

# SUMARI

El modelatge de les cèl·lules solars ens permet comprendre els fenòmens físics subjacents al comportament del dispositiu. L'ús de la modelització numèrica assistida per ordinador és molt útil per explorar nous conceptes de disseny de cèl·lules solars, així com realitzar la simulació i l'anàlisi d'aquests dispositius. La modelització numèrica és molt adequada per obtenir una visió profunda dels detalls de l'operació física de les cèl·lules solars de pel·lícula fina. Fins hui s'han desenvolupat diverses eines de modelatge específiques per a dispositius fotovoltaics de capa fina. Tal enfocament és beneficiós per dues raons principals. En primer lloc, és important conèixer els paràmetres teòrics cap als quals, es procedeix. Això ajuda a mantenir la motivació per al treball experimental a realitzar i que dona una mesura precisa de com el treball està progressant. En segon lloc, les simulacions de dispositius físics permeten analitzar i optimitzar els dispositius sense la necessitat de fer-los físicament. Això permet un important estalvi dels recursos mitjançant la realització dels experiments només i fabricacions que són veritablement necessàries. Aquest treball pot servir de guia per al desenvolupament de nous dispositius fotovoltaics i l'anàlisi realitzat en aquest document ajudarà en la seva realització experimental. Un programa de simulació numèrica conegut com Solar Cell Capacitance Simulator (SCAPS) s'ha utilitzat per a aquest propòsit.

Hem utilitzat el SCAPS per modelar i estudiar el comportament de les cèl·lules solars de pel·lícula prima basades en materials diversos com CdTe, CIGS, SnS i ZnTe. A més hem fet servir la simulació per explorar nous conceptes en fotovoltaica com són les cèl·lules solars multicapes, l'efecte de la concentració solar i els materials de banda intermèdia.

S'han estudiat i discutit en detall els paràmetres bàsics que governen el comportament de les cèl·lules solars de pel·lícula prima. L'anàlisi comparativa de dispositius basats en CIGS i CdTe revela que el CdTe té una major tensió en circuit obert ( $V_{OC}$ ) que el CIGS mentre que el corrent de curtcircuit ( $J_{SC}$ ) són similars per ambdós materials. Això és conseqüència de la major amplada de la banda prohibida del CdTe. Per contra, CIGS té millor eficiència quàntica (QE) que el CdTe.

D'altra banda el ZnTe té una banda prohibida de major energia, el que significa un elevat  $V_{OC}$  però tant el corrent en curt circuit com ( $J_{SC}$ ) però la seva l'eficiència quàntica (QE) són baixes. No obstant això l'elevat valor de la banda prohibida del ZnTe fan d'aquest material un candidat interessant per allotjar una banda d'absorció intermèdia que permet incrementar dràsticament la QE.

Les modernes cèl·lules solars de capa fina basada en calcogenurs tipus p com el  $CuIn_{(1-x)}Ga_xSe_2$  són candidats prometedors per a la generació d'electricitat neta. Les capes fines de CIGS tenen energies de les bandes prohibides ben adaptades a l'absorció de la llum solar. Les capes

finés basades en indi,  $\text{CuInSe}_2$  (CIS), tenen una banda prohibida de 1.0 eV mentre que les de gal·li,  $\text{CuGaSe}_2$  (CGS) tenen 1.76 eV. Per tant, jugant amb la concentració relativa de Ga i In és possible ajustar l'energia de la banda prohibida entre 1.0 i 1.76 eV.

Els principals paràmetres fotovoltaics d'una cèl·lula solar de ZnO/CdS/CIGS han estat obtinguts per simulació numèrica amb SCAPS. Per a aquest dispositiu hem realitzat un estudi detallat de l'efecte del contingut de Ga en els paràmetres fotovoltaics de les cèl·lules solars. Els resultats obtinguts han posat de manifest que l'augment de la concentració de Ga en els resultats capa absorbent produeix una major eficiència en el dispositiu aconseguint la màxima eficiència per al contingut de Ga voltant del 66%. Després de l'optimització de diversos paràmetres del dispositiu simulat es va assolir una eficiència màxima del 30.95% per a un absorbent CIGS amb un contingut del 66% de gal·li. També es va considerar l'efecte de les altres capes del dispositiu, la capa finestra de ZnO i la capa buffer de CdS, i es van optimitzar els gruixos d'aquestes capes per aconseguir el millor rendiment. La disminució del gruix d'algunes de les capes pot produir millors resultats però pot resultar un repte en el procés de fabricació dels dispositius. L'efecte de la concentració de donadors i acceptors ( $N_A$  i  $N_D$ ) a la capa absorbent de CIGS sobre el rendiment global de la cèl·lula també ha estat analitzat.

S'ha estudiat el comportament de la cèl·lula de ZnO/CdS/CIGS (Ga=45%) per a una il·luminació amb concentració. L'eficiència de conversió arriba a un màxim per una il·luminació de 20 sols i oscil·la entre el 27% per a 1 sol (Condició AM1.5) i 30% per 20 sols. La millora de l'eficiència és més acusada en múltiples capes exemple de pel·lícula prima, on l'eficiència és un 50% per 10 sols i 55% per 30 sols.

El sulfur d'estany (SnS) és un material no tòxic i abundant a la terra i que resulta prometedor per aplicacions fotovoltaïques. La cèl·lula fotovoltaïca consisteix en una capa absorbent de SnS, CdS com buffer i ZnO com a finestra òptica, seguint la seqüència ZnO/CdS/p-SnS. Cèl·lules solars fotovoltaïques basades en capes absorbents de SnS han estat modelitzades mitjançant SCAPS. Després d'optimitzar diferents paràmetres i gruixos de les capes s'aconsegueix una eficiència màxima del 10.6%,  $V_{OC}$  de 0.92 volts, JSC de 13.4 mA /  $\text{cm}^2$  i factor d'ompliment del 86.3%. Els estudis de simulació variant paràmetres diversos de les cèl·lules solars com ara el gruix de les diverses capes revelen que l'augment del gruix dels resultats capa absorbent en una major eficiència. La concentració de acceptors poc profunds en el SnS té un efecte decisiu en l'eficiència de conversió, i aquesta s'eleva fins a aproximadament 15% per a les concentracions de acceptors entorn a  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . També es va analitzar l'efecte de la compensació entre els donadors i acceptors però el seu efecte sobre l'eficiència de conversió és insignificant.

Les cèl·lules solars basades en semiconductors II-VI també es troben entre els principals candidats a baix cost la conversió fotovoltaïca de l'energia solar a causa dels seus alts coeficients d'absorció i per tant el baix consum de material per a la seva producció. L'anàlisi

de les cèl·lules solars basades en capes fines de telur de zinc (ZnTe) s'ha realitzat mitjançant el programari SCAPS. S'han simulat les característiques IV, en fosc i il·luminació en funció de diferents paràmetres d'entrada. S'ha posat de manifest que l'augment del gruix ZnTe (0.5-2.0 micres) resulta en una major eficiència dels dispositius fotovoltaics. Paràmetres com ara el gruix de les diverses capes revelen que l'augment del gruix dels resultats capa absorbent en una major eficiència. ZnTe és un semiconductor tipus p amb una banda prohibida d'aproximadament 2.2-2.6 eV, que és massa alta per a un aprofitament eficient de fotons solars, però resulta adequada per albergar una banda intermèdia i estendre el rang d'absorció de fotons solars.

La materials amb banda intermèdia representen un concepte interessant de nous materials per a millorar de l'eficiència de conversió i per tant mereix ser estudiat. Teòricament l'eficiència de conversió màxima per a un dispositiu fotovoltaic basat en una sola capa absorbent està limitat per l'anomenat 'límit Queisser-Schotckly'. No obstant això, l'ús de materials de banda intermèdia en la capa absorbent dels dispositius fotovoltaics permet superar aquest límit. Per aquests materials s'han proposat eficiències de fins a 60%. És possible simular el coeficient d'absorció d'un material amb banda intermèdia i després analitzar el comportament i el rendiment d'aquest tipus de materials i dispositius de banda intermèdia amb el SCAPS. En aquesta tesi hem analitzat els principals paràmetres fotovoltaics d'una cèl·lula solar fotovoltaica basada en ZnTe: O com una capa absorbent. La simulació de l'estructura ZnO/CdS/ZnTe:O arriba a una eficiència del 60% mentre que estructura ZnO/CdS/ZnTe sense banda intermèdia dóna una eficiència del 10%. La raó d'aquesta elevat valor de QE és l'absorció de fotons de baixa energia que d'altra manera no contribueixen a la generació de parells electró-buit. El CuGaS<sub>2</sub> ha estat proposat teòricament com un material adequat per albergar una banda intermèdia si es dopa amb vanadi o crom (CuGaS<sub>2</sub>:V i CuGaS<sub>2</sub>:Cr). Els càlculs teòrics per a cèl·lules solars basades en aquest material amb banda intermèdia prediuen eficiències de conversió 46.7%. No obstant això els nostres intents de modelitzar tal dispositiu amb SCAPS no han donat resultats a causa de que la simulació no convergia i el programari no va ser capaç d'oferir resultats raonables.

El concepte de capes múltiples també ha estat investigat mitjançant SCAPS com una alternativa interessant per augmentar el rendiment de les cèl·lules de CIGS. Substituint les capes de CIGS actuals per diverses capes de CGS i CIS amb diferents energies de les respectives bandes prohibides s'aconsegueix abastar un espectre més ampli i millorar l'eficiència de conversió. La simulació d'un dispositiu fotovoltaic basat en la seqüència ZnO/CdS/CuInSe<sub>2</sub>/CuGaSe<sub>2</sub> ofereix resultats molt encoratjadors amb una eficiència del 30-40% que és superior als dispositius d'una sola capa de CIGS. A més s'aconsegueix disminuir l'espessor de la capa absorbent en un 35-40% el que repercuteix en un estalvi de material.