrededor del 66%. Después de la optimización de diversos parámetros del dispositivo simulado se alcanzó una eficiencia máxima del 30.95% para un absorbente CIGS con un contenido del 66% de galio. También se consideró el efecto de las otras capas del dispositivo, la capa ventana de  $\text{ZnO}$  y la capa buffer de  $\text{CdS}$ , y se optimizaron los espesores de dichas capas para conseguir el mejor rendimiento. La disminución del grosor de algunas de las capas puede producir mejores resultados pero puede resultar un reto en el proceso de fabricación de los dispositivos. El efecto de la concentración de donadores y aceptores ( $N_A$  y  $N_D$ ) en la capa absorbente de CIGS sobre el rendimiento global de la célula también ha sido analizado.

Se ha estudiado el comportamiento de la célula de  $\text{ZnO/CdS/CIGS}$  (Ga=45%) para una iluminación con concentración. La eficiencia de conversión alcanza un máximo para una iluminación de 20 soles y oscila entre 27 % para 1 sol (Condición AM1.5) y 30% para 20 soles. La mejora de la eficiencia es más acusada en múltiples capas ejemplo de película delgada, donde la eficiencia es un 50% por 10 soles y 55% para 30 soles.

El sulfuro de estaño ( $\text{SnS}$ ) es un material no tóxico y abundante en la tierra y que resulta prometedor para aplicaciones fotovoltaicas. La célula fotovoltaica consiste en una capa absorbente de  $\text{SnS}$ ,  $\text{CdS}$  como buffer y  $\text{ZnO}$  como capa de ventana óptica, siguiendo el secuencia  $\text{ZnO/CdS/p-SnS}$ . Células solares fotovoltaicas basadas en capas absorbentes de  $\text{SnS}$  han sido modelizadas mediante SCAPS. Después de optimizar diferentes parámetros y espesores de las capas se consigue una eficiencia máxima del 10.6 %,  $V_{OC}$  de 0.92 voltios,  $J_{SC}$  de  $13.4 \text{ mA/cm}^2$  y factor de llenado del 86.3 %. Estudios de simulación mediante la variación de varios parámetros de las células solares tales como el grosor de las diversas capas revelan que el aumento del espesor de los resultados capa absorbente en una mayor eficiencia. La concentración de aceptores poco profundos en el  $\text{SnS}$  tiene un efecto decisivo en la eficiencia de conversión, y esta se eleva hasta aproximadamente 15 % para las concentraciones de aceptores entorno a  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . También se analizó el efecto de la compensación entre los donadores y aceptores pero su efecto sobre la eficiencia de conversión es insignificante.

Las células solares basadas en semiconductores II-VI también se encuentran entre los principales candidatos a bajo costo la conversión fotovoltaica de la energía solar debido a sus

altos coeficientes de absorción y por lo tanto el bajo consumo de material para su producción. El análisis de las células solares basadas en capas finas de telururo de zinc (ZnTe) se ha realizado mediante el software SCAPS. Se han simulado las características IV, en oscuridad e iluminación en función de diferentes parámetros de entrada. Se ha puesto de manifiesto que el aumento del espesor ZnTe (0.5-2.0 micras) resulta en una mayor eficiencia de los dispositivos fotovoltaicos. Parámetros tales como el grosor de las diversas capas revelan que el aumento del espesor de los resultados capa absorbente en una mayor eficiencia. ZnTe es un semiconductor tipo p con una banda prohibida de aproximadamente 2.2-2.6 eV, que es demasiado alta para un aprovechamiento eficiente de fotones solares, pero resulta adecuada para albergar una banda intermedia y extender el rango de absorción de fotones solares.

Los materiales con banda intermedia representan un concepto interesante de nuevos materiales para mejorar de la eficiencia de conversión y por tanto merece ser estudiado. Teóricamente la eficiencia de conversión máxima para un dispositivo fotovoltaico basado en una sola capa absorbente está limitado por el llamado 'límite Queisser-Schotckly'. Sin embargo, el uso de materiales de banda intermedia en la capa absorbente de los dispositivos fotovoltaicos permite superar este límite. Para tales materiales se han propuesto eficiencias de hasta 60 %. Es posible simular el coeficiente de absorción de un material con banda intermedia y luego analizar el comportamiento y el rendimiento de este tipo de materiales y dispositivos de banda intermedia con el SCAPS. En esta tesis hemos analizado los principales parámetros fotovoltaicos de una célula solar fotovoltaica basada en ZnTe:O como una capa absorbente. La simulación de la estructura ZnO/CdS/ZnTe:O alcanza una eficiencia del 60 % mientras que estructura ZnO/CdS/ZnTe sin banda intermedia da una eficiencia por debajo del 10 %. La razón de este elevado valor de QE es la absorción de fotones de baja energía que de otro modo se desperdician porque no contribuyen a la generación de par electron-hueco. El CuGaS<sub>2</sub> ha sido propuesto teóricamente como un material adecuado para albergar una banda intermedia si se dopa con vanadio o cromo (CuGaS<sub>2</sub>:V y CuGaS<sub>2</sub>:Cr). Los cálculos teóricos para células solares basadas en este material con banda intermedia predicen eficiencias de conversión del 46.7 %. Sin embargo nuestros intentos de modelizar tal dispositivo con SCAPS no han dado resultados debido a que la simulación no convergía y el software no era capaz de ofrecer resultados razonables.

El concepto de capas múltiples también ha sido investigado mediante SCAPS como una alternativa interesante para aumentar el rendimiento de las células de CIGS. Sustituyendo las capas de CIGS actuales por varias capas de CGS y CIS con distintas energías de las respectivas bandas prohibidas se consigue abarcar un espectro más amplio y mejorar la eficiencia de conversión. La simulación de un dispositivo fotovoltaico basado en la secuencia ZnO/CdS/CuInSe<sub>2</sub>/CuGaSe<sub>2</sub> ofrece resultados muy alentadores con una eficiencia del 30-40 % que es superior a los dispositivos de una sola capa de CIGS. Además se consigue disminuir el espesor de la capa absorbente en un 35-40 % lo que repercute en un ahorro de material.

Cuando usando iluminación concentrada la eficacia de este tipo de células solares puede ser aumentado hasta un 50% por 10 soles y 55% para 30 soles.