

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SINALOA**  
**FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO-MATEMÁTICAS**  
**PROGRAMA DE POSGRADO EN FÍSICA**



**Modelado de la celda solar  $Cd_{1-x}Zn_xS/SnS$  por medio del software SCAPS**

**TESIS**

que como requisito para obtener el grado de

**MAESTRO EN FÍSICA**

Presenta

**Lic. Jesús Alfonso Rodríguez Valverde.**

**Directores de Tesis**

**Dr. Fernando Javier Sanchez Rodríguez**

**Dr. Maykel Courel Piedrahita.**

**Culiacán, Sinaloa, Marzo 2023**



Dirección General de Bibliotecas  
Ciudad Universitaria  
Av. de las Américas y Blvd. Universitarios  
C. P. 80010 Culiacán, Sinaloa, México.  
Tel. (667) 713 78 32 y 712 50 57  
dgbuas@uas.edu.mx

## UAS-Dirección General de Bibliotecas

### Repositorio Institucional Buelna

#### Restricciones de uso

Todo el material contenido en la presente tesis está protegido por la Ley Federal de Derechos de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

Queda prohibido la reproducción parcial o total de esta tesis. El uso de imágenes, tablas, gráficas, texto y demás material que sea objeto de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente correctamente mencionando al o los autores del presente estudio empírico. Cualquier uso distinto, como el lucro, reproducción, edición o modificación sin autorización expresa de quienes gozan de la propiedad intelectual, será perseguido y sancionado por el Instituto Nacional de Derechos de Autor.

Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons Atribución-No Comercial  
Compartir Igual, 4.0 Internacional



# Resumen

---

En la actualidad, los semiconductores forman parte fundamental de los componentes de la mayoría de los dispositivos empleados en todo tipo de electrónica. Diodos emisores de luz, láseres, celdas solares y transistores por mencionar algunos basan su funcionamiento en las propiedades optoelectrónicas y estructurales de los semiconductores y en sistemas nanoestructurados, por lo que son vitales para el desarrollo tecnológico. Entre los compuestos mayormente estudiados para la implementación en celdas solares se encuentra el sulfuro de cadmio (CdS). El CdS es utilizado como material ventana en los dispositivos fotovoltaicos, el cual se ha logrado obtener por baño químico en películas alrededor de los 30 nm. Este compuesto posee numerosas ventajas, pero dentro de sus desventajas está lo contaminante que resultan los residuos de la síntesis. Por lo cual en este trabajo se estudia la idea de reemplazarlo por el ternario Sulfuro de Cadmio-Zinc ( $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ ) a fin de mejorar las propiedades optoelectrónicas del dispositivo en el que se emplee.

La presente tesis presenta la investigación donde se modeló la celda solar de  $\text{SnS}/\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$  mediante el uso del software SCAPS-1D, buscando el valor para la concentración en el ternario que optimice sus propiedades fotovoltaicas. El software utilizado en el desarrollo de la presente investigación permite estudiar el comportamiento de un dispositivo semiconductor y de sus características optoelectrónicas bajo la influencia de incidencia de radiación solar. El modelado de la celda solar y la simulación de sus características optoelectrónicas mostró que mediante el uso de un ternario  $\text{Cd}_{0.2}\text{Zn}_{0.8}\text{S}$  con una concentración de donores de  $1.45 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  como material ventana, se logra aumentar la eficiencia de conversión desde el valor reportado en la literatura de 4.32% hasta 8.84%. Esto se obtuvo como resultado del aumento del  $V_{oc}$  de 346.7mV a 600.3mV, la  $J_{sc}$  de 20.7mA/cm<sup>2</sup> a 23.38Ma/cm<sup>2</sup> y el factor de forma de 60.22% a 62.95%.

## Dedicatoria

---

*Dedico el presente trabajo a mi esposa y a mis padres.*

# Agradecimientos

---

Principalmente agradezco a la Lic. Liliana Carolina Lara Hernandez, mi esposa, quien estuvo en cada paso del camino hacia la culminación de este grado de estudios.

Al Dr. Maykel Courel Piedrahita quien compartió su conocimiento y dio oportunidad al espacio del dialogo y la discusión que dieron como resultado el desarrollo de este trabajo de investigación presentado en esta tesis.

Agradezco a José Rosario Angulo Salazar por extenderme su apoyo cuando fue necesario durante mi desarrollo en este grado de estudios, quien siempre me alentó a no menos preciar el camino académico. Agradezco el apoyo que he tenido de su parte desde mis participaciones a los concursos académicos realizados durante mi preparatoria cursada en donde el en esos momentos era director.

Al Dr. Francisco Ramos Brito quien estuvo presente en el transcurso del periodo que comprende este grado de estudio, y atento a mi desarrollo tanto personal como académico, disponible siempre que necesite algún consejo.

Agradezco al Dr. Cristo M. Yee Rendón, coordinador del posgrado a la fecha de la culminación de mis estudios, quien me brindó el apoyo necesario para terminar este trabajo de redacción de tesis.

Al Dr. F.J Sanches Rodriguez por su participación en el desarrollo en el desarrollo del trabajo presentado en esta tesis.

Al Consejo nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT), por el otorgamiento de la beca en el marco de la convocatoria de becas nacionales 2020 segundo periodo (No. 989667).

Agradecer, al programa de Fomento a la Investigación de CUValles-Universidad de Guadalajara en el marco de la convocatoria 2022.

# Contenido

---

Resumen .....	1
Dedicatoria .....	2
Agradecimientos .....	3
Índice de figuras .....	6
Índice de tablas .....	10
<b>1 Introducción.....</b>	<b>11</b>
1.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA .....	19
1.2 JUSTIFICACIÓN.....	19
1.3 HIPÓTESIS.....	20
1.4 OBJETIVOS.....	21
1.4.1 <i>Objetivo general</i> .....	21
1.4.2 <i>Objetivos particulares</i> .....	21
1.5 ESTRUCTURA DE LA TESIS .....	22
<b>2 Fundamentos teóricos de las celdas solares. ....</b>	<b>23</b>
2.1 PROPIEDADES FÍSICAS. ....	24
2.1.1 <i>Propiedades físicas del SnS</i> .....	24
2.1.2 <i>Propiedades físicas del CdS</i> .....	28
2.1.3 <i>Propiedades físicas del ternario Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S</i> .....	33
2.2 APLICACIONES EN CELDAS SOLARES. ....	36
2.3 PARÁMETROS UTILIZADOS EN EL DESARROLLO DEL MODELADO DE LA CELDA SOLAR SNS/CDS. 42	
<b>3 Fundamentos teóricos de las celdas solares. ....</b>	<b>45</b>
3.1 DESCRIPCIÓN TEÓRICA DE LAS CELDAS SOLARES. ....	45
3.1.1 <i>Densidad de corriente de corto circuito</i> .....	48
3.1.2 <i>Voltaje de circuito abierto</i> .....	51
3.1.3 <i>Factor de forma</i> .....	51
3.1.4 <i>Eficiencia de conversión</i> .....	53
3.2 CELDAS SOLARES BAJO EL LÍMITE RADIATIVO .....	53
3.3 CELDAS SOLARES BAJO EL LÍMITE NO RADIATIVO. ....	56
3.4 ECUACIONES DE INTERÉS EN SEMICONDUCTORES.....	60

<b>4</b>	<b>SCAPS 1-D.</b> .....	<b>62</b>
4.1	ANTECEDENTES DEL SOFTWARE .....	63
4.2	DEFINICIÓN DE UN MODELO EN SCAPS. ....	64
4.2.1	<i>Pantalla principal.</i> .....	64
4.2.2	<i>Pantalla de configuración del problema.</i> .....	68
4.2.3	<i>Pantalla de configuración del material.</i> .....	73
4.2.4	<i>Pantalla de resultados de la simulación.</i> .....	75
<b>5</b>	<b>Resultados y discusión.</b> .....	<b>79</b>
5.1	MODELO TEÓRICO. ....	79
5.2	ANÁLISIS DEL IMPACTO DE LA VARIACIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DEL $CD_{1-x}ZN_xS$ EN LA CARACTERÍSTICA J-V DE LA CELDA SOLAR.....	87
5.3	ANÁLISIS DEL IMPACTO DE LA VARIACIÓN DE LA CONCENTRACIÓN INTERPOLADA DEL $CD_{1-x}ZN_xS$ EN LA CARACTERÍSTICA J-V DE LA CELDA SOLAR.....	90
5.4	IMPACTO DEL ESPESOR $CD_{1-x}ZN_xS$ EN LAS CARACTERÍSTICAS OPTOELECTRÓNICAS DE LA CELDA SOLAR. 97	
5.5	CONCENTRACIÓN DE DONORES DEL $CD_{1-x}ZN_xS$ Y SU IMPACTO EN LA POTENCIALIDAD DE LA CELDA SOLAR. ....	102
5.6	COMPARACIÓN DE LAS PROPIEDADES OPTOELECTRÓNICAS ENTRE LAS CELDAS SOLARES CON CDS Y $CD_{1-x}ZN_xS$ COMO MATERIAL VENTANA.....	107
5.7	CONCLUSIONES. ....	110
5.8	ESTUDIOS POSTERIORES.....	111
<b>6</b>	<b>Bibliografía</b> .....	<b>112</b>

# Índice de figuras

---

Figura 1. Porcentajes de capacidad de generación instaladas en México hasta el día 31 de diciembre del 2021 [1].	11
Figura 2. Mapa de recurso solar potencial eléctrico fotovoltaico [3].	15
Figura 3. Estructura cristalina ortorrómbica, donde las esferas moradas representan los átomos de estaño y las esferas amarillas los átomos de azufre[16].	25
Figura 4. a) Estructura cristalina cúbica b) Estructura cristalina hexagonal, donde las esferas color naranja representan los átomos de cadmio y las esferas de color amarillo representan los átomos de azufre[21].	28
Figura 5. Transmitancia medida en películas de Sulfuro de Cadmio con distinto tratamiento térmico[30].	30
Figura 7. Resistividad y Movilidad de portadores de carga en películas de CdS[30]. <b>¡Error! Marcador no definido.</b>	
Figura 8. Estructuras Cristalinas del $Cd_{1-x}Zn_xS$ [35].	33
Figura 9. Coeficiente de absorción obtenido del análisis de las películas delgadas de SnS sintetizadas por medio de "sputtering"[53].	39
Figura 10. Curva J-V de la celda solar experimental[18].	43
Figura 11. Eficiencia cuántica de la celda solar experimental[18].	43
Figura 12. Diagrama esquemático de una celda solar de película delgada.	46
Figura 13. Curva característica de un diodo donde se muestra el cambio de su comportamiento al estar bajo iluminación.	47
Figura 14. Curva característica J-V de una celda solar donde se presentan los elementos; $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , $J_{mp}$ y $V_{mp}$ .	48
Figura 15. Pantalla principal de configuración del punto de trabajo y condiciones de análisis del software SCAPS.	65
Figura 16. Panel de configuración del punto de trabajo del software SCAPS.	65
Figura 17. Panel de configuración de resistencia en serie y en paralelo en la pantalla principal del software SCAPS, asociadas al dispositivo modelado.	66
Figura 18. Panel para la configuración de la iluminación del software SCAPS.	66

Figura 19. Panel de acción del software SCAPS.....	66
Figura 20. Panel de administración de bibliotecas de ajustes generales del software SCAPS. .....	67
Figura 21. Panel de botones de acción en la pantalla principal del software SCAPS.....	68
Figura 22. Pantalla de configuración del problema del software SCAPS.....	69
Figura 23. Panel de los materiales en la sección de configuración de problema del software SCAPS. ....	70
Figura 24. Panel gráfico del diseño del dispositivo de la configuración del problema en el software SCAPS.....	71
Figura 25. Panel de información en la configuración del problema del software SCAPS....	72
Figura 26. Panel de guardado de la configuración del problema en el software SCAPS.....	72
Figura 27. Pantalla de configuración del material del software SCAPS.....	73
Figura 28. Pantalla de configuración de los defectos de un material en el software SCAPS. .....	74
Figura 29. Interfaz de resultados de una simulación en el software SCAPS. ....	76
Figura 30. Interfaz de resultados J-V del software SCAPS.....	77
Figura 31. Interfaz de resultados de Eficiencia Cuántica Externa del software SCAPS.....	78
Figura 32. Curva característica J-V de la celda solar reportada. ....	80
Figura 33. a) Eficiencia cuántica de la celda, b) Contribuciones en las pérdidas de densidad de corriente.....	81
Figura 34. Comparativa entre las curvas J-V reportada y la simulada por el modelo teórico bajo el límite radiativo. ....	82
Figura 35. Comportamiento de las curvas J-V del modelo teórico cuando a) los defectos en el volumen y b) la recombinación en la intercara, son tomadas en cuenta. ....	83
Figura 36. Comparación de las curvas características J-V del modelo teórico y de la celda solar reportada.....	84
Figura 37. Análisis general de rol de los distintos mecanismos de recombinación en el comportamiento de la curva J-V de la celda solar. ....	85
Figura 38. Comparación de las curvas de eficiencia cuántica del modelo teórico y la de la celda solar experimental.....	86

Figura 39. Características optoelectrónicas de la curva J-V y eficiencia de las celdas solares simuladas con distintas concentraciones en el ternario $Cd_{1-x}Zn_xS$ utilizado como ventana, cuyas propiedades fueron tomadas de reportes encontrados en la literatura.	87
Figura 40. Características optoelectrónicas de la curva J-V y eficiencia de las celdas solares simuladas con distintas concentraciones en el ternario $Cd_{1-x}Zn_xS$ utilizado como ventana, cuyas propiedades fueron aproximadas mediante la interpolación de los datos reportados en la literatura. ....	91
Figura 41. Curvas de eficiencia cuántica de las celdas solares simuladas con distintas concentraciones en el ternario $Cd_{1-x}Zn_xS$ utilizado como ventana, cuyas propiedades fueron aproximadas mediante la interpolación de los datos reportados en la literatura. ....	93
Figura 42. Diagrama de bandas de las celdas solares con distinta concentración en el material ternario $Cd_{1-x}Zn_xS$ : a) $x=0$ , b) $x=0.8$ . ....	95
Figura 43. Gráfico de contorno de la influencia del espesor y la concentración del $Cd_{1-x}Zn_xS$ en el voltaje de circuito abierto de la celda solar. ....	98
Figura 44. Gráfico de contorno de la influencia del espesor y la concentración del $Cd_{1-x}Zn_xS$ en la densidad de corto circuito de la celda solar. ....	99
Figura 45. Gráfico de contorno de la influencia del espesor y la concentración del $Cd_{1-x}Zn_xS$ en el factor de forma de la celda solar. ....	100
Figura 46. Gráfico de contorno de la influencia del espesor y la concentración del $Cd_{1-x}Zn_xS$ en la eficiencia de conversión de la celda solar. ....	101
Figura 47. Gráfico de contorno de la influencia de la concentración de donores y la concentración estequiométrica en el $Cd_{1-x}Zn_xS$ en el voltaje de circuito abierto de la celda solar. ....	103
Figura 48. Gráfico de contorno de la influencia de la concentración de donores y la concentración estequiométrica en el $Cd_{1-x}Zn_xS$ en la densidad de corriente de corto circuito de la celda solar. ....	104
Figura 49. Gráfico de contorno de la influencia de la concentración de donores y la concentración estequiométrica en el $Cd_{1-x}Zn_xS$ en el factor de forma de la celda solar. ....	105
Figura 50. Gráfico de contorno de la influencia de la concentración de donores y la concentración estequiométrica en el $Cd_{1-x}Zn_xS$ en la eficiencia de conversión de la celda solar. ....	106
Figura 51. Comparación de las curvas J-V de las celdas solares: Experimental (reportada en la literatura), celda solar con material ventana de concentración $x=0.8$ , y la implementación de una concentración de donores de $1.45 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . ....	108

Figura 52. Comparación de la eficiencia cuántica de las celdas solares: Experimental (reportada en la literatura), celda solar con material ventana de concentración  $x=0.8$ , y la implementación de una concentración de donores de  $1.45 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  ..... 109

# Índice de tablas

---

Tabla 1. Evolución histórica de la generación total de energía eléctrica 2018-2021 [1]. *cantidades en GWh .....	14
Tabla 2. Características cristalográficas del sulfuro de estaño[16]. .....	26
Tabla 3. Parámetros representativos del SnS.[3].....	27
Tabla 4. Parámetros representativos de las propiedades físicas del Sulfuro de Cadmio.....	29
Tabla 5. Intervalos posibles para los parámetros optoelectrónicos del $Cd_{1-x}Zn_xS$ . .....	34
Tabla 6. Parámetros representativos de diferentes concentraciones del ternario $Cd_xZn_{1-x}S$ [32][8][37][37]–[41][42], [43].....	35
Tabla 7. Propiedades eléctricas de sulfuro de estaño sintetizadas mediante los precursores; (1) $Sn(C_4H_9)_2(S_2CN(C_2H_5)_2)_2$ , (2) $Sn(C_4H_9)_2(S_2CN(CH_3)(C_4H_9)_2)$ y (3) $Sn(C_4H_9)_2(S_2CN(C_4H_9)_2)_2$ [45].....	37
Tabla 8. Propiedades ópticas del SnS sintetizado por evaporación térmica[47]. .....	38
Tabla 9. Parámetros de las películas y la celda solar reportados por el autor en el trabajo experimental[18]. .....	42
Tabla 10. Valores de las características optoelectrónicas de la celda solar.....	81
Tabla 11. Tabla comparativa de los valores de las propiedades optoelectrónicas de las diferentes celdas solares. ....	85
Tabla 12. Parámetros optoelectrónicos de las celdas solares simuladas con distintas concentraciones en el ternario $Cd_{1-x}Zn_xS$ utilizado como ventana, cuyas propiedades fueron tomadas de reportes encontrados en la literatura. ....	88
Tabla 13. Valores de las Características optoelectrónicas de la curva J-V de las celdas solares simuladas con distintas concentraciones en el ternario $Cd_{1-x}Zn_xS$ utilizado como ventana, cuyas propiedades fueron aproximadas mediante la interpolación de los datos reportados en la literatura.....	92
Tabla 14. Comparación de los valores de la característica J-V de las celdas solares: Experimental (reportada en la literatura), celda solar con material ventana de concentración $x=0.8$ , y la implementación de una concentración de donores de $1.45 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .....	108

# 1 Introducción

En la actualidad uno de los principales temas de interés para la comunidad científica ha sido el uso alternativo de energías para el abasto energético global, y el desarrollo de investigación y producción de conocimiento para el uso responsable de recursos. Estos temas resultan importantes por dos principales motivos, el primero es en virtud del cuidado del medio ambiente y nuestro planeta en general, y el segundo es el eventual agotamiento de los combustibles fósiles.

Actualmente existen numerosas fuentes de energía entre ellas, los combustibles fósiles, las energías limpias no renovables y las energías limpias renovables. Así como en el mundo, en México aún predomina el uso de combustibles fósiles, gas natural y el uso de carboeléctricas con un 70.5% de la producción total de energía en el país. Con el paso de los años se ha ido reduciendo la producción convencional de energía en el país, en particular en México en 2018 se produjo un 77.5%, en 2019 un 77.8%, en 2020 un 73.4% y en 2021 un 70.5% de la producción total de energía respectivamente[1]. En la figura 1 se muestra la contribución de generación en eléctrica de los diferentes sistemas instalados en México hasta el 31 de diciembre de 2021.

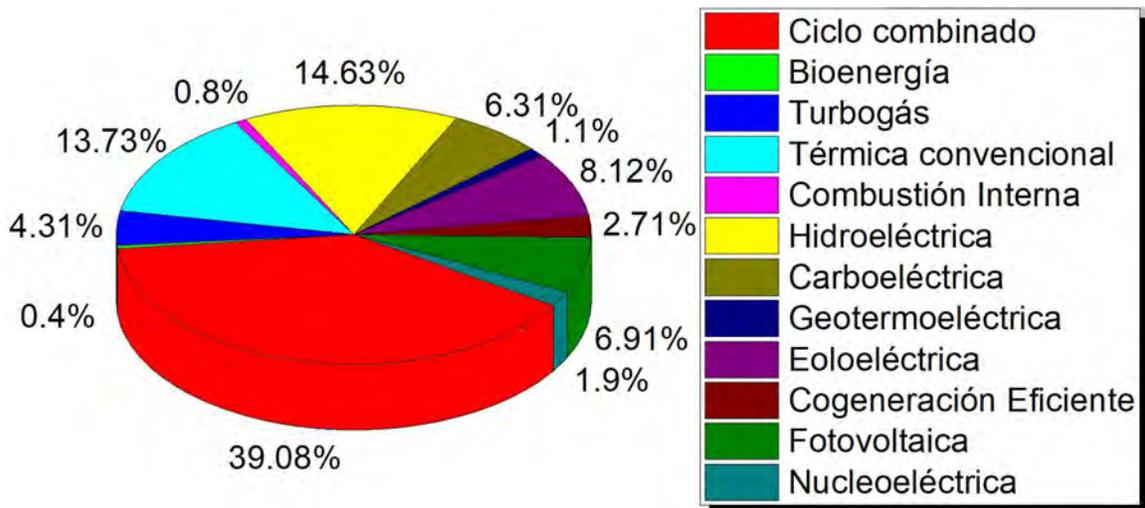


Figura 1. Porcentajes de capacidad de generación instaladas en México hasta el día 31 de diciembre del 2021 [1].

Las fuentes convencionales de energía como el gas natural, las termoeléctricas y el uso de combustibles fósiles se encuentran entre los mayores generadores de emisiones de dióxido de carbono que agravan de gran manera la contaminación del medio ambiente. Las emisiones de CO<sub>2</sub> por combustibles fósiles en México incrementaban anualmente alrededor de 3% desde 1996 hasta 2010, del 2011 al 2015 estas emisiones incrementaron solo un 0.4%[2]. Por otro lado, del 2016 al 2019 las emisiones en el país disminuyeron cerca del 1.3%, lo cual es más de la disminución media mundial de emisiones de CO<sub>2</sub> por país[2]. El último año registrado fue 2020, en este año México fue el tercer país con mayor disminución en sus emisiones de CO<sub>2</sub> con un 18.3% menos[2].

Como se observa en la tabla 1, del 29.5% de energía producida por fuentes limpias en México en 2021, el 84% que corresponde a 81,825.43 GWh fue producido mediante fuentes renovables. Entre las fuentes renovables que se utilizaron para la producción de energía se encuentran la hidroeléctrica, la geotérmica, eólica, bioenergía y la fotovoltaica.

El desarrollo de energías alternativas se ha convertido en una necesidad global, no solo debido a la preocupación por el medio ambiente y la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero, sino también por la seguridad energética, la independencia energética, la creación de empleos, la innovación tecnológica y la reducción de la pobreza energética. La dependencia de un solo recurso energético puede hacer a los países vulnerables a las fluctuaciones de precios, conflictos políticos y desastres naturales, lo que hace necesario diversificar las fuentes de energía y reducir la dependencia de los combustibles fósiles para aumentar la seguridad energética y la independencia energética. Además, el desarrollo de energías alternativas puede fomentar la creación de empleos en industrias emergentes, impulsar la innovación y el emprendimiento, y tener beneficios a largo plazo para la economía y la sociedad en general. Finalmente, la reducción de la pobreza energética es otro de los motivos que impulsan la investigación y el desarrollo de energías alternativas, ya que el acceso

a fuentes de energía más limpias y asequibles puede mejorar la calidad de vida de las personas en todo el mundo.

TECNOLOGÍA/FUENTE DE ENERGÍA		2018	2019	2020	2021
Hidroeléctrica	Hidroeléctrica de Embalse Mayor	26,442.52	18,299.80	21,235.47	29,668.12
	Hidroeléctrica Menor	5,791.58	5,302.64	5,581.54	5,049.04
<b>Hidroeléctrica total</b>		<b>32,234.09</b>	<b>23,602.43</b>	<b>26,817.01</b>	<b>34,717.16</b>
<b>Geotermoeléctrica</b>		<b>5,064.66</b>	<b>5,060.66</b>	<b>4,574.61</b>	<b>4,242.90</b>
<b>Eoloeléctrica</b>		<b>12,435.25</b>	<b>16,726.91</b>	<b>19,702.89</b>	<b>21,074.87</b>
<b>Fotovoltaica total</b>		<b>3,211.71</b>	<b>9,964.32</b>	<b>15,835.62</b>	<b>20,194.91</b>
<b>Fotovoltaica</b>		<b>2,176.31</b>	<b>8,393.66</b>	<b>13,527.68</b>	<b>17,068.97</b>
<b>Fotovoltaica Generación Distribuida</b>		<b>1,018.15</b>	<b>1,564.84</b>	<b>2,303.56</b>	<b>3,110.32</b>
<b>Fotovoltaica-Abasto aislado</b>		<b>1.41</b>	<b>4.37</b>	<b>4.37</b>	<b>15.62</b>
<b>Fideicomiso de Riesgo Compartido (FIRCO)</b>		<b>15.84</b>	<b>1.45</b>	<b>0.00</b>	<b>0.00</b>
Bioenergía	Bagazo de Caña	1,578.79	1,476.32	1,583.21	1,374.10
	Biogás	213.32	241.18	526.68	176.11
	Relleno Sanitario	125.58	110.90	67.40	16.23
	Licor Negro	71.44	38.05	26.41	24.83
	Biomasa	0.04	0.04	2.81	4.32
<b>Bioenergía Total</b>		<b>1,989.17</b>	<b>1,866.49</b>	<b>2,206.51</b>	<b>1,595.58</b>
<b>RENOVABLES TOTAL</b>		<b>54,934.88</b>	<b>57,220.82</b>	<b>69,136.63</b>	<b>81,825.43</b>
<b>Nucleoeléctrica</b>		<b>13,200.33</b>	<b>10,880.73</b>	<b>10,864.27</b>	<b>11,605.53</b>
<b>Frenos Regenerativos</b>		<b>3.60</b>	<b>3.60</b>	<b>3.60</b>	<b>3.60</b>
Cogeneración Eficiente	Ciclo Combinado	987.73	1,887.20	2,660.51	2,042.91
	Abasto aislado - C.C. y C.I.	119.40	114.96	107.08	66.09
	Combustión Interna	77.88	78.74	88.93	75.52
	Turbogás	1,244.05	1,292.90	1,438.74	1,230.99
	Termoeléctrica convencional	0.00	0.00	0.00	0.00
<b>Cogeneración Eficiente Total</b>		<b>2,424.62</b>	<b>3,378.24</b>	<b>4,295.27</b>	<b>3,415.51</b>
<b>LIMPIAS NO RENOVABLES TOTAL</b>		<b>15,628.55</b>	<b>14,262.57</b>	<b>15,163.14</b>	<b>15,024.64</b>
<b>LIMPIAS TOTAL</b>		<b>70,563.43</b>	<b>71,483.39</b>	<b>84,299.77</b>	<b>96,850.07</b>
<b>Porcentaje</b>		<b>22.5%</b>	<b>22.2%</b>	<b>26.6%</b>	<b>29.5%</b>
<b>Ciclo combinado</b>		<b>163,876.69</b>	<b>175,506.25</b>	<b>185,637.84</b>	<b>186,715.14</b>
<b>Térmica convencional</b>		<b>39,344.70</b>	<b>38,019.60</b>	<b>22,405.49</b>	<b>22,196.16</b>
<b>Abasto aislado - Térmica convencional</b>		<b>44.99</b>	<b>38.14</b>	<b>40.21</b>	<b>45.23</b>
<b>Turbogás</b>		<b>9,507.58</b>	<b>10,903.82</b>	<b>8,663.92</b>	<b>11,149.51</b>
<b>Abasto aislado – Turbogás</b>		<b>155.35</b>	<b>148.74</b>	<b>160.21</b>	<b>250.42</b>
<b>Combustión interna</b>		<b>2,588.67</b>	<b>3,187.43</b>	<b>2,841.40</b>	<b>2,120.55</b>
<b>Abasto aislado - Combustión interna</b>		<b>195.89</b>	<b>313.79</b>	<b>363.44</b>	<b>379.29</b>
<b>Carboeléctrica</b>		<b>27,346.98</b>	<b>21,611.02</b>	<b>12,525.05</b>	<b>8,704.11</b>
<b>Cogeneración</b>					
<b>Abasto aislado – Cogeneración</b>		<b>353.96</b>	<b>372.24</b>	<b>331.18</b>	<b>379.29</b>
<b>CONVENCIONALES FÓSILES TOTAL</b>		<b>243,414.81</b>	<b>250,101.03</b>	<b>232,968.74</b>	<b>231,747.91</b>
<b>Porcentaje</b>		<b>77.5%</b>	<b>77.8%</b>	<b>73.4%</b>	<b>70.5%</b>
<b>TOTAL</b>		<b>313,978.24</b>	<b>321,584.42</b>	<b>317,268.51</b>	<b>328,597.98</b>

Tabla 1. Evolución histórica de la generación total de energía eléctrica 2018-2021 [1]. \*cantidades en GWh

Con el paso de los años ha crecido el interés por la producción de energía mediante el uso de fuentes fotovoltaicas en nuestro país. En la tabla 1 se observa el paso de una producción total por medio de dispositivos fotovoltaicos de 3,211.71 GWh en 2018 a un total de 20,194.91 GWh en 2021. Este hecho era de esperarse debido a la gran extensión territorial que posee el país y la cantidad de radiación incidente que recibe a lo largo de dicho territorio. En la figura 2 se observa que de 1999 a 2018 se registraron niveles de potencial eléctrico fotovoltaico de alrededor de 5 kWh a lo largo del territorio mexicano, entre las zonas con más radiación registrada se tienen zonas del centro, este y noroeste del

país como los estados de Baja California, Baja California sur, Chihuahua, Sonora, Durango y Sinaloa [3]. Entre las propuestas que aprovechan este potencial se encuentran las celdas solares, las cuales son dispositivos semiconductores capaces de generar energía eléctrica mediante la generación de pares electrón-hueco, los cuales a su vez generan un flujo de corriente, el cual puede ser captado para su uso y almacenamiento.

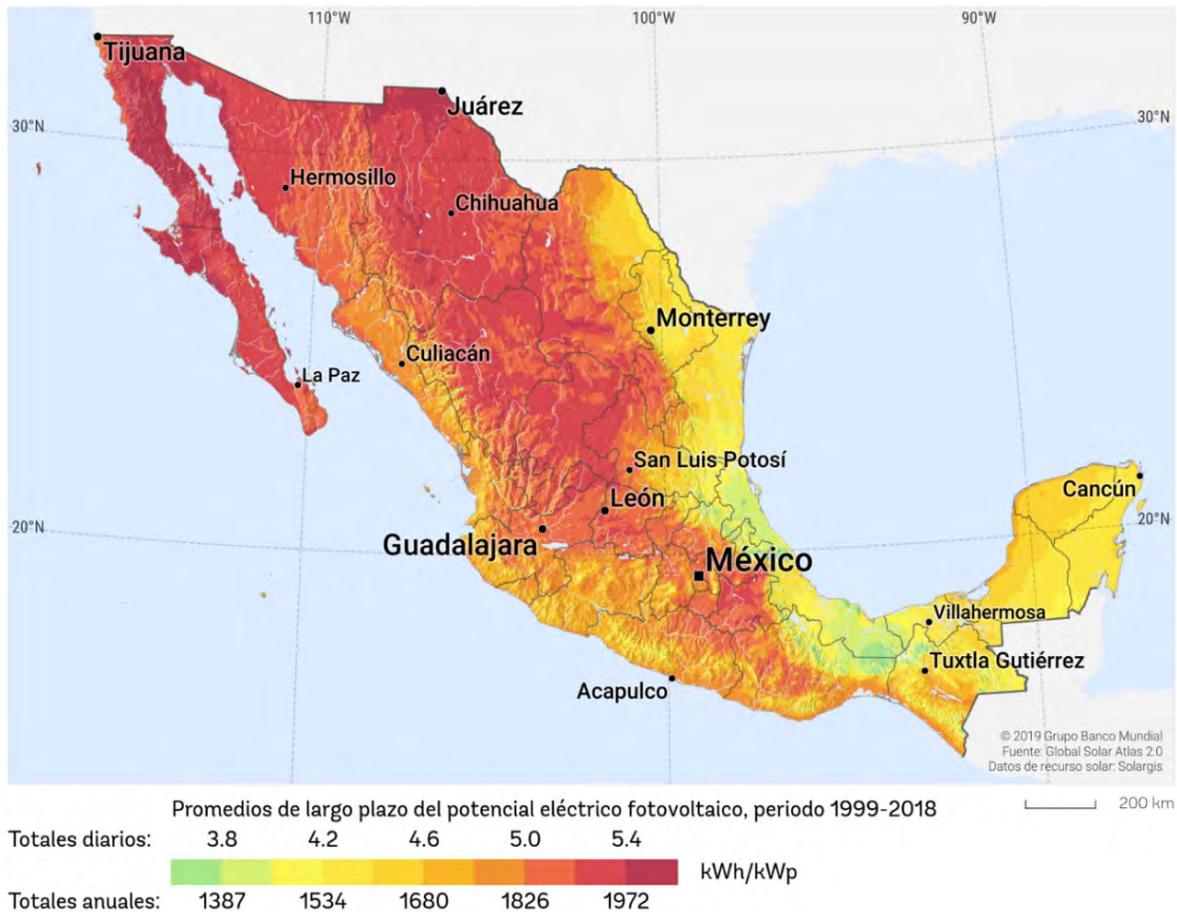


Figura 2. Mapa de recurso solar potencial eléctrico fotovoltaico [3].

Las celdas solares de primera generación, o mejor conocidas como las celdas solares de silicio (Si) son la tecnología pionera en este tipo de dispositivos. Este tipo de celdas solares tienen muchos atributos, entre ellos su estabilidad, la abundancia del Si en la naturaleza, bajo nivel de toxicidad de sus residuos y su eficiencia de conversión. En la actualidad este tipo de celdas solares han alcanzado eficiencias de conversión de 27% y 23% en el caso del uso de Si-

monocristalino y Si-Policristalino, respectivamente[4]. Debido a estos niveles de eficiencia es que aun en el año 2017 se registró que más del 95% de la producción total fotovoltaica en el mundo fue de celdas solares de Si[4]. Por otro lado, el material Si presenta transiciones indirectas entre sus bandas lo cual lo hace menos atractivo para aplicaciones ópticas, esto implica que al llegar un fotón es necesaria la intervención de un fonón de la red cristalina para que se produzca la absorción. Como resultado, esto implica un coeficiente de absorción menor del material y por lo tanto la necesidad del uso de más material, encareciendo así este tipo de tecnología.

En búsqueda de lograr celdas solares más delgadas y eficientes surgieron las celdas solares de segunda generación o mejor conocidas como celdas solares de película delgada. Este tipo de celdas solares se caracterizan por ser celdas solares con material absorbedor de espesores pico de 1  $\mu\text{m}$  a 5  $\mu\text{m}$  y un material ventana de 25 nm a 120 nm de espesor[5]. Además, estas celdas están constituidas por heterouniones de materiales semiconductores, los cuales permiten una unión p-n y una región de empobrecimiento funcional con menor cantidad de material con respecto a las celdas de Si, debido a las transiciones directas que propician un coeficiente de absorción mayor en los materiales absorbedores utilizados en esta tecnología. Entre las celdas solares más estudiadas basadas en película delgada se encuentra la tecnología del telurio de cadmio (CdTe) que ha alcanzado una eficiencia de 22.1%[6], las celdas solares compuestas por  $\text{Cu}(\text{In,Ga})(\text{Se,S})_2$  (CIGS) que se encuentran en 23.35 % de eficiencia[7].

Las celdas solares de película delgada presentan una serie de ventajas en comparación con las celdas de silicio cristalino. En primer lugar, las celdas de película delgada son más ligeras y flexibles, lo que permite su aplicación en diferentes tipos de superficies y su transporte de manera más eficiente. Además, estas celdas tienen una mayor resistencia a la sombra y al alto calor, lo que las hace más efectivas en ambientes de baja iluminación y alta temperatura. Por otro

lado, las celdas de película delgada también son más económicas de producir en masa, lo que las hace más accesibles y sostenibles en el tiempo.

Sin embargo, a pesar de sus ventajas, las celdas solares de película delgada también presentan algunas limitaciones. En primer lugar, su eficiencia es menor en comparación con las celdas de silicio cristalino, lo que limita su capacidad para generar energía eléctrica en grandes cantidades. Además, la vida útil de las celdas de película delgada es menor en comparación con las celdas de silicio cristalino, lo que reduce su capacidad para generar energía de manera sostenible a largo plazo. En general, el uso de celdas de película delgada debe ser evaluado en función de las necesidades específicas de cada proyecto y las limitaciones técnicas y económicas que se presenten.

Recientemente el material perovskita ha recibido un gran interés por parte de la comunidad científica, lográndose una eficiencia máxima en este tipo de celdas del 21.6%[8]. Por otra parte el arseniuro de galio (GaAs) ha sido usado en celdas solares las cuales han alcanzado eficiencias de 32.9%[9]. Una ventaja de este tipo de dispositivos fotovoltaicos es que pueden ser sintetizados por numerosos métodos de baja temperatura, lo cual representa un menor costo de producción que el de las celdas solares de primera generación[10]. Pero resultan otras complicaciones como la escases del Galio (Ga), de Indio (In) y el telurio (Te), y la toxicidad del Plomo (Pb) y el cadmio (Cd), así como la estabilidad de los dispositivos fotovoltaicos como en la perovskita[11][12]. Por otro lado, existen celdas solares que emplean materiales más abundantes y menos tóxicos, con valores de coeficiente de absorción deseado debido a transiciones directas entre sus bandas para la implementación de estos materiales en este tipo de dispositivos, tal es el caso del estaño y el azufre en el sulfuro de estaño (SnS) que se utiliza como material semiconductor absorbedor en celdas solares de películas delgadas. Además, este material semiconductor presenta conductividad tipo p y un ancho de zona prohibida de alrededor de 1.2 eV[13], lo cual hace que tenga un límite teórico de eficiencia de conversión de alrededor de 32.74%[14]. Aun así los

dispositivos con este tipo de tecnología han alcanzado solo eficiencias de 4.8% [15], por lo cual es necesario trabajar en el desarrollo de este tipo de celdas.

## 1.1 Planteamiento del problema

Uno de los materiales mayormente estudiado y utilizado gracias a sus deseables características y su buen comportamiento como material ventana es el sulfuro de cadmio (CdS), el cual posee una energía de banda prohibida que ronda alrededor de los 2.42 eV. Sin embargo, en celdas solares del tipo SnS/CdS esta característica hace que algunos fotones en la región del azul sean captados por el CdS sin dejarlos ser absorbidos en la región p. Debido a lo anterior se ha establecido teóricamente que es necesario reducir el espesor del CdS a escalas experimentalmente complicadas, o reducir la concentración de Cd en el material ventana. Además, es muy conocido que los residuos del cadmio que resultan de producir este compuesto son muy tóxicos para el medio ambiente por lo cual se ha buscado desde hace algunos años compuestos alternativos que reduzcan el uso del cadmio al mismo tiempo que logren reproducir las características del CdS como material ventana.

## 1.2 Justificación

Como continuación al trabajo de tesis para la obtención de grado de licenciatura titulado "*Modelado de celdas solares de Sulfuro de Cadmio/Sulfuro de Estaño mediante el uso del software SCAPS*" donde se presentó una ruta para la optimización de este tipo de dispositivos fotovoltaicos, en el presente trabajo se incorporará el uso de zinc (Zn) en el material ventana mediante el uso del ternario sulfuro de cadmio zinc ( $Cd_{1-x}Zn_xS$ ) como alternativa al uso de sulfuro de cadmio (CdS). Esto con el objetivo de aumentar la eficiencia de conversión del dispositivo fotovoltaico mediante la disminución de absorciones parásitas presentadas por el CdS alrededor de los 300nm - 400nm y a su vez, se reduce el uso de material tóxico (Cd) para el medio ambiente. Posteriormente se busca optimizar la relación de Cd y Zn en el ternario  $Cd_{1-x}Zn_xS$  mediante una variación de este parámetro. El modelado de esta celda solar se realizará mediante el software *Solar Cell*

*Capacitance Simulator* (SCAPS) que permite modelar celdas solares, el cual ha ayudado en la última década al estudio de distintos tipos celdas solares. En este software no es posible programar un ternario o una relación entre compuestos por lo que en principio se habrá de realizar una librería con datos experimentales reportados, los cuales muestran la variación de cada uno de los parámetros para las distintas relaciones de Cd/Zn.

Otro aspecto importante que sustenta la importancia de trabajar en la búsqueda de las características que mejoran la eficiencia de una celda solar con SnS como material absorbedor es debido a que su coeficiente de absorción y su ancho de banda prohibida teóricamente, lo hacen capaz de tener una eficiencia alrededor de 28%, mientras que los valores reportados experimentalmente están muy por debajo de este límite. Este trabajo marca un paso más en dirección al descubrimiento de nuevas rutas de mejora en pro de alcanzar la eficiencia de conversión teórica reportada para este tipo de dispositivos.

### 1.3 Hipótesis

Al usar el ternario  $Cd_{1-x}Zn_xS$  en vez de CdS como material ventana en la celda solar SnS/CdS se encontrará una concentración de éste con la cual se reducirá el contenido de cadmio y a su vez aumentará la eficiencia de conversión con respecto a la celda con CdS. La variación sistemática de los parámetros del ternario permitirá encontrar la concentración óptima ( $x$ ) que consentirá una serie de características optoelectrónicas tales que su eficiencia de conversión sea mayor a la que se tenía antes de su implementación.

## 1.4 Objetivos

### 1.4.1 Objetivo general

- Modelar la celda solar SnS/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S a fin encontrar la razón composicional del ternario y sus propiedades que favorezcan la optimización de las propiedades optoelectrónicas del dispositivo

### 1.4.2 Objetivos particulares

- Verificar la reproducibilidad del modelo teórico mediante el modelado de una celda solar reportada en la literatura del tipo SnS/CdS.
- Modelar la celda solar sustituyendo el material ventana CdS de la celda solar por Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S.
- Determinar los parámetros necesarios para el modelado de la celda solar del ternario para los valores de “x” desde 0 hasta 1 en Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S en al menos 10 pasos.
- Determinar el valor para “x” en el ternario que optimice las características de la celda solar.
- Determinar qué otros parámetros como espesor de la película o concentración de donores contribuyen a las características optoelectrónicas de la celda en virtud de aumentar la eficiencia de conversión, encontrar los valores óptimos para estos parámetros y realizar la comparación de las características obtenidas mediante su implementación.

## 1.5 Estructura de la tesis

En el capítulo 1 se hace una introducción al trabajo de investigación abordado en la presente tesis mediante la presentación del interés de la comunidad científica en el tema que aborda. Así también se muestra la hipótesis, justificación y objetivos del presente trabajo.

En el capítulo 2 se presentan las propiedades más importantes de los materiales de interés en el presente trabajo para su simulación y su correcto análisis. Sus propiedades representativas, los métodos de síntesis por los que son comúnmente obtenidos y algunas de sus aplicaciones en el área.

En el capítulo 3 se explican las propiedades físicas necesarias para el análisis de celdas solares y los distintos tipos de sistemas bajo los cuales pueden ser examinadas.

En el capítulo 4 se describe los aspectos más relevantes del software utilizado en la simulación de las celdas solares en el presente trabajo de investigación. Entre estos aspectos se encuentran la accesibilidad de las funciones al usuario y la metodología de la simulación.

En el capítulo 5 se realiza la presentación y discusión de los resultados obtenidos mediante la investigación realizada en este trabajo. Además, se hace presente la conclusión de estos resultados y se estima cuáles podrían ser los trabajos posteriores en esta línea de trabajo.

## 2 Fundamentos teóricos de las celdas solares.

---

A continuación, en este capítulo se tiene como objetivo principal dar a conocer las principales propiedades físicas de los compuestos que serán objetos de estudio en la presente tesis. Estas propiedades tienen relevancia para entender el comportamiento de cada uno de los materiales y el papel que juegan en la celda solar. Se presentarán las propiedades físicas, ópticas y eléctricas, las cuales son las que hacen que el SnS, CdS y el  $Cd_xZn_{1-x}S$  sean de gran interés para su aplicación en celdas solares de películas delgadas.

Otro de los objetivos del capítulo es mostrar los resultados que se han obtenido en los últimos años mediante el uso del SnS, el CdS y el ternario  $Cd_xZn_{1-x}S$  en celdas solares de películas delgadas, así como los resultados en cuanto a la eficiencia de conversión lograda con esta tecnología y los métodos de síntesis para ellas.

Por último, se hará una revisión del uso del  $Cd_xZn_{1-x}S$  como alternativa al CdS como material ventana en celdas solares de este y otros tipos de tecnologías, y las variaciones en las propiedades de estos dispositivos. Se mostrarán las diferentes ventajas que se han logrado mediante la reducción de cadmio incorporando el zinc al material ventana mediante el ternario.

## 2.1 Propiedades físicas.

Las propiedades físicas de los materiales son aquellas características representativas que distinguen a cada uno de los materiales de manera independiente, que principalmente dependen de los átomos que constituyen cada uno de estos compuestos, así como las interacciones entre ellos. Entre las propiedades físicas de interés para el estudio de materiales semiconductores y su uso en dispositivos fotovoltaicos se encuentran: las propiedades ópticas, las propiedades eléctricas, las propiedades estructurales y las propiedades electrónicas. Además, estas propiedades dependen de otros factores como su morfología, relación de composición, condiciones de síntesis y demás, los cuales cuando en un mismo compuesto tienen un crecimiento distinto, pueden provocar fluctuaciones en las propiedades físicas del material en cuestión, a estas fluctuaciones se les conoce como propiedades anisotrópicas. En las siguientes secciones se mencionarán algunas de las propiedades físicas de los compuestos de interés en el desarrollo de la presente tesis.

### 2.1.1 Propiedades físicas del SnS.

Las propiedades estructurales son aquellas que dependen directamente de su crecimiento o estructura de red cristalina. Entre los aspectos más relevantes a mencionar se encuentran: el tipo de estructura cristalina que presentan los materiales, así como los valores para las constantes de red, el cual es la distancia entre dos átomos idénticos en la red cristalina, medida en una dirección específica y en condiciones de temperatura y presión estándar.

Se han reportado diferentes estructuras cristalinas que puede presentar el sulfuro de estaño, como los son la estructura cúbica, la tricíclica y la ortorrómbica[16]. En la figura 3 se observa la configuración espacial de los átomos de estaño y azufre en el crecimiento cristalino ortorrómbico.

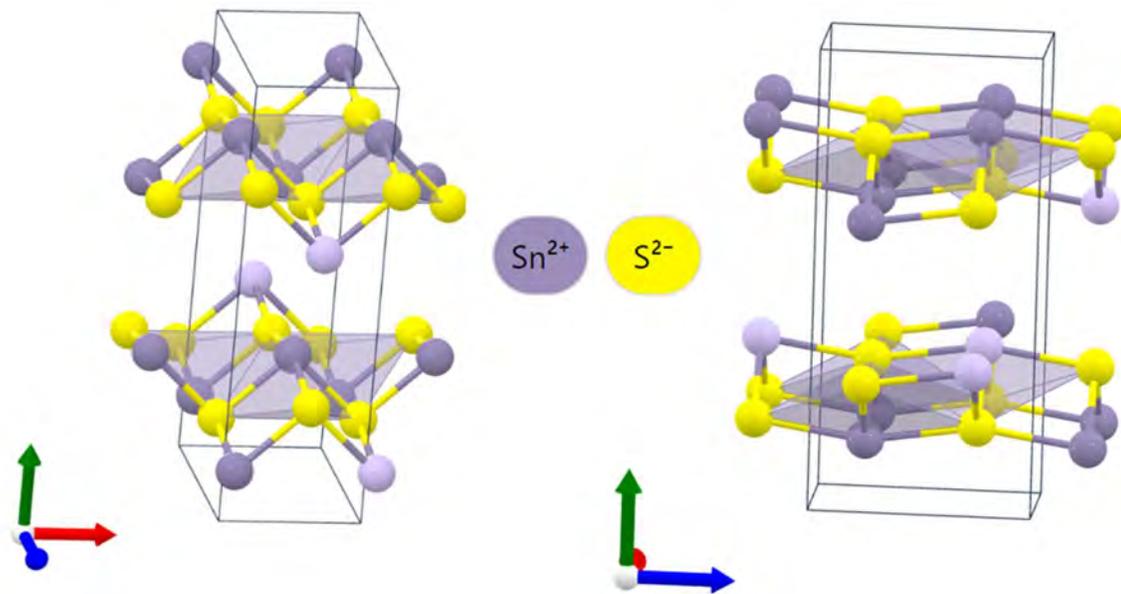


Figura 3. Estructura cristalina ortorrómbica, donde las esferas moradas representan los átomos de estaño y las esferas amarillas los átomos de azufre[16].

En la tabla 2 se muestran los crecimientos cristalinos presentados por el sulfuro de estaño y su ancho de banda prohibida al presentar las distintas fases permitidas. En esta tabla se observa que en reportes donde el crecimiento cristalino ha sido del tipo ortorrómbico se han encontrado valores de ancho de banda prohibida (band gap) de 1.27 eV. Particularmente para este crecimiento ortorrómbico se reportaron valores para las constantes de red de  $a=3.81\text{\AA}$ ,  $b=12.11\text{\AA}$  y  $c=5.79\text{\AA}$  [16].

Formula	Estructura cristalina	Energía encima del nivel de referencia(eV/átomo)	Ancho de banda prohibida (eV)
SnS	Ortorrómbica	0	0.90
SnS <sub>2</sub>	Trigonal	0	1.57
SnS <sub>2</sub>	Hexagonal	<0.01	1.49
Sn <sub>2</sub> S <sub>3</sub>	Ortorrómbica	<0.01	0.78
SnS <sub>2</sub>	Cúbica	0.01	1.20
SnS	Ortorrómbica	0.01	0.31
SnS	Cúbica	0.04	0.90
SnS	Ortorrómbica	0.05	1.82
SnS	Ortorrómbica	0.05	1.67
SnS	Tricíclica	0.05	1.43
SnS	Ortorrómbica	0.06	1.27
SnS <sub>2</sub>	Tetragonal	0.07	1.86
Sn <sub>3</sub> S <sub>7</sub>	Monocíclica	0.27	0
SnS	Cúbica	0.28	0.17
Sn <sub>3</sub> S	Cúbica	0.32	0

*Tabla 2. Características cristalográficas del sulfuro de estaño[16].*

Otro aspecto importante al estudiar materiales para su aplicación en celdas solares son las propiedades optoelectrónicas. El SnS es un material con parámetros representativos deseables para su aplicación como material absorbedor en una celda solar de heterounión, las variaciones en estos parámetros dependen del método de depósito, la reacción utilizada para la obtención del material y las condiciones del ambiente en el que se realiza la

síntesis. A lo largo de los últimos años, el SnS se ha utilizado en una numerosa cantidad de dispositivos fotovoltaicos como material absorbedor.

En la tabla 3 se muestran algunos valores representativos de los parámetros de interés que se han reportado en la literatura sobre este tipo de tecnología en su aplicación en celda solares.

Propiedades del material	SnS
Espesor (nm)	1000
Band gap (eV)	1.4
Afinidad electrónica (eV)	4
Permitividad dieléctrica (relativo)	13
CB densidad efectiva de estados ( $\text{cm}^{-3}$ )	$1.18 \times 10^{18}$
VB densidad efectiva de estados ( $\text{cm}^{-3}$ )	$4.76 \times 10^{18}$
Velocidad térmica de los electrones (cm/s)	$1 \times 10^7$
Velocidad térmica de los huecos (cm/s)	$1 \times 10^7$
Movilidad de los electrones ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )	30
Movilidad de huecos ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )	90
Concentración de donores ND ( $\text{cm}^{-3}$ )	0
Concentración de aceptores NA ( $\text{cm}^{-3}$ )	$1 \times 10^{15}$
Coefficiente de recombinación radiativa ( $\text{cm}^3/\text{s}$ )	$1 \times 10^{-12}$
Densidad de defectos en el volumen ( $\text{cm}^{-3}$ )	$1 \times 10^{17}$

*Tabla 3. Parámetros representativos del SnS.[3]*

Principalmente con respecto a las propiedades ópticas es importante resaltar el ancho de banda prohibida de los compuestos que constituyen principalmente la celda solar a estudiar y el coeficiente de absorción de estos materiales. Particularmente para el caso del SnS, su ancho de banda prohibida de alrededor de 1.2 eV y 1.3 eV [13], lo coloca entre los valores más altos de eficiencia teórica según el límite de Shockley-Queisser[14]. Además, el SnS posee un valor de coeficiente de absorción de  $10^4 \text{ cm}^{-1}$ , el cual es mayor al que presentan otros absorbedores atractivos para películas delgadas como el CdTe y CIGS[17].

### 2.1.2 Propiedades físicas del CdS.

El sulfuro de cadmio pertenece al grupo de semiconductores II-VI, el cual es común ver que sea utilizado en la optoelectrónica. Este semiconductor es un material tipo-n intrínseco, con propiedades físicas atractivas para su aplicación como material ventana en celdas solares[18]. Una de las propiedades atractivas del CdS para su aplicación como un material ventana es que presenta un band gap directo de alrededor de 2.42 eV[18][19] y transmitancias de alrededor del 70-80% a partir de los 500nm[20].

Al ser sintetizado el sulfuro de cadmio presenta dos tipos de estructuras cristalina, cúbica y Hexagonal[19]. En términos de morfología cristalina, la red cristalina cúbica presentada por el CdS también conocida como la fase Zinc blenda, en ocasiones presenta una estructura tetraédrica y pertenece a los sistemas de tipo *equiadex* con una estructura facial. En la figura 4 se muestra la estructura hexagonal que presentan las redes cristalinas de CdS las cuales son mejor conocidas como fase wurzita.

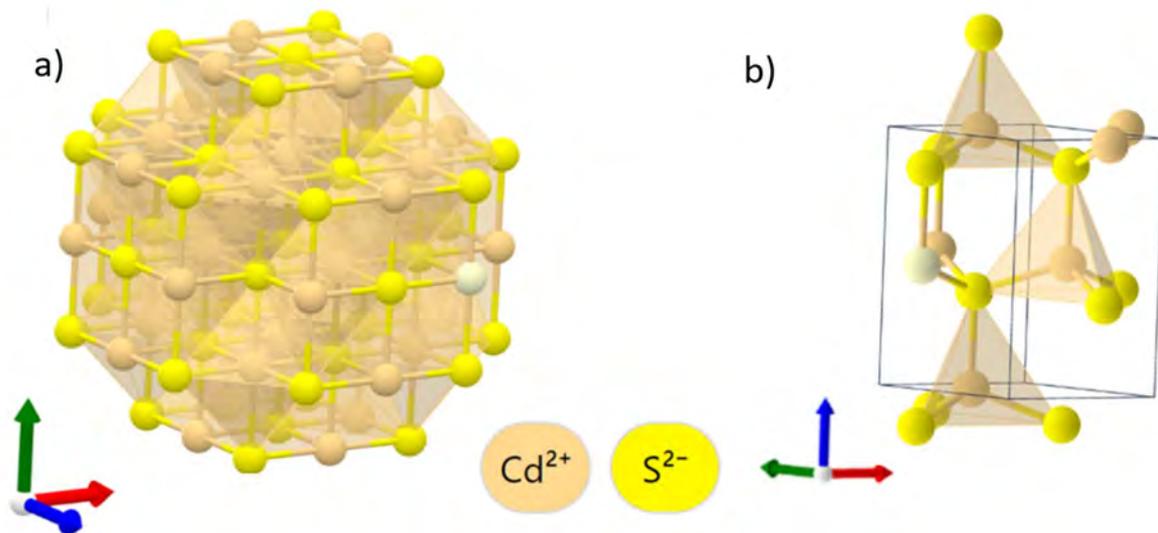


Figura 4. a) Estructura cristalina cúbica b) Estructura cristalina hexagonal, donde las esferas color naranja representan los átomos de cadmio y las esferas de color amarillo representan los átomos de azufre[21].

La variación en la estabilidad de estas redes cristalinas cúbica y hexagonal con la temperatura es distinta, lo cual es un factor importante al momento de elegir el CdS como un constituyente de un dispositivo que trabajará bajo un estrés térmico[22], [23][24][25].

Para la implementación del CdS como material ventana en dispositivos fotovoltaicos se ha realizado gran cantidad de investigación, a lo que en la literatura se reportan algunas de las propiedades más relevantes para análisis. En la tabla 4 se muestran los valores representativos de los parámetros de interés del CdS. Entre estas propiedades destacan el ancho de banda prohibida (band gap) de 2.42 eV, la afinidad electrónica de 4.5 eV y la permitividad dieléctrica de 9.4 eV.

Propiedades del material	CdS
Espesor (nm)	100
Band gap (eV)	2.42
Afinidad electrónica (eV)	4.5
Permitividad dieléctrica (relativo)	9.4
CB densidad efectiva de estados (cm <sup>-3</sup> )	2.2 x10 <sup>18</sup>
VB densidad efectiva de estados (cm <sup>-3</sup> )	1.8 x10 <sup>19</sup>
Velocidad térmica de los electrones (cm/s)	1x10 <sup>17</sup>
Velocidad térmica de los huecos (cm/s)	1 x10 <sup>17</sup>
Movilidad de los electrones (cm <sup>2</sup> /Vs)	100
Movilidad de huecos (cm <sup>2</sup> /Vs)	50
Concentración de donores ND (cm <sup>-3</sup> )	6 x10 <sup>16</sup>
Concentración de aceptores NA (cm <sup>-3</sup> )	0

*Tabla 4. Parámetros representativos o típicos a temperatura ambiente de las propiedades físicas del Sulfuro de Cadmio[26][27][28][29].*

Ciertamente existen atributos que hacen al CdS atractivo para su uso como material ventana en dispositivos fotovoltaicos, y debido a esto ha sido ampliamente estudiado y desarrollado en este tipo de tecnologías. El CdS presenta valores de transmitancia de entre el 70% y el 90% dependiendo de las características y la pureza de las películas, a partir de los 500 nm[30].

En la figura 5 se muestran las curvas de los valores de transmitancia con respecto de la longitud de onda analizada de diferentes películas de CdS. La transmitancia de las películas de CdS dependen del tratamiento térmico dado[31]. Se ha reportado que otra vía para mejorar la transmitancia de una película de CdS es mediante el dopaje con un metal[32]. En la figura de puede apreciar que dependiendo del tratamiento que se les dé a las películas de CdS, su transmitancia puede alcanzar hasta un 60% para longitudes de onda menores a los 600nm.

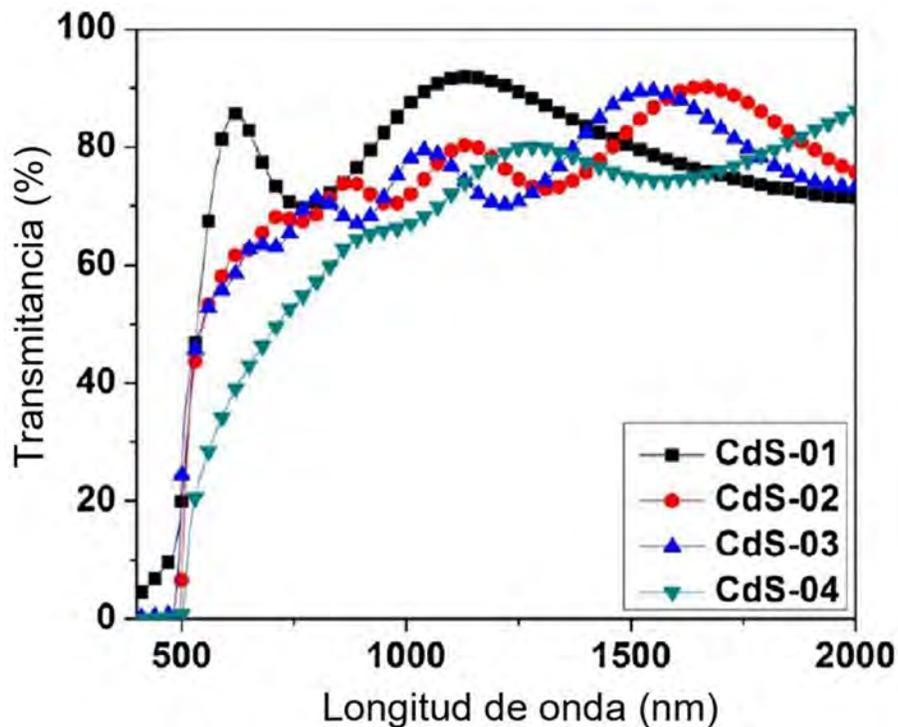


Figura 5. Transmitancia medida en películas de Sulfuro de Cadmio con distinto tratamiento térmico[18][30].

Por otro lado, el CdS presenta una absorción antes de los 500 nm donde su transmitancia no es la ideal para un material ventana en una celda solar de

heterounión, la cual es considerada *parásita* debido a que esta absorción no contribuye a la generación de corriente eléctrica[18]. Autores reportan pérdidas de densidad de corriente de  $2.31 \text{ mA/cm}^2$  debido a estas absorciones parásitas en dispositivos fotovoltaicos del tipo SnS/CdS bajo iluminación de luz solar sobre la corteza terrestre[18]. La mayor parte de esta absorción del CdS se propicia alrededor de los 380 nm y los 500 nm de la longitud de onda del espectro electromagnético, longitudes de onda que corresponden a la luz visible del azul (desde las mayores longitudes del ultravioleta hasta entrando a las regiones comprendidas por el verde). En la figura 6 se observan las contribuciones y pérdidas debido a la absorción de cada una de las películas de una celda solar de película delgada del tipo SnS/CdS.

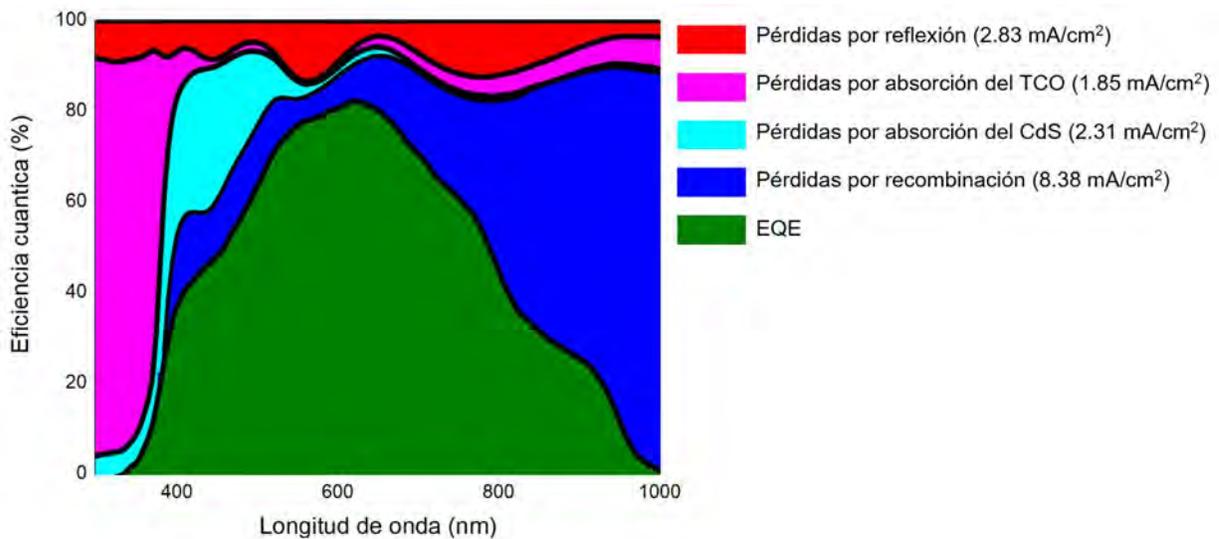


Figura 6. Gráfica descriptiva de la absorción de cada una de las películas de una celda solar, y la pérdida de densidad de corriente asociada a ellas en tecnología del tipo SnS/CdS[18].

Los materiales utilizados como material ventana en una celda solar de película delgada requieren algunos atributos para tener el mínimo de pérdidas de corriente, entre estos atributos destacan la alta transparencia, baja resistividad y un coeficiente de absorción menor a  $10^5 \text{ cm}^{-1}$ [33][34][15][16]. En el caso del Sulfuro de Cadmio, autores han reportado lograr películas con resistividades del orden de

$10^6 \Omega \cdot \text{cm}$  [30]. En la figura 7 se muestra el comportamiento de la resistividad y la movilidad de portadores de carga en películas delgadas de CdS. Se observa que para valores de espesor de alrededor de 250nm, la movilidad es a lo mucho de  $5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ .

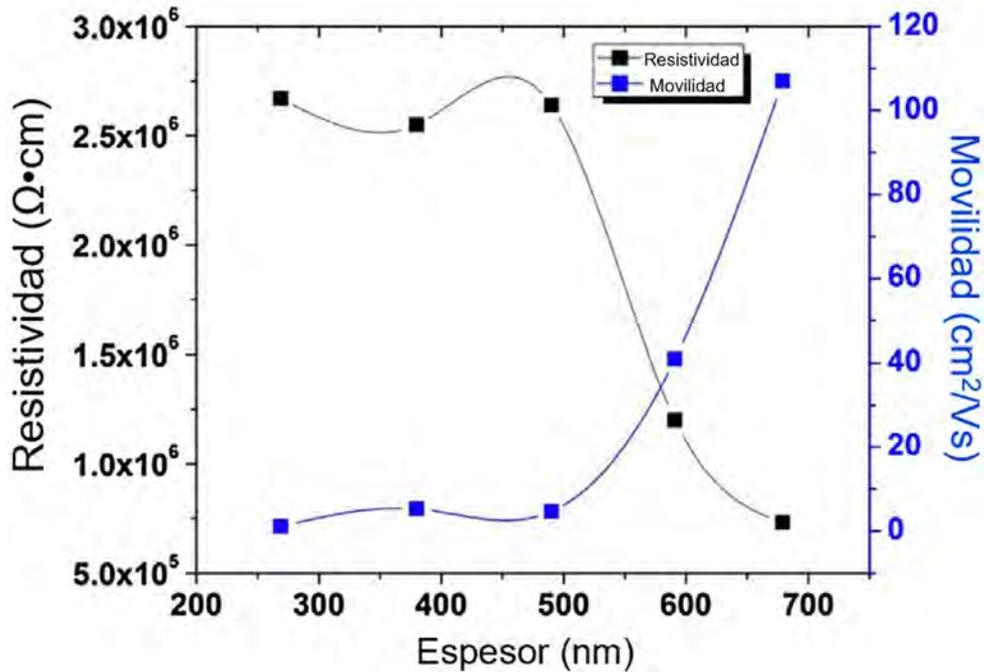


Figura 7. Resistividad y Movilidad de portadores de carga en películas de CdS[30].

La unión p-n creada entre el sulfuro de estaño y el sulfuro de cadmio se ha reportado con valores de defectos en esta intercara del orden de  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ [18]. Estos defectos son debidos al desacople reticular de las estructuras cristalinas propiciado por las variaciones de las constantes de red entre los materiales. Además, en la unión de los materiales tipo-p y tipo-n, de manera ideal en ocasiones se considera que existe una barrera discreta, la cual sirve para una primera aproximación del análisis del sistema, pero en esta región existe una difusión entre estos materiales. Esta difusión entre los materiales es tomada en cuenta en la densidad de defectos en la intercara.

### 2.1.3 Propiedades físicas del ternario $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ .

El Sulfuro de Cadmio-Zinc ( $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ ) es un material semiconductor perteneciente al grupo II-VI. Este material ternario está compuesto de elementos que comparten propiedades similares entre sí, entre estas propiedades similares se encuentran los electrones de valencia. Debido a que los elementos comparten similares propiedades es posible obtener distintas configuraciones o estequiometrías para la composición del material ternario. El ancho de banda prohibida puede ser configurado mediante la concentración de cadmio y zinc en el material. En la figura 8 se muestra la estructura cúbica, y la estructura tetragonal presentadas por el  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ .

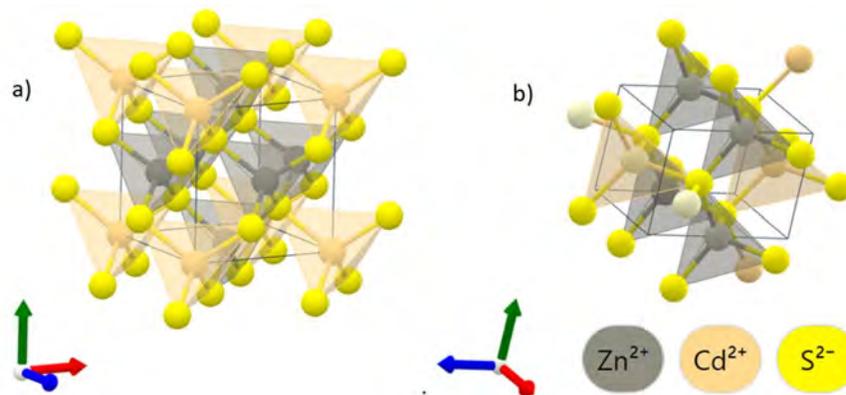


Figura 8. Estructuras Cristalinas del  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ [35].

Las propiedades electrónicas del  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$  se han reportado que se encuentran entre las propiedades de los materiales en sus extremos, es decir, entre las reportadas para el CdS ( $x=0$ ) y el ZnS ( $x=1$ ). En la tabla 5 se muestran los valores que presentan las propiedades electrónicas del ternario  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$  al ser sintetizado en distintas concentraciones.

Propiedades del material	Cd <sub>1-x</sub> Zn <sub>x</sub> S		
	De (x=0)	Hasta (x=1)	Referencias
Espesor (nm)	50	120	[36][37]
Band gap (eV)	2.42	3.7	[36][37][38]
Afinidad electrónica (eV)	4.5	3.8	[36]
Permitividad dieléctrica (relativa)	9.4	9.3	[36]
CB densidad efectiva de estados (cm <sup>-3</sup> )	2.2 x10 <sup>18</sup>	1.3 x10 <sup>18</sup>	[36]
VB densidad efectiva de estados (cm <sup>-3</sup> )	1.8 x10 <sup>19</sup>	1.7 x10 <sup>19</sup>	[36]
Movilidad de los electrones (cm <sup>2</sup> /Vs)	100	50	[36]
Movilidad de huecos (cm <sup>2</sup> /Vs)	50	20	[36]
Concentración de donores ND (cm <sup>-3</sup> )	10 <sup>17</sup>	10 <sup>15</sup>	[36]
Concentración de aceptores NA (cm <sup>-3</sup> )	0	0	[36]

*Tabla 5. Intervalos posibles para los parámetros optoelectrónicos de las películas del Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S que han sido utilizadas como material ventana en celdas solares..*

En diversos trabajos se ha reportado la formación de fases hexagonales y cúbicas en la síntesis del ternario Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>S[39]. Para distintas estequiometrías se han reportado crecimientos de constantes de red que van de los 2.58 Å a los 2.79 Å en las constantes de red cúbicas al incorporar Zn en las redes cristalinas del CdS[40].

Para este trabajo se utilizará el modelado de las celdas solares con el material ternario Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S como material ventana a diferentes concentraciones (x) obtenidas de la literatura. Los parámetros de las concentraciones utilizadas en el modelado son presentados en la tabla 6. En esta tabla se puede observar la dependencia de cada una de estas propiedades con respecto de la concentración del material, teniendo en los extremos los valores en los parámetros para el CdS y el ZnS.

Parámetro	X=0	X=0.05	X=0.08	X=0.1	X=0.2	X=0.3	X=0.5	X=0.6	X=0.8	X=1
Band gap (eV)	2.42	2.48	2.5	2.55	2.58	2.64	2.7	3.07	3.33	3.5
Afinidad electrónica (eV)	4.5	4.47	4.46	4.44	4.38	4.32	4.26	4.14	4.02	3.8
Permitividad dieléctrica (relativo)	9.4	9.3	9.3	9.3	9.3	9.3	9.3	9.3	9.3	9.3
CB densidad efectiva de estados (cm <sup>-3</sup> )	2.2x10 <sup>18</sup>	2.1x10 <sup>18</sup>	1.3x10 <sup>18</sup>							
VB densidad efectiva de estados (cm <sup>-3</sup> )	1.7x10 <sup>19</sup>	1.8x10 <sup>19</sup>								
Movilidad de los electrones (cm <sup>2</sup> /Vs)	100	100	100	95	85	75	70	65	55	50
Movilidad de huecos (cm <sup>2</sup> /Vs)	50	40	40	35	30	25	20	15	10	20
Concentración de donores ND (cm <sup>-3</sup> )	10 <sup>17</sup>	3x10 <sup>16</sup>	2.5x10 <sup>16</sup>	2.5x10 <sup>16</sup>	1.7x10 <sup>16</sup>	1.6x10 <sup>16</sup>	4.1x10 <sup>15</sup>	2.5x10 <sup>15</sup>	1.7x10 <sup>15</sup>	1x10 <sup>15</sup>
Concentración de aceptores NA (cm <sup>-3</sup> )	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabla 6. Parámetros representativos de diferentes concentraciones del ternario Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>S[36][8][41][41]–[45][46], [47].

## 2.2 Aplicaciones en celdas solares.

Entre los aspectos más importantes en la fabricación y el desarrollo de celdas solares eficientes se encuentra la elección adecuada de material absorbedor y material ventana. Debido a esto es importante elegir materiales los cuales presenten propiedades físicas compatibles tales como las propiedades estructurales y las propiedades ópticas buscando así el mínimo valor de densidades de defectos. Una propuesta atractiva es la celda solar SnS/CdS, la cual es de interés para el presente trabajo[13], [48]. Actualmente este tipo de tecnologías solo han alcanzado valores ligeramente por encima del 4% de eficiencia de conversión, por lo cual es de importancia el desarrollo de estos dispositivos fotovoltaicos ya que la brecha entre las eficiencias logradas y la eficiencia de conversión teórica son de más del 25% según el límite de Shockley-Queisser[13], [14], [18], [48]. Autores reportan que uno de los aspectos importantes para el desarrollo de este tipo de celdas solares es la síntesis de películas de calidad de estos materiales y la reducción de pérdidas de densidad de corriente por las absorciones parásitas del sulfuro de cadmio[49].

Los métodos más comunes para el desarrollo y la síntesis de monocristales de sulfuro de estaño (II) (SnS) son la técnica de transporte de vapor químico o CVT por sus siglas en inglés (Chemical Vapor Transport) y el método de Bridgman-Stockbarger. Para lograr la síntesis de monocristales de alta calidad se debe considerar el equilibrio termodinámico, así como la tasa de crecimiento de la red cristalina. Esto debido a que un crecimiento lento de la red propicia la alta pureza en ella o bien las altas tasas de crecimiento dan lugar a altos niveles de defectos en la red cristalina y a su vez en el volumen del material.

El crecimiento de las redes cristalinas en la síntesis de monocristales ocurre en el equilibrio, sin embargo, puede tomar varios días que los cristales en la red alcancen esta condición. Una vez crecido el monocristal del material, puede ser utilizado para preparar compuestos de una o varias capas o películas de SnS mediante de fases mecánicas o líquidas de exfoliación.

Además, el sulfuro de estaño (II) ha sido sintetizado con éxito mediante el uso de la técnica “depósito de vapor químico asistido por aerosol” o AACVD por su nombre en inglés (aerosol-assisted chemical vapour deposition). En este tipo de método de síntesis de materiales autores han desarrollado precursores moleculares simétricos y antisimétricos tales como:  $\text{Sn}(\text{C}_4\text{H}_9)_2(\text{S}_2\text{CN}(\text{C}_2\text{H}_5)_2)_2$ ,  $\text{Sn}(\text{C}_4\text{H}_9)_2(\text{S}_2\text{CN}(\text{CH}_3)(\text{C}_4\text{H}_9)_2)$  y  $\text{Sn}(\text{C}_4\text{H}_9)_2(\text{S}_2\text{CN}(\text{C}_4\text{H}_9)_2)_2$  [49]. Dependiendo del tipo de precursor utilizado y de la temperatura de depósito las propiedades de la película de SnS se ven afectadas. Entre algunas de las propiedades afectadas se encuentra el color que dependiendo del precursor molecular se puede tornar de color amarillo-café, negro oscuro o negro-café respectivamente. En la tabla 7 de muestran algunas propiedades variantes ante el uso de distintos precursores moleculares en la síntesis del SnS como la concentración de portadores de carga, la resistividad de la película y la movilidad.

Precursor	Temperatura de depósito (°C)	Concentración de portadores, $p$ ( $\times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ )	Resistividad, $\rho$ ( $\Omega \text{cm}$ )	Movilidad, $\mu$ ( $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ )
1	500	$4.13 \times 10^{17}$	10.8	1.4
2	530	$3.60 \times 10^{18}$	1.58	1.1
3	450	$8.64 \times 10^{18}$	0.83	0.87

Tabla 7. Propiedades eléctricas de sulfuro de estaño sintetizadas mediante los precursores; (1)  $\text{Sn}(\text{C}_4\text{H}_9)_2(\text{S}_2\text{CN}(\text{C}_2\text{H}_5)_2)_2$ , (2)  $\text{Sn}(\text{C}_4\text{H}_9)_2(\text{S}_2\text{CN}(\text{CH}_3)(\text{C}_4\text{H}_9)_2)$  y (3)  $\text{Sn}(\text{C}_4\text{H}_9)_2(\text{S}_2\text{CN}(\text{C}_4\text{H}_9)_2)_2$ [49].

Otros autores han reportado la síntesis del SnS mediante el uso del método de síntesis de materiales “depósito de vapor químico a presión atmosférica” o conocida por la sigla de su nombre en inglés APCVD (atmospheric pressure chemical vapour deposition) sobre substratos de vidrio mediante la reacción del estaño (IV), cloruro y sulfuro de hidrogeno ( $\text{H}_2\text{S}$ )[49].

Las películas delgadas de SnS han sido sintetizadas mediante diversos métodos de depósito de materiales, entre los cuales destacan la evaporación térmica y la técnica de síntesis llamada *sputtering* [50][51][52], [53]. Las películas de sulfuro de estaño (SnS) depositadas mediante el método de evaporación térmica han sido reproducidas en espesores considerados como “*ultra thin films*” los cuales están alrededor de los 20-65 nm libres de “*pin holes*”, con superficies consideradas suaves, y con una fuerte adherencia a la superficie del sustrato[51]. En estas películas de sulfuro de estaño predomina la fase SnS con solo una pequeña cantidad de la fase Sn<sub>2</sub>S<sub>3</sub> encontrada en la red del material[51]. En la tabla 8 se presentan las propiedades de las películas de SnS sintetizadas mediante evaporación térmica donde E<sub>dir</sub> es el ancho de banda prohibida. El autor reporta que estos altos valores para el ancho de banda prohibida son debidos a las fases formadas en el crecimiento del material[51].

Espesor (nm)	E <sub>dir</sub> (eV)	Picos del espectro del Raman (cm <sup>-1</sup> )
20	2.15	Ningún pico
40	2.28	154.9, 181.9, 219.7, 286.7
65	2.28	181.5, 219.7, 285.6

Tabla 8. Propiedades ópticas del SnS sintetizado por evaporación térmica[51].

Por otro lado, para las películas de sulfuro de estaño depositadas mediante el método de síntesis de “*sputtering*” se han reportado valores de ancho de banda prohibido desde 1.03 eV hasta 1.55 eV[53]. Estos valores para el “*band gap*” reportados pueden ser directos o indirectos. El coeficiente de absorción en las películas obtenidas por medio de *sputtering* llega hasta poco por debajo de 10<sup>6</sup> cm<sup>-1</sup>. De manera específica, en la figura 9 se muestran los distintos comportamientos del coeficiente de absorción para las películas delgadas de sulfuro de estaño obtenidas mediante *sputtering*. En esta figura se puede observar el comportamiento del coeficiente de absorción en la región de la luz visible del espectro electromagnético. Se reportó el valor del coeficiente de absorción de

estas películas en la región visible del espectro electromagnético desde  $5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$  y hasta los  $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ .

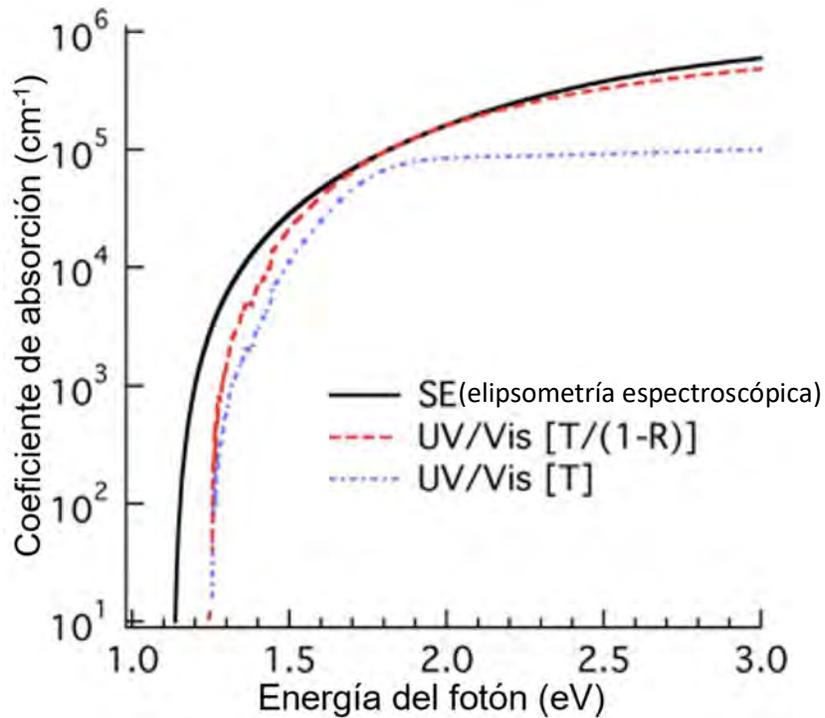


Figura 9. Coeficiente de absorción obtenido del análisis de las películas delgadas de SnS sintetizadas por medio de "sputtering"[53].

Estos valores de coeficiente de absorción son deseables para un material absorbedor en una celda solar, además el autor en su reporte menciona que para espesores mayores de 100nm los valores de este coeficiente pueden variar[53]. Esta absorción comienza en los 1.1 eV- 1.3 eV y llega a valores importantes hasta tener un comportamiento relativo constante en los 1.6 eV. Haciendo de lado las películas con ancho de banda prohibida indirecto, las películas delgadas sintetizadas por este método son prometedoras para su uso en dispositivos fotovoltaicos.

El SnS es considerado un *"the most promising alternative"* debido a sus propiedades físicas, especialmente a que por su ancho de banda prohibida se estima que su eficiencia de conversión puede llegar a superar el 30%[14]. Esta eficiencia teórica corresponde a un dispositivo de 1.3 eV de ancho de banda prohibida el cual produzca una densidad de corriente de 35.82 mA/cm<sup>2</sup>, voltaje de

circuito abierto de 1.028 V y un factor de forma de 88.5 %, los cuales son los valores máximos buscados en los dispositivos fotovoltaicos con este tipo de tecnología[14].

Otro factor importante en el desarrollo de celdas solares además de contar con un material absorbedor con propiedades adecuadas para su uso en este tipo de dispositivos, es necesario tener un material ventana con buena transmitancia o bajo coeficiente de absorción en la región visible del espectro electromagnético, lo cual se logra a través de un alto valor para el ancho de banda prohibida ( $>2.4$  eV). Además, este material ventana se busca que se pueda sintetizar por métodos sencillos para su reproducibilidad, y que la unión entre este material y el absorbedor presenten una baja densidad de defectos ( $<10^{11}\text{cm}^{-2}$ ).

En los últimos años se ha estudiado ampliamente el uso del CdS como material ventana, se ha implementado en celdas solares basadas en CdTe,  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ , CIGS, SnSe y SnS[18][54][55]. En la implementación de esta tecnología como material ventana para las celdas solares de películas delgadas se han tenido casos de éxito en los cuales se ha logrado una producción de celdas solares con eficiencia de conversión mayores a 20%[56][57].

Para la síntesis del Sulfuro de Cadmio hay una gran posibilidad en cuanto a los métodos por los cuales puede ser sintetizado. Dentro de los métodos de síntesis para este material destacan la técnica de evaporización al vacío térmico o PVD, la técnica de electro depósito, la técnica de baño químico o CBD por las siglas de su nombre en inglés (Chemical Bath Deposition), la técnica de rocío pirolítico, el depósito por vapores químicos y el rocío ultrasónico pirolítico o USP por las siglas de su nombre en inglés (Ultrasonic Spray Pyrolysis) [58]–[65].

Por otra parte se ha reportado que el CdS presenta absorciones parásitas en regiones entre 350 nm y 500 nm, lo cual conlleva a una disminución en esa región de la eficiencia cuántica de la celda[18]. Esto último, es una limitante para el uso de este compuesto como material ventana. Entre las posibles propuestas por la comunidad científica se encuentra la sustitución del CdS por el ternario  $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$  mediante el cual se aumente el ancho de banda prohibida y a su vez reduzca la

absorción parásita del CdS. Se ha reportado esta sustitución en celdas solares de SnS/CdS y  $Sb_2(Se_{1-x}S_x)_3/CdS$  donde se han presentado mayores valores de eficiencia de conversión[66][67][68].

En celdas solares donde se ha utilizado el SnS se han logrado eficiencias de hasta 4.63%[69]. En esta celda solar reportada se utilizó una estructura con ZnO,ZnS con buffer de óxido de zinc, o bien, Mo/SnS/SnO<sub>2</sub>/Zn(O,S)/ZnO/ITO. El autor reporta haber llegado a estos valores de eficiencia a partir de obtener valores de la densidad de corriente de corto circuito por encima de 22.6 mA/cm<sup>2</sup> y de voltaje de circuito abierto de 390 mV con un factor de forma de la curva J-V del 53%.

Otras celdas solares han superado estos valores de eficiencia utilizando el SnS en la estructura de la celda solar, pero no como absorbedor. El autor en 2013 logró una eficiencia de 6.56% en una celda solar con nano hojuelas de SnS en la celda solar. En esta celda solar el SnS actuó como contra electrodo o electrodo de contraste en una celda solar fotoelectroquímica[70].

El Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S se ha utilizado en celdas solares del tipo CdTe/CdS como alternativa al CdS como material ventana, permitiendo que los fotones penetren hasta el absorbedor de la celda y así estos puedan ser captados, y contribuir en la generación de pares electrón-hueco. El zinc se añade al material ventana para ajustar el ancho de banda prohibida y así poder hacer ingeniería de bandas, lo que mejora la eficiencia de conversión de la celda solar. Algunos de las mejoras observadas en las celdas solares donde se utilizó el Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S son la mejora de la eficiencia de conversión, la reducción del costo de producción debido a evitar la necesidad del uso de ZnO y SnO<sub>x</sub> y se ha demostrado tener una mejor estabilidad en la eficiencia de conversión a largo plazo[71][72][73][74].

## 2.3 Parámetros utilizados en el desarrollo del modelado de la celda solar SnS/CdS.

Los principales parámetros utilizados en el desarrollo del modelo que se empleará para el modelado de la celda solar SnS/CdS fueron obtenidos de un reporte en la literatura el cual se buscó tuviese la mayor cantidad de información posible y así poder crear un modelo más preciso. Entre los parámetros reportados por el autor se encuentran los espesores de las películas que conforman la celda solar, sus características optoelectrónicas, la concentración de defectos en el volumen y en la intercara, así como la curva J-V y la eficiencia cuántica de la celda[18]. Estos parámetros se muestran en la tabla 9. En la figura 10 se muestra la curva J-V de la celda solar reportada, mientras que el gráfico que representa la eficiencia cuántica de ella en la región visible del espectro electromagnético se ilustra en la Figura 11.

Parámetros del material en la celda solar	SnS	CdS	ZnO-AZO	Al
Espesor (nm)	1200	45	470	~1000
Band gap (eV)	1.3	2.45	3.5-3.7	
Resistencia en serie (ohm cm <sup>2</sup> )			2.69	
Conductancia en paralelo (mS cm <sup>-2</sup> )			4.82	
Densidad de corriente de corto circuito (mA/cm <sup>2</sup> )			20.53	
Voltaje de circuito abierto (V)			0.346	
Factor de forma (%)			60.4	
Eficiencia de conversión(%)			4.3	

Tabla 9. Parámetros de las películas y la celda solar reportados por el autor en el trabajo experimental[18].

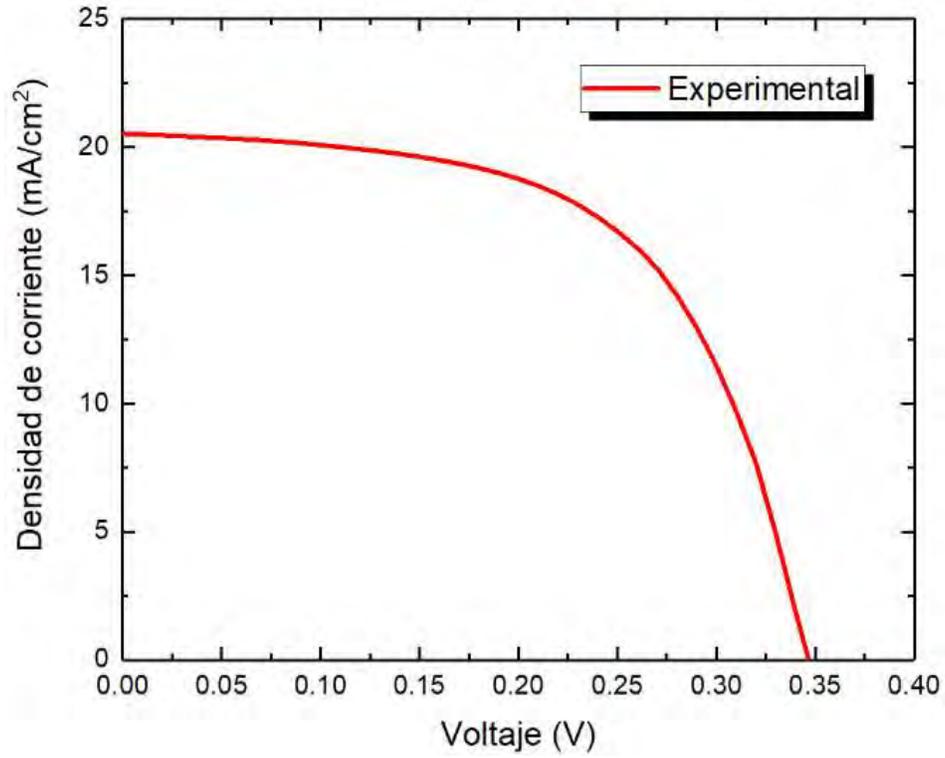


Figura 10. Curva J-V de la celda solar experimental[18].

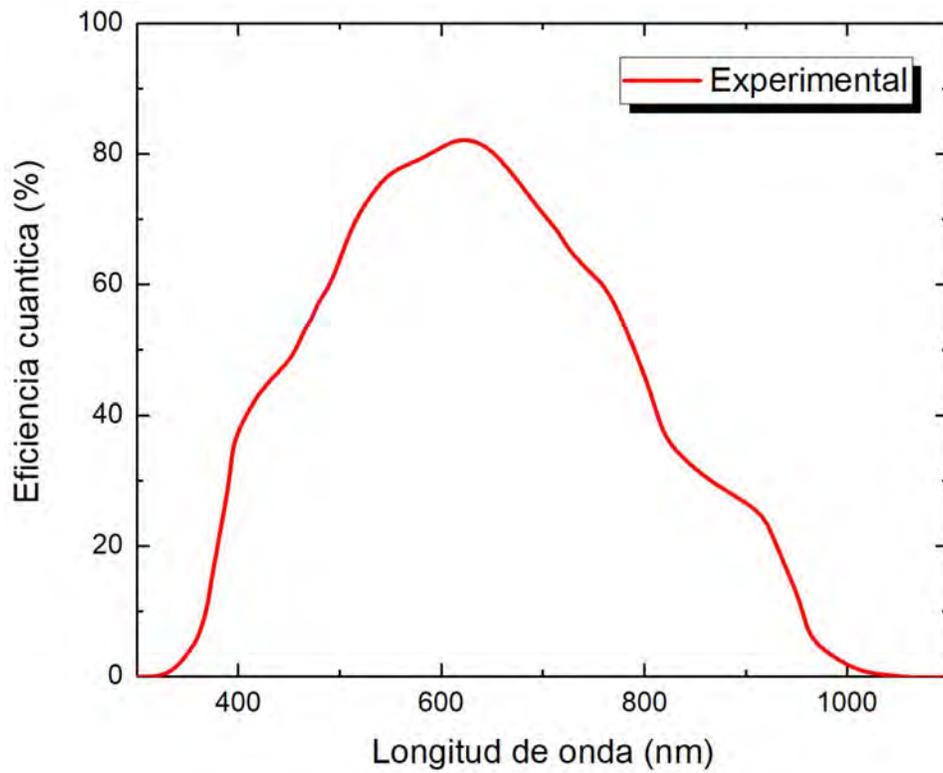


Figura 11. Eficiencia cuántica de la celda solar experimental[18].

Los parámetros adicionales que son necesarios para el modelado de la celda solar a los reportados por el autor del trabajo antes mencionado fueron recopilados de la literatura. No obstante, estos parámetros tienen que reproducir las características optoelectrónicas y eficiencia cuántica, tema que será abordado en el capítulo 5 mediante la discusión del primer paso de la investigación reportada en este trabajo.

## **3 Fundamentos teóricos de las celdas solares.**

---

En el presente capítulo se presentarán los parámetros más relevantes en el estudio de celdas solares y se describirá como es que estos parámetros impactan en cada una de las características optoelectrónicas de una celda solar. Además, se discutirán los fenómenos físicos que limitan las eficiencias de conversión de las celdas solares. Se detallan algunos conceptos importantes como el voltaje de circuito abierto, la densidad de corriente de corto circuito, el factor de forma, la eficiencia de conversión de la celda y los mecanismos de recombinación de los pares electrón-hueco, como es que puede afectar cada uno de estos mecanismos a las distintas características del dispositivo. Es decir, se mostrará como es que se estudia la potencialidad de una estructura para el dispositivo fotovoltaico bajo las condiciones ideales del límite radiativo, límite en el cual es posible obtener la mayor eficiencia de conversión en una celda solar para una misma estructura. Además, se describe el papel de los defectos en el absorbedor y su impacto en las características del dispositivo, es decir el caso no radiativo. Por último, se describe como es que se realiza el modelado de la celda solar para los parámetros de las distintas concentraciones del ternario.

### **3.1 Descripción teórica de las celdas solares.**

Una celda solar es un dispositivo semiconductor que genera un potencial eléctrico a partir de la incidencia de radiación solar mediante la generación de pares electrón-hueco, y como consecuencia de ello genera a su vez una corriente eléctrica. Una celda solar de película delgada está constituida por algunos elementos esenciales los cuales son una capa antirreflejante, un óxido conductor transparente (TCO), un material ventana tipo-n, un material absorbedor tipo-p y un

contacto metálico. Estos elementos se muestran en el diagrama esquemático de una celda solar presentado por la figura12.

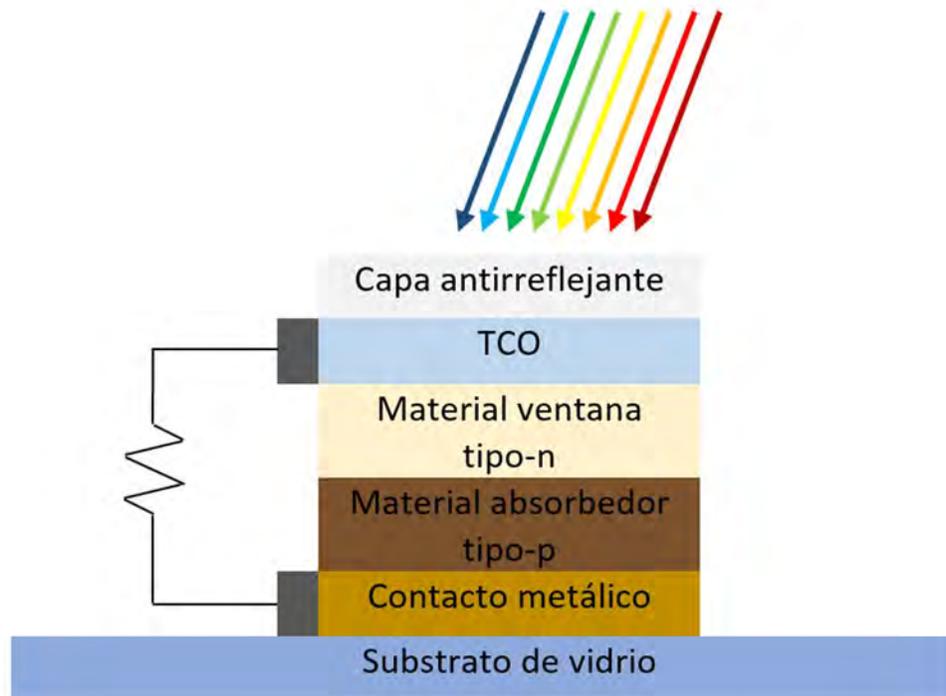


Figura 12. Diagrama esquemático de una celda solar de película delgada.

Para su análisis es necesario definir cada uno de los conceptos de los parámetros utilizados en la discusión de dicha generación de corriente-voltaje como lo son: el voltaje de circuito abierto, la densidad de corriente de corto circuito, el factor de forma, y la eficiencia de conversión. Estos elementos pueden ser descritos de manera clara y visual en una curva característica de una celda solar, la cual es similar a la curva de un diodo, esta curva se conoce como la característica  $J-V$  de la celda.

En la figura 13 se puede observar como la curva característica de un diodo se desplaza al ser iluminado, la nueva curva representa el comportamiento  $J$ - $V$  de la celda solar mientras la radiación solar incide sobre ella.

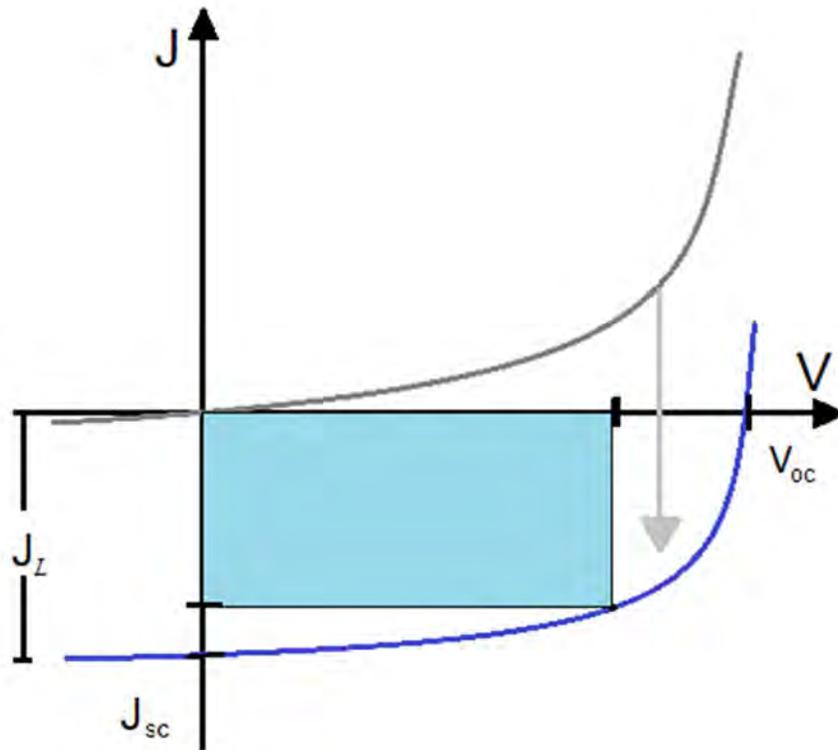


Figura 13. Curva característica de un diodo donde se muestra el cambio de su comportamiento al estar bajo iluminación.

Otra forma de presentarse la curva  $J$ - $V$  de la celda solar se puede observar en la figura 14 donde se muestran algunos elementos como la densidad de corriente ( $J_{mp}$ ) y el voltaje ( $V_{mp}$ ) en el punto máximo de potencia que puede entregar una celda solar, la densidad de corriente de corto circuito ( $J_{sc}$ ) y el voltaje de circuito abierto ( $V_{oc}$ ).

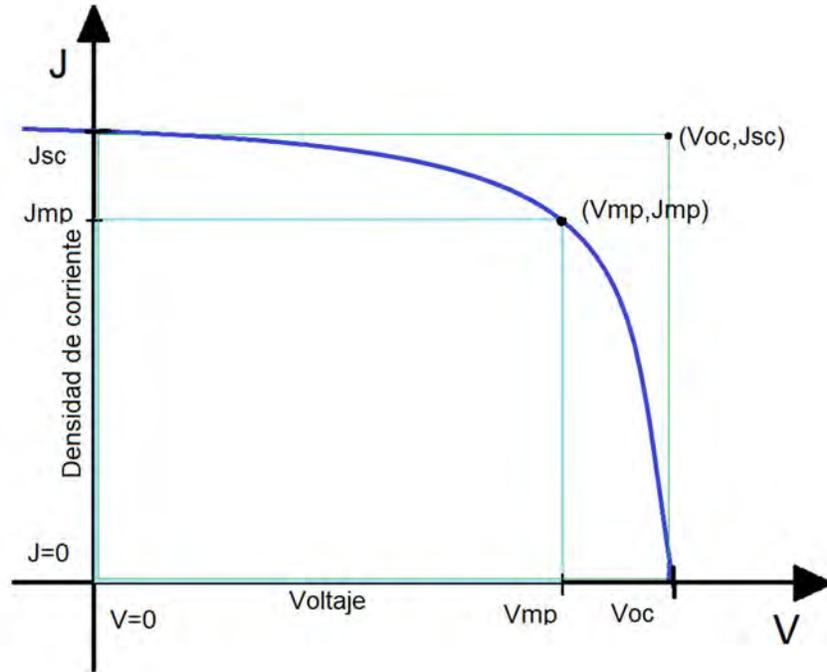


Figura 14. Curva característica J-V de una celda solar donde se presentan los elementos;  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ ,  $J_{mp}$  y  $V_{mp}$ .

Estos elementos ayudan en el análisis de la potencialidad mediante el cálculo del factor de forma y la eficiencia de conversión, características clave para la comparación y desarrollo de las celdas solares.

### 3.1.1 Densidad de corriente de corto circuito.

El análisis de la corriente en una celda solar se hace por medio de la densidad de corriente, la cual se refiere a la corriente que fluye a través de un área. Comúnmente en el estudio de este tipo de dispositivos el análisis de densidad de corriente se hace en unidades de amperes o miliamperes sobre centímetros cuadrados ( $A/cm^2$  o  $mA/cm^2$ ).

La densidad de corriente de corto circuito es la máxima corriente posible que puede ser entregada por la celda solar, esta densidad de corriente existe cuando

entre las terminales del dispositivo fotovoltaico existe una diferencia de potencial de 0 Volts. La densidad de corriente depende de algunos factores como la cantidad de radiación incidente y la eficiencia cuántica de la celda solar, es decir de la densidad de corriente que puede generar el dispositivo, y serán iguales estas dos densidades de corrientes en el caso de resistencias ideales en la celda solar. Además, a esta densidad de corriente generada se tiene que tomar a consideración la corriente que se recombina por medio del mecanismo radiativo y el no radiativo, es decir, podemos escribir esto como:

$$J = J_R - J_{Gen} \quad (3.1)$$

Donde  $J$  es la densidad de corriente total en la celda solar en cierto punto y  $J_R$  está dada por las corrientes de pérdidas por recombinaciones en el material absorbedor, es decir:

$$J_R = J_{RR} + J_{NR} \quad (3.2)$$

Siendo,  $J_{RR}$  la densidad de corriente disipada debido a la recombinación radiativa, mientras que  $J_{NR}$  es la densidad de corriente disipada por la recombinación no radiativa y  $J_{Gen}$  es la densidad de corriente generada por la celda. Esta última densidad de corriente en función del espesor del material puede ser descrita como es presentada a continuación:

$$J_{Gen} = q \int_0^{d_{abs}} G(x) dx \quad (3.3)$$

Donde  $q$  es la carga elemental,  $d_{abs}$  es el espesor del material absorbedor y  $G(x)$  es la función de generación de la celda solar. La función de generación puede ser descrita mediante la siguiente ecuación:

$$G(x) = (1 - S) \int_{\lambda_i}^{\lambda_f} (1 - r(\lambda)) f(\lambda) \alpha(\lambda) e^{-\alpha(\lambda)x} d\lambda \quad (3.4)$$

Donde  $s$  es el factor de sombreado de la malla conductora, en un caso de simulación este factor se puede despreciar, es decir, este factor se considera nulo ( $S = 0$ ). El termino  $r(\lambda)$  hace referencia a la reflectancia que en una simulación de igual forma se considera despreciable ( $r(\lambda) = 0$ ), y  $f(\lambda)$  es el flujo incidente de fotones en la celda solar. El termino  $\alpha(\lambda)$  se refiere al coeficiente de absorción del material absorbedor utilizado en la celda solar. Además, el término  $\lambda$  describe una longitud de onda que en estos casos se refiere a la longitud de onda de la radiación de interés incidente, para el estudio de celdas solares esta longitud de onda es considerada desde  $\lambda = 300 \text{ nm}$  hasta  $\lambda = 1300 \text{ nm}$  región la cual se refiere a la luz visible incidente sobre la corteza terrestre, la cual se describe con el modelo de espectro de radiación AM1.5 global. Tomando estas consideraciones y sustituyéndolas en la ecuación 3.4 se obtendrá:

$$G(x) = \int_{\lambda_i}^{\lambda_f} f(\lambda)\alpha(\lambda)e^{-\alpha(\lambda)x} d\lambda \quad (3.5)$$

Sustituyendo la función de generación en la ecuacion 3.3 resulta:

$$I_{Gen} = q \int_0^{d_{abs}} \int_{\lambda_i}^{\lambda_f} f(\lambda)\alpha(\lambda)e^{-\alpha(\lambda)x} d\lambda dx \quad (3.6)$$

O bien:

$$I_{Gen} = q \int_{\lambda_i}^{\lambda_f} \int_0^{d_{abs}} f(\lambda)\alpha(\lambda)e^{-\alpha(\lambda)x} dx d\lambda \quad (3.7)$$

Realizando la integral sobre el espesor del absorbedor se tendrá:

$$I_{Gen} = q \int_{\lambda_i}^{\lambda_f} f(\lambda)(1 - e^{-\alpha(\lambda)d_{abs}})d\lambda \quad (3.8)$$

Por otro lado, las densidades de corrientes  $J_{RR}$  y  $J_{NR}$  serán definidas en las siguientes secciones para su análisis particular. Para el caso de resistencias no ideales, la densidad de corriente de corto circuito se verá atenuada debido a la

presencia de capas resistivas a través del flujo en serie de la corriente y de las fugas de corrientes por bajas resistencias en paralelo.

### 3.1.2 Voltaje de circuito abierto.

El Voltaje de la celda solar  $V$  depende de la intensidad de radiación incidente, de los defectos en el material absorbedor, los defectos en la intercara del material absorbedor y el material ventana, entre otros parámetros más del material absorbedor. Este voltaje se puede medir en las terminales de la celda, y es el voltaje graficado en la característica J-V. En esta característica existe un voltaje en el punto donde no hay densidad de corriente (punto de circuito abierto), a este valor de voltaje se le conoce como voltaje de circuito abierto. De manera particular el voltaje de circuito abierto  $V_{oc}$  es el voltaje máximo que se puede obtener de una celda solar. Este voltaje depende principalmente de la densidad de corriente de saturación inversa o en obscuridad  $J_0$ , y a su vez esta corriente está ligada fundamentalmente a las recombinaciones en el material absorbedor. Una forma de analizar este voltaje se presenta mediante la siguiente ecuación:

$$V_{oc} = \frac{nkT}{q} \ln \left( \frac{J}{J_0} \right) + 1 \quad (3.9)$$

El voltaje de circuito abierto de una celda solar es la tensión máxima que se puede medir en los terminales de la celda cuando no hay carga conectada a ella. Es decir, es el voltaje máximo que la celda puede generar sin que fluya corriente a través de ella.

### 3.1.3 Factor de forma.

El factor de forma es un parámetro de la característica  $J$ - $V$  de una celda solar, el cual está asociado como lo dice su nombre a la forma de la curva, y además este parámetro cambia conforme la curva se acerca más o menos a la forma de un

rectángulo. Este factor es una razón de dos potencias, pero el análisis de las corrientes en celdas solares se hace en base a densidades de corriente por lo cual la potencia puede ser descrita como:

$$\frac{P}{A} = JV \quad (3.10)$$

Los términos involucrados en la razón que define al factor de forma son la densidad de corriente y el voltaje en el punto que se puede extraer una máxima potencia de la celda solar y la potencia teórica que resulta del producto de la densidad de corriente de corto circuito y el voltaje del circuito abierto. Se puede comprender mejor la definición de este concepto mediante la siguiente expresión:

$$FF = \frac{J_{mp}V_{mp}}{J_{sc}V_{oc}} \times 100 \quad (3.11)$$

Donde  $FF$  es el factor de forma,  $J_{mp}$  es la densidad de corriente en el punto de máxima potencia y  $V_{mp}$  es el voltaje en el punto de máxima potencia. Esta razón también se puede analizar como la razón de dos áreas, o cual es la porción de una de ellas sobre la otra. En la figura 14 se muestran estas áreas, donde el término  $J_{mp}V_{mp}$  se relaciona al área del rectángulo azul y  $J_{sc}V_{oc}$  se relaciona al área del rectángulo verde. Al ser  $J_{sc}$  y  $V_{oc}$  la densidad de corriente y el voltaje máximos que se pueden extraer de la celda, el área del rectángulo verde será mayor que el área del rectángulo azul, o bien, el factor de forma será un valor menor al 100%.

### 3.1.4 Eficiencia de conversión.

El término eficiencia de conversión hace referencia a la eficiencia con la que la celda solar convierte la energía solar en energía eléctrica. Este parámetro se define como una razón entre la potencia entregada por el dispositivo y la potencia debida a la radiación incidente en el mismo. La eficiencia de conversión ( $\eta$ ) es descrita mediante la siguiente ecuación:

$$\eta = \frac{J_{mp} V_{mp}}{P_i} \times 100 \quad (3.12)$$

Donde  $P_i$  es la potencia incidente sobre la superficie de la celda solar. Este punto de máxima potencia de la celda solar resulta poco práctico para el análisis de su potencialidad, por lo cual también se puede determinar la eficiencia de una celda como:

$$\eta = \frac{J_{sc} V_{oc}}{P_i} FF \quad (3.13)$$

## 3.2 Celdas solares bajo el límite radiativo

El término mecanismo de recombinación hace referencia a que en una celda solar bajo iluminación existen electrones que se encontraban en la banda de valencia y migraron debido a la excitación provocada por la incidencia de luz hacia la banda de conducción dejando atrás un hueco, ahora se recombinarán dichos electrones con estos huecos debido a distintas razones, las cuales son descritas como los distintos mecanismos de recombinación. El mecanismo de recombinación radiativo es un mecanismo mediante el cual un electrón que está en la banda de conducción libera energía recombinándose con un hueco en la banda de valencia liberando un fotón en el proceso. Los materiales de transmisiones directas entre

sus bandas son más eficientes bajo este mecanismo de recombinación debido a que en los materiales de transiciones indirectas es necesaria la interacción de un fonón en el proceso de recombinación. El límite radiativo de una celda solar muestra la máxima eficiencia posible bajo solo la contribución de este mecanismo de recombinación. El estudio de las celdas solares bajo el límite radiativo es un aspecto importante a revisar debido a que ayuda a tomar decisiones acerca sobre si asumir tiempos y gastos que se invertirán o no en el desarrollo experimental de algunos tipos de celdas solares revisando la potencialidad de las mismas.

El análisis de las celdas solares bajo el límite radiativo parte de la suposición de que en la celda no existen defectos en el material absorbedor o en la intercara del material absorbedor y el material ventana que propicien la recombinación de los electrones en la banda de conducción por otros mecanismos. Este supuesto permite un panorama donde se garantiza que las recombinaciones de electrones solo se llevaran a cabo mediante el mecanismo de recombinación radiativa.

La cantidad de corriente de electrones que son recombinados depende de varios factores como lo son: la razón de recombinación radiativa y el espesor del material. A su vez la razón de recombinación radiativa es definida mediante el coeficiente de recombinación radiativa, la concentración intrínseca de portadores y la concentración de electrones y huecos fuera del equilibrio. La densidad de corriente asociada a la recombinación radiativa puede ser expresada mediante la siguiente ecuación:

$$I_{Rad} = q \int_0^{d_{abs}} R_{Rad} dx \quad (3.14)$$

Donde  $R_{Rad}$  es la razón de recombinación radiativa. Esta razón puede ser descrita mediante la siguiente expresión:

$$R_{Rad} = B(pn - n_i^2) \quad (3.15)$$

Sustituyendo la ecuación 3.15 en la ecuación 3.14 se obtiene:

$$J_{Rad} = q \int_0^{d_{abs}} B(pn - n_i^2) dx \quad (3.16)$$

además, el producto  $pn$  puede ser expresado como:

$$pn = n_i^2 e^{\frac{qV}{kT}} \quad (3.17)$$

Por lo que la corriente recombinada por medio del mecanismo radiativo puede ser expresado de la siguiente forma:

$$J_{Rad} = q \int_0^{d_{abs}} Bn_i^2 (e^{\frac{qV}{kT}} - 1) dx \quad (3.18)$$

O bien:

$$J_{Rad} = qBn_i^2 \left( e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) d_{abs} \quad (3.19)$$

Donde el término  $J_{0Rad} = qBn_i^2 d_{abs}$ , por lo que:

$$J_{Rad} = J_{0Rad} (e^{\frac{qV}{kT}} - 1) \quad (3.20)$$

Teniendo en cuenta esto y las ecuaciones 3.1, 3.2 y 3.8 es posible describir la densidad de corriente en una celda solar bajo el límite radiativo mediante la expresión:

$$J = J_{0Rad} \left( e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) - q \int_{\lambda_i}^{\lambda_f} f(\lambda) (1 - e^{-\alpha(\lambda)d_{abs}}) d\lambda \quad (3.21)$$

Es importante tener presente al realizar este análisis que el comportamiento de esta densidad de corriente así como la potencialidad o eficiencia de conversión de la celda solar estudiada no rebase los límites establecidos por la teoría de Shockley-Queisser [14], [75].

### 3.3 Celdas solares bajo el límite no radiativo.

El estudio teórico de las celdas solares, así como otras de las áreas de la física aplicada presentan un límite teórico el cual en circunstancias ideales o utópicas serían las situaciones predominantes. No obstante, la realidad es que en las diferentes disciplinas de la física y en la investigación en general se presentan atenuantes los cuales perjudican los resultados o valores previstos en la situación idealizada. En el caso del estudio teórico de celdas solares de películas delgadas constituidas por heterouniones, existen tres principales problemas que afectan la situación ideal de la celda, los defectos en el volumen del material, los defectos en la intercara del material absorbedor y el material tipo-n, la resistencia en serie y las fugas de corriente consideradas a través de una resistencia en paralelo[5].

Se consideran defectos en el volumen del material absorbedor a las vacancias o intersticios de los elementos en los materiales constituyentes e impurezas y fragmentaciones o discontinuidades en la red cristalina del material. Son llamados defectos en el volumen debido a que el material absorbedor en las celdas solares de películas delgadas son el material de mayor espesor. Estos defectos son considerados de manera general por el software SCAPS-1D utilizado en el modelado del presente trabajo.

Ahora para los llamados defectos en la intercara se hace referencia a las imperfecciones en la sección transversal donde se origina la región de empobrecimiento y generalmente es entre el material absorbedor y el material ventana. De manera más acertada se puede decir que esta región es en el cambio

de semiconductor tipo n al semiconductor tipo p en el recorrido perpendicular a la superficie de los fotones incidentes. Estos defectos son desacoplamientos reticulares en las redes cristalinas de los materiales semiconductores en contacto y la difusión entre los materiales que se crea al ser sintetizados.

Estos defectos en el volumen y en la intercara propician las recombinaciones que impactan directamente en la densidad de corriente que puede ser aprovechada y en el voltaje de circuito abierto. Estas recombinaciones son denominadas la recombinación Shockley-Read-Hall (SRH) y la recombinación intercara. La densidad de corriente disipada por estas recombinaciones y su impacto en la densidad de corriente de la celda solar se puede interpretar y analizar mediante la tasa de recombinación de cada uno de estos mecanismos. La tasa de recombinación SRH se describe mediante la siguiente ecuación[76];

$$U_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_{n0}(p + p_t) + \tau_{p0}(n + n_t)} \quad (3.22)$$

Donde  $n$  es la densidad de electrones,  $p$  es la densidad de huecos,  $\tau_{n0}$  es el tiempo de vida medio del electrón,  $\tau_{p0}$  el tiempo de vida medio del hueco y,  $n_t$  y  $p_t$  son las densidades de electrones y huecos con energía  $E_t$  con respecto a la banda de conducción. En el caso específico de un semiconductor tipo n donde:

$$\tau_{p0}N_D \gg \tau_{n0}p_t ; N_D \gg n_t \quad (3.23)$$

Entonces:

$$U_{SRH} \approx \frac{p - p_0}{\tau_{p0}} \quad (3.24)$$

De igual forma para el caso de un semiconductor tipo p se tiene que:

$$\tau_{n0}N_A \gg \tau_{p0}n_t ; N_A \gg p_t \quad (3.25)$$

Por lo cual la ecuacion (3.22) para este caso se puede simplificar como:

$$U_{SRH} \approx \frac{n - n_0}{\tau_{n0}} \quad (3.26)$$

Por otro lado, la tasa de recombinación intercara  $U_{IR}$  es descrita en términos de la velocidad de recombinación superficial de los electrones ( $S_{n0}$ ) y huecos ( $S_{p0}$ ), la densidad de portadores de carga en la superficie de la unión, es decir, electrones en el material ventana ( $n_{vent,s}$ ) y huecos en el absorbedor ( $p_{abs,s}$ )[76]:

$$U_{IR} = \frac{S_{p0}S_{n0}n_{vent,s}p_{abs,s}}{S_{p0}n_{vent,s} + S_{n0}p_{abs,s}} \quad (3.27)$$

Estas velocidades de recombinación superficial de los electrones y huecos pueden ser descritas como[76]:

$$S_{n0} = N_{ts}\sigma_n v_{th,n} \quad ; \quad S_{p0} = N_{ts}\sigma_p v_{th,p} \quad (3.28)$$

Donde  $\sigma_n$  y  $\sigma_p$  son las secciones eficaces de los electrones y los huecos respectivamente,  $N_{ts}$  en la densidad total de defectos en la superficie y,  $v_{th,n}$  y  $v_{th,p}$  las velocidades térmicas de los electrones y los huecos respectivamente.

Ahora se examinará la densidad de corriente asociada a las pérdidas por estas recombinaciones bajo el límite no radiativo, la cual es denotada por  $J_{NR}$ . Esta densidad de corriente se puede describir de forma similar a la densidad de corriente asociada a la recombinación radiativa, solo siendo modificadas las tasas de recombinación. La expresión para esta densidad de corriente puede ser expresada como:

$$J_{NR} = q \left[ \int_0^{d_{abs}} U_{SRH} dx + \int_0^{d_{n-p}} U_{IR} dx \right] \quad (3.29)$$

O bien:

$$J_{NR} = q \left[ \int_0^{d_{abs}} \frac{n - n_0}{\tau_{n0}} dx + \int_0^{d_{n-p}} \frac{S_{p0} S_{n0} n_{vent,s} p_{abs,s}}{S_{p0} n_{vent,s} + S_{n0} p_{abs,s}} dx \right] \quad (3.30)$$

Donde:

$$n \cong n_i e^{\frac{qV}{2kT}} \quad (2.31)$$

Sustituyendo 3.31 en 3.30 e integrando, se obtiene que las pérdidas de densidad de corriente bajo el esquema no radiativo pueden ser descritas como[77]:

$$J_{NR} = q \left[ \frac{n_i d_{abs}}{\tau_{n0}} e^{\frac{qV}{2kT}} + \frac{S_{p0} S_{n0} n_{vent,s} p_{abs,s}}{S_{p0} n_{vent,s} + S_{n0} p_{abs,s}} d_{n-p} \right] \quad (3.32)$$

### 3.4 Ecuaciones de interés en semiconductores.

Las ecuaciones que describen el comportamiento de los portadores de carga, los campos eléctricos y el potencial en un semiconductor son: las ecuaciones de transporte de portadores de carga, las ecuaciones de continuidad y la ecuación de Poisson. Estas ecuaciones que describen el comportamiento, mediante un uso adecuado de las condiciones de frontera aplicadas a ellas pueden ser descritas como se mostrara en esta sección.

La ecuacion de Poisson describe el comportamiento del potencial electroestático en la unión p-n ( $\Psi$ ) en función de los portadores de carga en esta región, huecos ( $p$ ) y electrones ( $n$ ), los defectos del material ( $\rho_{def}$ ) y la concentración de donores en el material tipo n ( $N_D$ ), como los aceptores en el material tipo p ( $N_A$ ). Esta ecuación puede ser descrita como [5]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \epsilon \epsilon_0 \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = -q \left( p - n + N_D - N_A + \frac{\rho_{def}}{q} \right) \quad (3.33)$$

Donde  $\epsilon$  es la permitividad relativa del semiconductor y  $\epsilon_0$  es la permitividad del vacío. Por otro lado, se tienen las ecuaciones de continuidad que dan certeza de no tener fugas o generación de corriente de ningún tipo que no esté siendo analizado. Estas ecuaciones son análogas tanto para electrones como para huecos y se pueden expresar como se muestran a continuación [5]:

$$\frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} - U_n + G = \frac{\partial n}{\partial t} \quad (3.34)$$

$$-\frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} - U_p + G = \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.35)$$

Donde  $G$  es la generación de pares electrón-hueco,  $U_p$  y  $U_n$  son las tasas de recombinación de huecos y electrones, respectivamente, y  $J_{n,p}$  son las densidades de flujo de electrones y huecos, respectivamente.

Por último, para el transporte de portadores de carga se tiene un par de ecuaciones que describen el comportamiento de la movilidad de las cargas de interés en cada caso, análogas tanto para electrones como para huecos, y pueden ser descritas como se muestra en la siguiente ecuación para electrones[5]:

$$J_n = n\mu_n \frac{dE_{Fn}}{dx} \quad (3.36)$$

Donde  $E_{Fn}$  es el cuasi nivel de fermi para los electrones, el cual se encuentra cerca de la banda de conducción y  $\mu_n$  es la movilidad de los electrones en el material. Para los huecos, el cuasi nivel de fermi se encuentra cerca de la banda de valencia  $E_{Fp}$ , y el transporte de huecos se determina mediante:

$$J_p = p\mu_p \frac{dE_{Fp}}{dx} \quad (3.37)$$

Donde  $\mu_p$  representa la movilidad de los huecos.

## 4 SCAPS 1-D.

---

La investigación para el desarrollo de materiales semiconductores y con ello dispositivos fotovoltaicos mediante el uso de metodologías convencionales que no incluyen el desarrollo de modelos para la simulación de las características de estos dispositivos resultan en gastos innecesarios que encarecen la investigación, así como en el estudio de otras tecnologías, utilizar metodologías convencionales encarece el proceso. Otro aspecto negativo de las metodologías convencionales es el gran desperdicio que se produce en el laboratorio cuando no se busca predecir antes de empezar con el trabajo de síntesis de materiales. Una alternativa que ha surgido con el desarrollo de nuevas tecnologías es la simulación de materiales en búsqueda de características específicas. Esta alternativa, aunque puede no mostrar a primera instancia sus beneficios, resulta muy práctica al momento de necesitar cambiar un parámetro en cierto material o dispositivo y predecir su comportamiento. Uno de los softwares utilizados en la actualidad en la investigación de celdas solares de película delgada mediante el modelado y simulación es el *Solar Cell Capacitance Simulator* o SCAPS.

En el presente capítulo se presentarán las características del software SCAPS 1-D importantes en su uso en la simulación de celdas solares. Entre estas características que destacan para su uso en la simulación en celdas solares se encuentran la posibilidad de configurar las propiedades de la celda solar y en el caso de películas delgadas, describir las propiedades de cada una de ellas por separado. Además, se mostrarán los distintos tableros de configuración con los cuales se establece el sistema y se realiza la simulación, como se crean las bibliotecas de materiales y sistemas etc.

## 4.1 Antecedentes del software.

El Software SCAPS es una herramienta informática capaz de analizar materiales semiconductores y la interacción de ellos, la iluminación y temperatura del ambiente, propiedades de los materiales y parámetros de manufactura. Este software fue desarrollado por el departamento de sistemas de la información y electrónica ELIS, por sus siglas en inglés, de la universidad de Gent, Bélgica para el modelado y la simulación de celdas solares. La descripción del funcionamiento completo y algoritmos utilizados son descritos a detalle y compartidos en la literatura por sus autores[78][79][80][81][82][83][84]. Además de compartir la descripción de su funcionamiento, este software ha sido publicado gratuito para su uso por parte de la comunidad científica interesada en la investigación de dispositivos fotovoltaicos.

Un aspecto importante que resalta del sistema SCAPS es la poca cantidad de recursos necesarios para su uso. El software requiere una capacidad de almacenamiento disponible mínima de 50MB y un sistema operativo Windows 95 o posterior. Esto pone la herramienta que es el software SCAPS al alcance de una mayor comunidad interesada en el desarrollo de la tecnología relacionada a celdas solares y materiales semiconductores en general.

El software se encuentra en constante evolución y los autores publican las actualizaciones o las nuevas versiones en el portal de internet para su acceso público. En este portal se encuentran publicadas todas las versiones que ha tenido el software y hay acceso para la descarga de cada una de estas versiones.

## 4.2 Definición de un modelo en SCAPS.

El software SCAPS a pesar de ser una herramienta seria que ha ayudado en el desarrollo de la investigación en celdas solares y materiales semiconductores en general, es un software con una interfaz amigable. Esta interfaz se constituye de diversas funciones que requieren para su configuración distintas pantallas. A continuación, se describirán las pantallas más importantes del software para el modelado de celdas solares.

### 4.2.1 Pantalla principal.

El trabajo de simulación con el uso de este software comienza con la configuración del punto o condiciones de trabajo. Entre estas condiciones de trabajo se tiene la iluminación, la resistencia en serie y en paralelo, la temperatura y la configuración del tipo de análisis al cual será sometido el sistema planteado. Además de poder configurar estas condiciones de trabajo y ajustes de análisis, también pueden ser guardadas y utilizadas de las bibliotecas generadas por el usuario. En la figura 15 se muestra la pantalla principal de interacción del usuario con las condiciones de trabajo del sistema.



Figura 15. Pantalla principal de configuración del punto de trabajo y condiciones de análisis del software SCAPS

En esta figura se pueden observar diversos paneles para la configuración del sistema. En la figura 16 se muestra el panel de configuración del punto de trabajo. Este panel se muestra en la parte superior izquierda de la pantalla principal y sirve para configurar la temperatura, voltaje y frecuencia de trabajo.

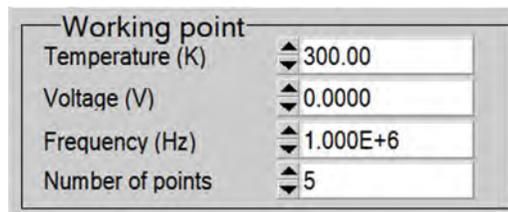


Figura 16. Panel de configuración del punto de trabajo del software SCAPS.

En la pantalla principal de SCAPS posicionado en la parte superior central se encuentra el panel para la configuración de la resistencia en serie y resistencia en paralelo asociadas al dispositivo semiconductor simulado. En la figura 17 se observa el panel de configuración de las resistencias en serie y en paralelo del dispositivo.

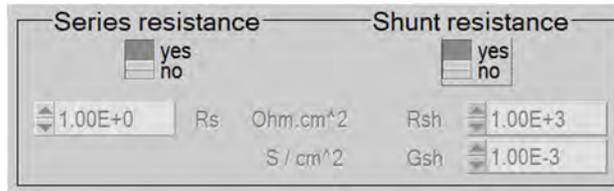


Figura 17. Panel de configuración de resistencia en serie y en paralelo en la pantalla principal del software SCAPS, asociadas al dispositivo modelado.

En la parte central de esta pantalla principal se puede encontrar un panel para la configuración de la iluminación que será utilizada en la simulación del dispositivo. En la figura 18 se muestra el panel de configuración de la iluminación del dispositivo. En este panel es posible configurar espectros de radiación mediante modelos analíticos o archivos que describan el comportamiento de la intensidad del espectro utilizado. Cabe resaltar que de igual forma en esta sección se puede “apagar” la iluminación del dispositivo simulado, para realizar análisis en la oscuridad.

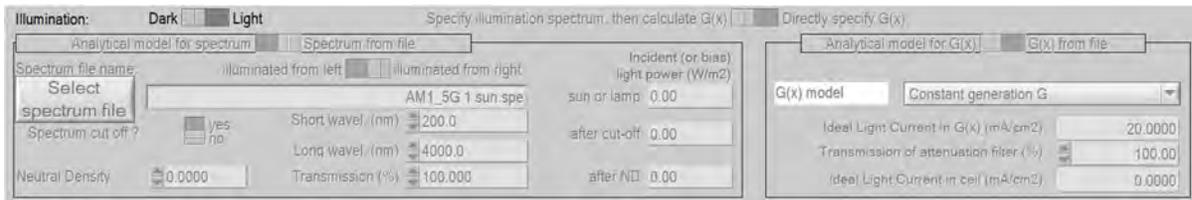


Figura 18. Panel para la configuración de la iluminación del software SCAPS.

Posteriormente en la parte central de la pantalla principal del software SCAPS se encuentra un panel denominado “panel de acción”. Este panel de acción permite configurar las acciones a seguir y los rangos a estudiar sobre el análisis que se desea realizar sobre el dispositivo modelado. En la figura 19 se muestra el panel de acción del software SCAPS.

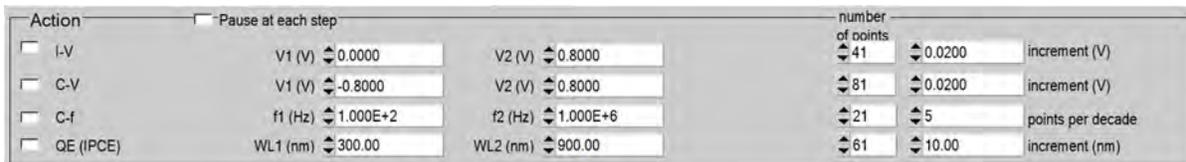


Figura 19. Panel de acción del software SCAPS.

En el panel de acción del software es posible configurar análisis corriente-voltaje (I-V), capacitancia-voltaje (C-V), capacitancia-frecuencia (C-f) y eficiencia cuántica (EQE). Estas configuraciones se refieren al establecimiento de rangos de estudio y cantidad de pasos en el análisis, así como el tamaño de los pasos del análisis.

Por último, en esta pantalla principal del software SCAPS en la parte superior derecha se encuentra un panel de guarda/carga de ajustes y acciones. En la figura 20 se muestra el panel de administración de bibliotecas del software SCAPS.



*Figura 20. Panel de administración de bibliotecas de ajustes generales del software SCAPS.*

Hasta este momento se han descrito los aspectos de la pantalla principal enfocados a la definición del entorno donde se realizará la simulación. Además, se mostró el panel de guardado y carga de configuraciones y acciones donde se puede administrar las simulaciones que se han realizado y guardar de forma completa las características del problema, desde el entorno, la celda solar y los materiales a simular, hasta el estudio específico o la acción que se realizó en el modelado.

## 4.2.2 Pantalla de configuración del problema.

En la parte inferior de la pantalla principal se encuentra una sección donde se sitúan la mayoría de botones de acción, los cuales cuando ya se definió el problema y las condiciones de entorno permiten iniciar la simulación. También se encuentran en esta parte los botones que permiten mostrar los resultados de los análisis realizados en las simulaciones.

Otro aspecto importante de esta sección es el botón “set problem” el cual se refiere a la configuración del problema de interés a trabajar. Este botón permite acceder a la pantalla de configuración del problema donde se muestran los materiales utilizados, un diagrama de la estructura del dispositivo semiconductor que se va a modelar, entre otros aspectos importantes que serán descritos a continuación. En la figura 21 se muestra la parte inferior de la pantalla principal donde se puede apreciar el botón de configuración del problema.

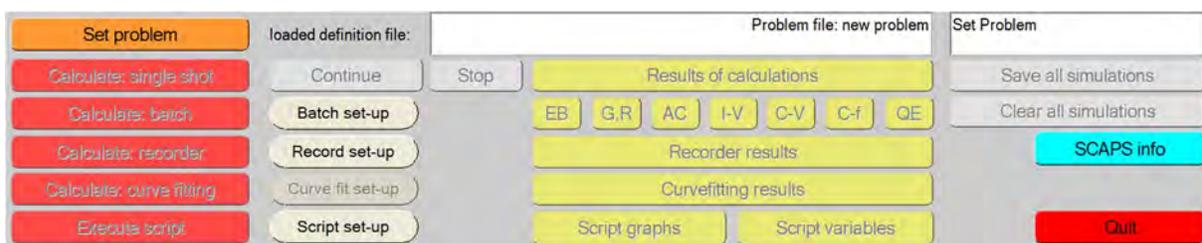


Figura 21. Panel de botones de acción en la pantalla principal del software SCAPS.

Dentro de la configuración del problema se observa una pantalla que se encuentra dividida en tres partes importantes: el panel de los materiales, el gráfico esquemático del dispositivo y una sección de información del problema. Además, en esta pantalla se muestran botones que dan la opción de guardar el dispositivo diseñado o cargar dispositivos de las galerías ya existentes o los generados por el usuario. En la figura 22 se muestra la pantalla de configuración del problema del software SCAPS.

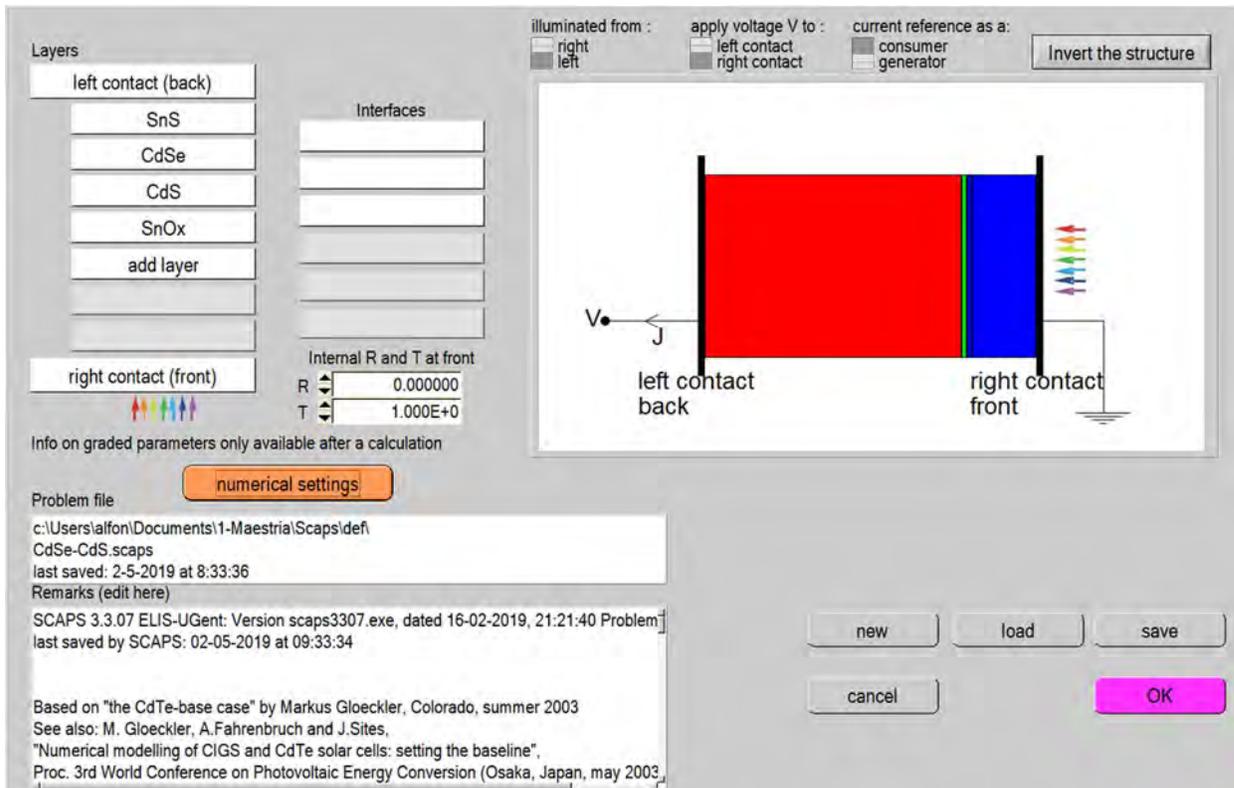


Figura 22. Pantalla de configuración del problema del software SCAPS.

El panel de los materiales es un espacio destinado para el diseño del dispositivo que se desea modelar. En este panel presentado se puede añadir, configurar y eliminar cada película a la celda solar de interés. Además, permite también acceder a las propiedades de la intercara entre cada dos películas presentes en el modelo, haciendo así posible modelar las propiedades en la intercara p-n de una celda solar.

En la figura 23 se muestra el panel de los materiales en la configuración del problema. En esta figura se muestra en los extremos de los botones, los correspondientes a el contacto posterior y al contacto frontal nombrados en inglés como “left contact” y “right contact”, respectivamente. Debajo del botón designado para la configuración del contacto frontal se observan unas flechas de colores las cuales indican el espectro electromagnético en la región visible y por donde incide al material la radiación, que en este caso es por el contacto frontal, no obstante, se puede configurar el problema para que la luz incida por el contacto posterior si así fuese necesario.

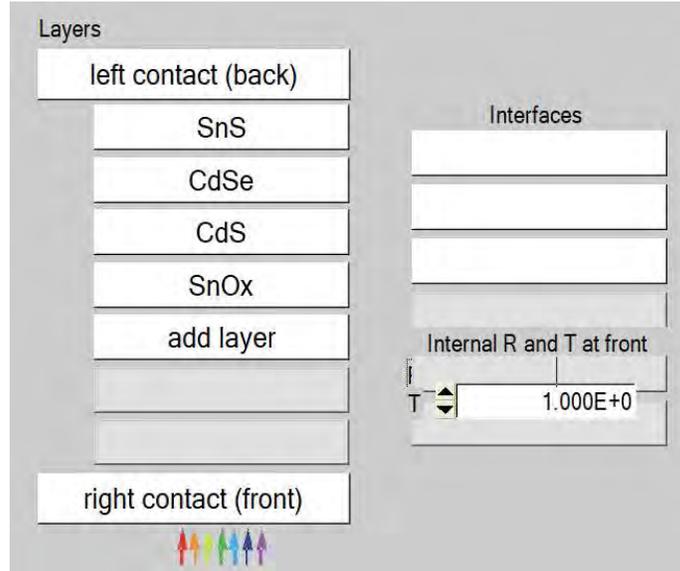


Figura 23. Panel de los materiales en la sección de configuración de problema del software SCAPS.

Por otra parte, en este panel de configuración del problema del lado superior derecho se puede observar una representación esquemática del dispositivo modelado. Esta representación esquemática muestra de color rojo los materiales semiconductores tipo p, de color azul los materiales tipo n y como unas barras verticales negras un poco más anchas los contactos posterior y frontal, indicando con unas flechas de colores el sentido de incidencia del espectro visible de la luz. Este panel gráfico se muestra en la figura 24. En la parte superior del panel gráfico se tienen unos botones que permiten indicar la dirección de la iluminación, la posición de alimentación o recolección de voltaje y si el dispositivo a simular es un generador o un consumidor de energía.

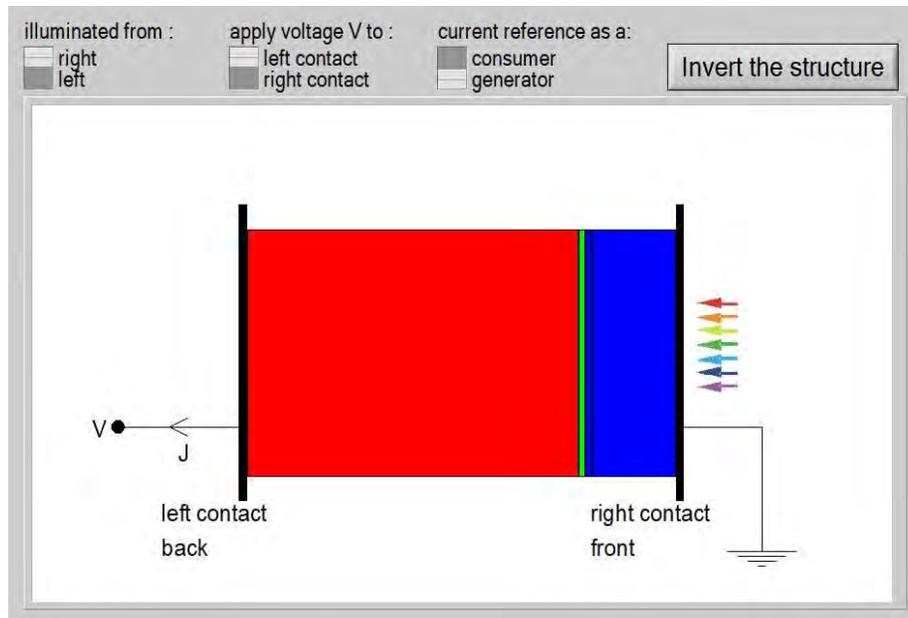


Figura 24. Panel gráfico del diseño del dispositivo de la configuración del problema en el software SCAPS.

Por último, en la parte inferior de la pantalla de configuración del problema se encuentran los paneles de información del problema y el panel de guardado. El panel de información muestra información relacionada al nombre del archivo que se está modelando e informa acerca de la versión utilizada en el modelado del problema. El panel de información del problema y el panel de guardado pueden observarse en las figuras 25 y 26. La sección de guardado no solo permite cargar y guardar configuraciones del problema deseadas, sino que también presenta dos botones útiles en el modelado de celdas solares que son el botón de “new” y “cancel” que se refieren a nuevo y cancelar, respectivamente. El botón de nuevo sirve para limpiar el panel de materiales dejándolo vacío para empezar a trabajar un proyecto de simulación nuevo. El botón de cancelar por otro lado funciona para revertir los cambios que se le hayan realizado en la configuración actual al dispositivo en el archivo antes guardado.

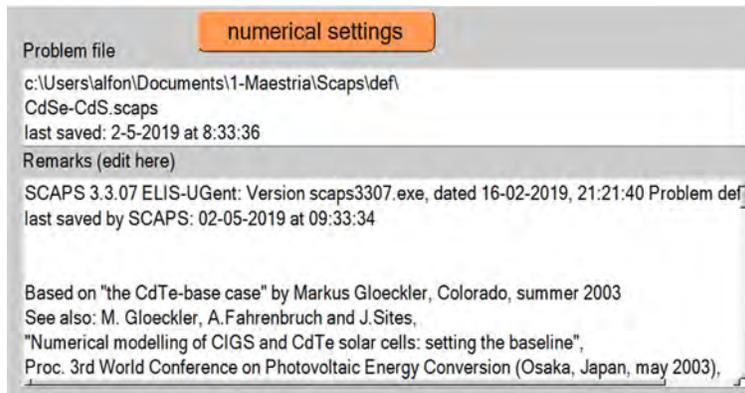


Figura 25. Panel de información en la configuración del problema del software SCAPS.



Figura 26. Panel de guardado de la configuración del problema en el software SCAPS.

### 4.2.3 Pantalla de configuración del material.

En la pantalla de configuración del problema, en el panel de materiales al acceder a alguno de ellos o usar la opción de añadir uno nuevo se abrirá la pantalla de configuración del material. La pantalla de configuración del material es mostrada en la figura 27. Esta pantalla de configuración se encuentra dividida en 4 paneles diferentes que permiten el diseño del material mediante la configuración de las propiedades del material, las características de absorción del material y de los tipos de defectos presentes en el mismo, así como contiene un panel de guardado.

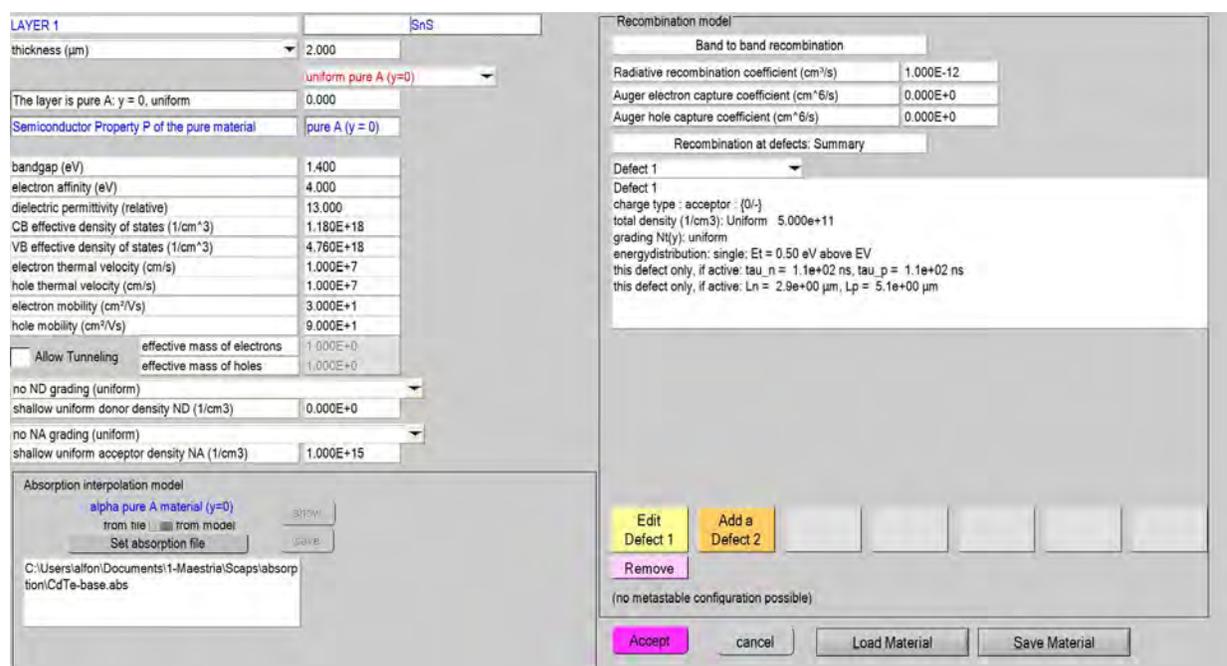


Figura 27. Pantalla de configuración del material del software SCAPS.

El panel de configuración de las propiedades del material se encuentra en la parte superior izquierda. En este panel es posible establecer propiedades del material como el espesor de la película, el tipo de material, ancho de banda prohibida, permitividad dieléctrica, afinidad electrónica, movilidad y concentración de cargas entre otros.

En la parte derecha de la pantalla de configuración del material se encuentra un panel donde se muestran los tipos de defectos presentes en el material, la densidad de estos defectos entre otras características atribuidas a los mismos. En este panel es posible establecer el coeficiente de recombinación radiativa, y los coeficientes para los electrones y huecos de la recombinación Auger, la cual no será objeto de estudio en la presente tesis. Además, siguiendo hacia abajo en este panel se encuentra una sección con unos botones que representan cada uno un tipo de defectos que se le puede atribuir a la película, en esta sección es posible agregar, remover y configurar los defectos de la película, al buscar editar estos defectos es necesario presionar el botón de “Edit Defect” y abrirá una pantalla para la configuración de estos. En la figura 28 se muestra la pantalla de configuración de los defectos en el material.

Defect 1 of SnS

defect type	Single Acceptor (-/0)
capture cross section electrons (cm <sup>2</sup> )	1.800E-12
capture cross section holes (cm <sup>2</sup> )	1.800E-12
energetic distribution	Single
reference for defect energy level Et	Above EV (SCAPS < 2.7)
energy level with respect to Reference (eV)	0.500
characteristic energy (eV)	0.100

no Nt grading (uniform)

Nt total (1/cm3)    uniform Nt    5.000E+11

Optical capture of electrons     From model     From file

refractive index (n)	3.000
effective mass of electrons (rel.)	1.000E+0
effective field ratio	1.00E+0
cut off energy (eV)	10.00
optical electron capture cross sections file:	

Optical capture of holes     From model     From file

refractive index (n)	3.000
effective mass of holes (rel.)	1.000E+0
effective field ratio	1.00E+0
cut off energy (eV)	10.00
optical hole capture cross sections file:	

accept    cancel

Figura 28. Pantalla de configuración de los defectos de un material en el software SCAPS.

Por último, en esta pantalla de configuración del material se tiene en la parte inferior izquierda un panel donde es posible establecer y configurar el coeficiente de absorción del material a lo largo del espectro estudiado. Este espectro de absorción puede ser establecido mediante un modelo, o bien, mediante un archivo que describa su comportamiento a lo largo del espectro estudiado. Además, en la parte inferior derecha de esta pantalla de configuración se sitúan los botones de cargar y guardado, los cuales sirven para cargar materiales completos antes configurados o guardar modificaciones hechas al material con el que se está trabajando.

#### 4.2.4 Pantalla de resultados de la simulación.

Posterior a tener establecidas las condiciones del punto de trabajo y haber propuesto los materiales que constituyen la celda solar y configurado las propiedades de cada uno de sus materiales, es posible realizar la simulación de sus características. Para realizar la simulación del dispositivo modelado se usa el botón en la parte inferior de la pantalla principal nombrado "Calculate: single shot".

Los resultados de la simulación de la celda solar planteada son mostrados de dos formas: mediante una interfaz de análisis rápido que muestra el comportamiento del diagrama de bandas, la densidad de portadores de carga, la densidad de corriente y la probabilidad de ocupación de estos portadores en función de la distancia, es decir, se estudia a lo largo del camino óptico de la luz en el dispositivo, y mediante los datos numéricos de estas características. En la figura 29 se muestra la interfaz de resultados de la simulación.

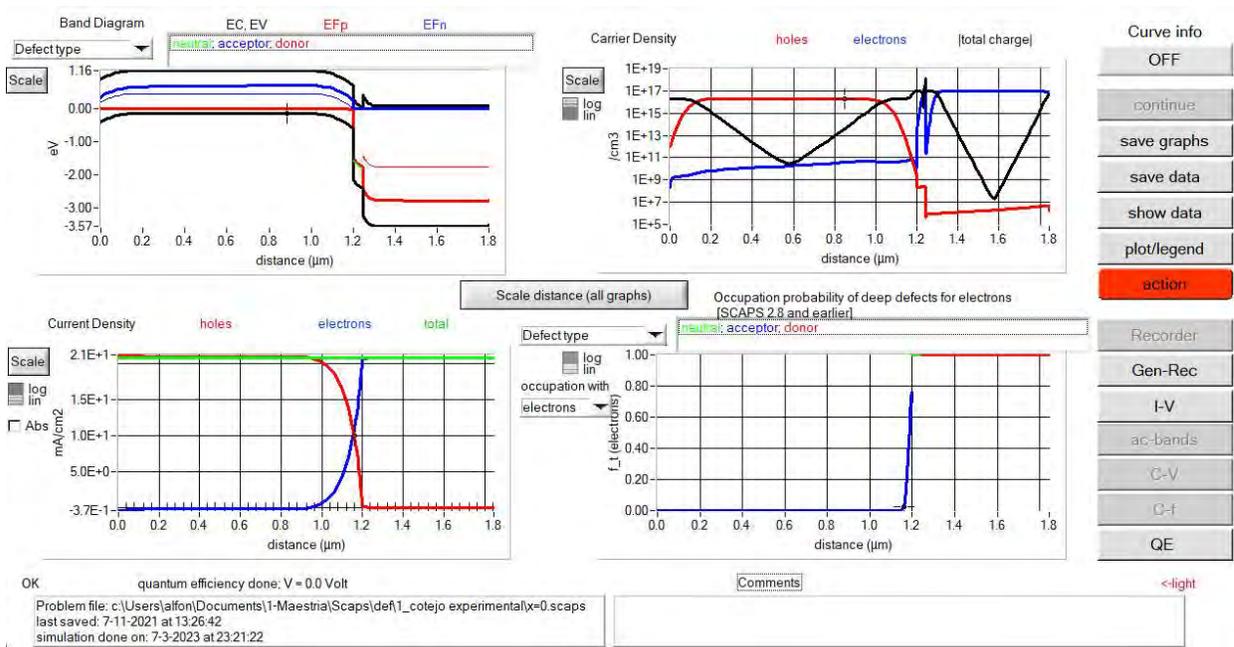


Figura 29. Interfaz de resultados de una simulación en el software SCAPS.

La interfaz de resultados del software SCAPS sitúa en el centro las gráficas del comportamiento de las propiedades mostradas. A la derecha en esta misma interfaz se encuentran unos botones que permiten mostrar y guardar los datos numéricos de esta simulación, los cuales son nombrados con los botones de “show” y “save”, respectivamente. Además, en la parte inferior se muestran unos botones que se habilitan y deshabilitan dependiendo de las simulaciones realizadas y los datos requeridos por el usuario. Para el trabajo de simulación de interés en este trabajo de tesis se utilizó I-V y QE, estos botones se refieren al análisis corriente-voltaje y eficiencia cuántica de una celda solar.

Una vez seleccionado el análisis de interés se abre una interfaz específica que permite el análisis rápido y los datos numéricos de ese estudio en particular. En la figura 30 se muestra la interfaz de resultados correspondiente a la característica J-V de la celda solar simulada. Estas interfaces de resultados permiten cambiar las unidades en las que son analizados los datos de la gráfica y muestran de manera independiente las simulaciones recientes realizadas para su fácil comparación.

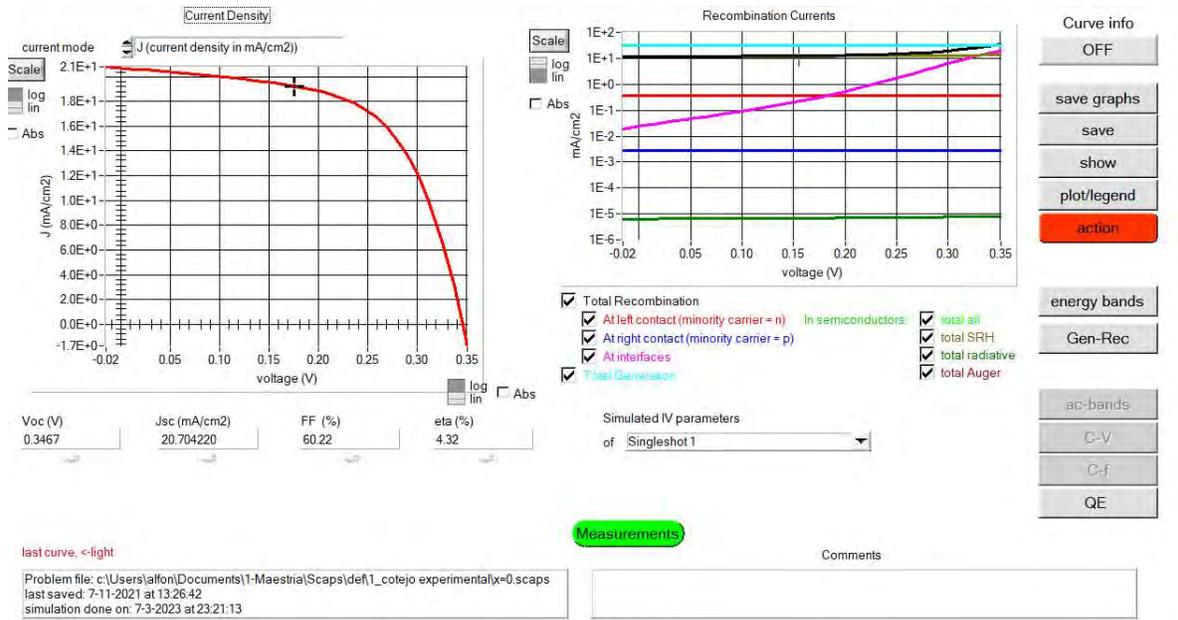


Figura 30. Interfaz de resultados J-V del software SCAPS.

Por último, una de las interfaces que es importante mencionar es la interfaz de resultados de la simulación de eficiencia cuántica. Esta interfaz es mostrada en la figura 31. Esta interfaz permite al usuario analizar el comportamiento de la eficiencia cuántica en función de dos distintas variables independientes que son la longitud de onda y la energía de incidencia. Además, permite cambiar la asignación de los ejes para analizar otros aspectos de la curva y es posible ver en la gráfica mostrada las curvas de eficiencia cuántica de las celdas solares simuladas recientemente para una comparación más versátil.

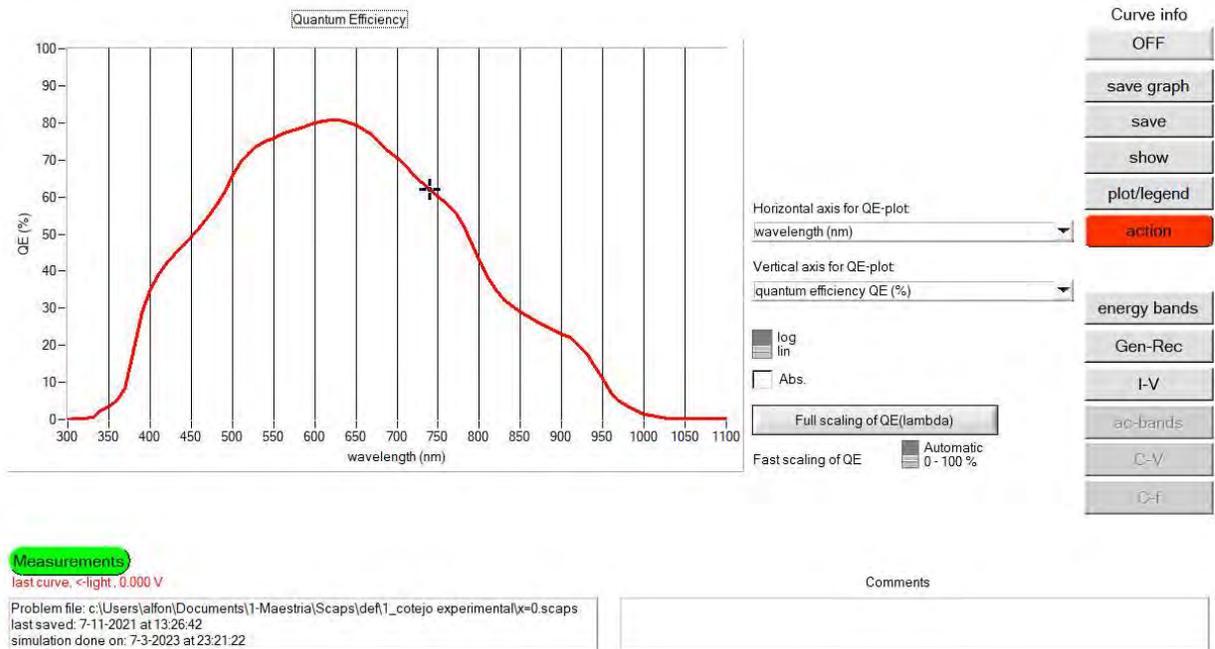


Figura 31. Interfaz de resultados de Eficiencia Cuántica Externa del software SCAPS.

## 5 Resultados y discusión.

---

En este capítulo se abordará la discusión del trabajo realizado en el desarrollo de la investigación pertinente a esta tesis. Esta discusión va enfocada a documentar los aspectos más relevantes para el desarrollo de esta investigación. Además, a lo largo del capítulo se presentarán los resultados obtenidos.

El desarrollo de este capítulo mostrará las diferentes etapas necesarias en la investigación realizada. Estas etapas son el ajuste o calibración del modelo, el modelado de diferentes concentraciones de los ternarios, el análisis de los resultados obtenidos para determinar la concentración en el ternario con la cual la celda solar presenta una mayor eficiencia, y el cambio en las características provocado por la concentración de donores en el ternario.

### 5.1 Modelo teórico.

El trabajo de modelado se realizó mediante la implementación del software SCAPS 1-D. En este software es posible configurar una gran cantidad de aspectos del sistema para un modelo más eficiente, estos aspectos fueron discutidos en el capítulo 4. Entre las posibilidades de software se encuentran una diversa cartera de propiedades físicas, ópticas y cristalinas de cada una de las películas de la celda solar en cuestión. Por esto es importante que al realizar el modelado de alguna celda solar primero se verifique la reproducibilidad del modelo mediante un reporte experimental de una celda solar sintetizada. La celda solar reportada deberá contener información que ayude a sentar las bases del modelo y que esta información sea suficiente para otorgarle veracidad al modelo. Entre los datos importantes se pueden encontrar desde las películas que constituyen la celda, sus espesores, cantidad de defectos en el absorbedor y en la intercara p-n, hasta

valores más determinantes como las características J-V de la celda solar, espectro de absorción de cada película, la eficiencia cuántica del dispositivo y propiedades fisicoquímicas de las películas.

Para el desarrollo de este trabajo se utilizó el reporte de una celda solar de SnS/CdS con AZO como óxido conductor transparente, una capa antirreflejante y como contacto posterior Mo, la cual fue publicada en 2020 por Jae Yu Cho de la universidad nacional de Chonnam de la república de Corea [18]. La curva característica J-V de dicha celda solar se muestra en la figura 32.

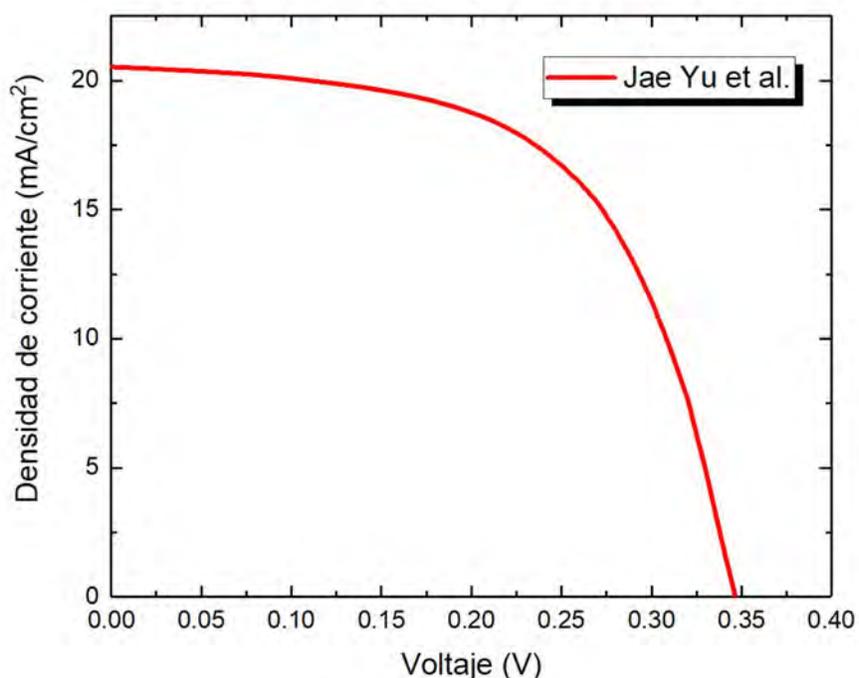


Figura 32. Curva característica J-V de la celda solar reportada.

En esta figura se observa como los valores de voltaje de circuito abierto se encuentran entre 300 y 400 mV, y la densidad de corto circuito apenas por encima de los 20 mA/cm<sup>2</sup>. Una eficiencia de conversión de la celda de 4.30% se reportó. De manera concisa se pueden observar estos datos en la tabla 10.

Celda solar	$V_{oc}(mV)$	$J_{sc}(mA/cm^2)$	Factor de Forma (%)	Eficiencia (%)
Jae Yu et al.	346	20.53	60.40	4.30

Tabla 10. Valores de las características optoelectrónicas de la celda solar.

Además de estos datos el autor reporta información importante como la cantidad de defectos en el absorbedor, métodos de síntesis utilizados para las distintas películas que conforman el dispositivo y el comportamiento de la eficiencia cuántica de la celda entre los 300 nm y los 1100 nm. En la figura 33 se observa a) el comportamiento de la eficiencia cuántica (EQE) de la celda solar y b) las pérdidas por absorción de las diferentes películas que constituyen este dispositivo.

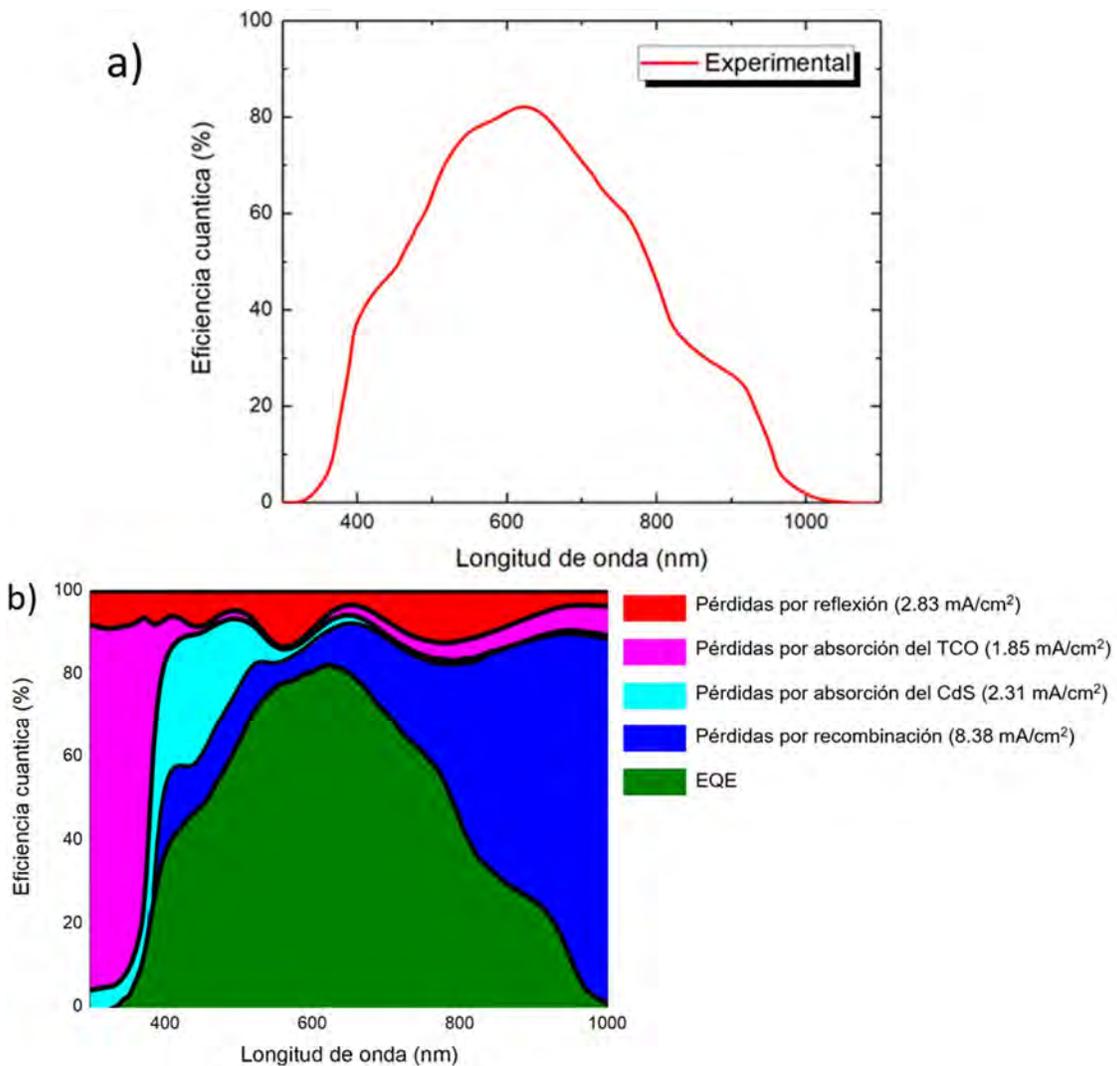


Figura 33. a) Eficiencia cuántica de la celda, b) Contribuciones en las pérdidas de densidad de corriente.

Al iniciar con el modelado se tomaron los parámetros de espesor reportados por el autor de la celda experimental y para las propiedades físicas y ópticas de cada uno de los materiales en las películas de la celda se tomaron valores representativos encontrados en la literatura y presentados anteriormente en el capítulo 2. Los espesores utilizados fueron: 1200 nm para el SnS, 45 nm para el CdS y 400 nm de ZnO como TCO de la celda solar. En este primer acercamiento al modelo se obtuvieron las características presentadas en la figura 34. Sin tomar en cuenta la contribución de las pérdidas por lo defectos en el absorbedor ni la contribución de las pérdidas por recombinación en la intercara se obtuvieron valores de eficiencia de 16.18 %, correspondientes a una densidad de corriente de 27.34 mA/cm<sup>2</sup>, un voltaje de circuito abierto de 868.1 mV y un factor de forma de 68.18 %.

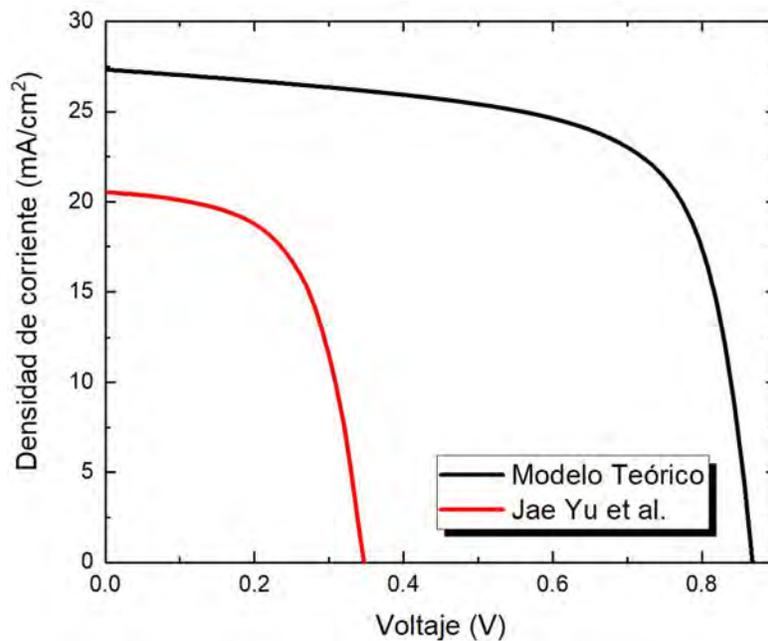


Figura 34. Comparativa entre las curvas J-V reportada y la simulada por el modelo teórico bajo el límite radiativo.

Estos valores obtenidos por el modelo teórico son para un sistema de la celda solar que se encuentra bajo el límite radiativo y si bien no es posible obtener estas condiciones en la práctica, las mismas sirven para ver la potencialidad de la celda

solar y revisar si los parámetros del modelo no están fuera del límite de Shockley-Queisser ya que esto propiciaría errores y simulaciones inciertas.

Como un siguiente paso se tomó en cuenta la contribución de las pérdidas por recombinación en el absorbedor y en la intercara, ambas contribuciones por separado, esto buscando reproducir el comportamiento de este tipo de tecnología. En los dispositivos fotovoltaicos del tipo SnS/CdS se han reportado que la recombinación por defectos en el volumen del absorbedor afecta en mayor medida a la densidad de corriente de corto circuito siendo casi imperceptible para el voltaje de circuito abierto y por otro lado la recombinación en la intercara afecta directamente este parámetro casi sin variar la densidad de corriente de corto circuito [5]. Para este paso de la calibración del modelo se tomaron valores de densidad de defectos en el SnS de  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  y una densidad de defectos en la intercara entre el SnS y el CdS de  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , los cuales representan los reportados comúnmente en la literatura[13]. En la figura 35 se muestra a) el comportamiento de la curva J-V en presencia de los defectos en el volumen y b) el comportamiento de la misma cuando las pérdidas por recombinación en la intercara son tomadas en cuenta.

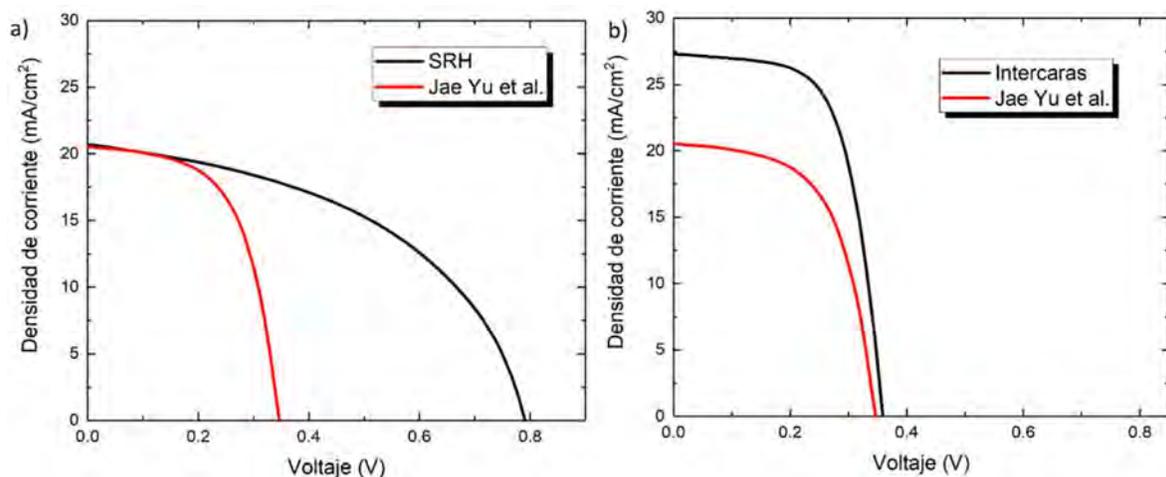


Figura 35. Comportamiento de las curvas J-V del modelo teórico cuando a) los defectos en el volumen y b) la recombinación en la intercara, son tomadas en cuenta.

Como continuación a esta parte del trabajo de calibración se tomó en cuenta en un mismo sistema las contribuciones de ambos mecanismos de recombinación, esperando obtener una curva característica J-V similar a la reportada en la literatura. Se puede observar en la figura 36 que los valores obtenidos por el modelo mediante estas condiciones reproducen las características de la celda solar experimental. Se observan valores de voltaje de circuito abierto de 346.7 mV, densidad de corriente de corto circuito de 20.70 mA/cm<sup>2</sup>, factor de forma de 60.22% y eficiencia de conversión de 4.32%.

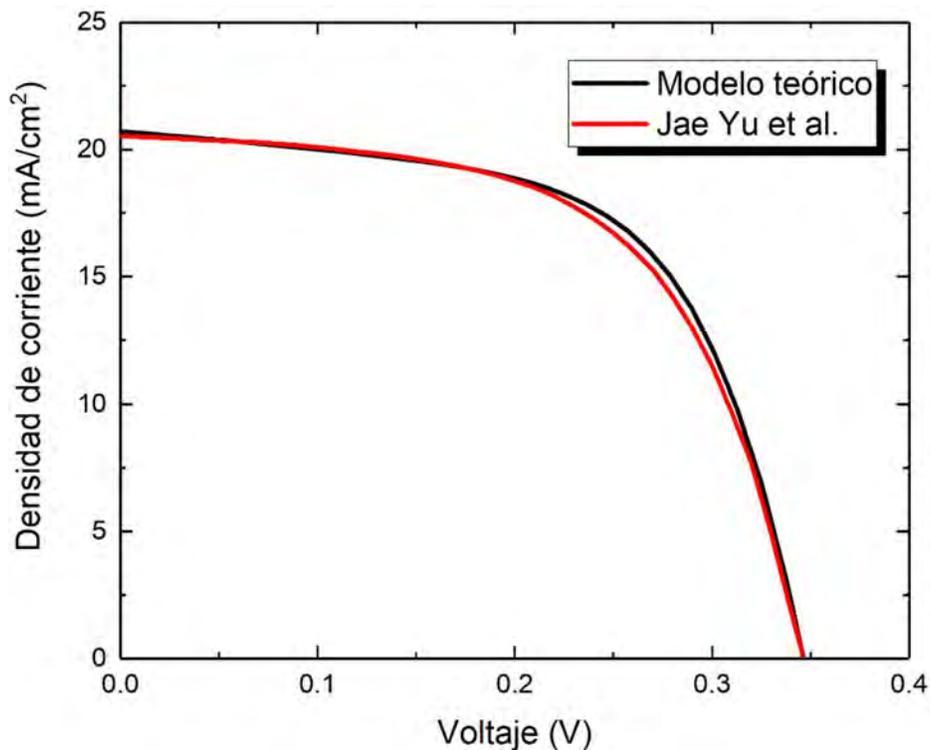


Figura 36. Comparación de las curvas características J-V del modelo teórico y de la celda solar reportada.

Para una visión más completa del comportamiento de la celda en la figura 37 se muestran las curvas J-V de cada uno de los sistemas analizados. En este análisis se observa claramente que en la presencia de los defectos en el material absorbedor se origina una recombinación que propicia una pérdida de densidad de corriente de alrededor de 7 mA/cm<sup>2</sup>. Por otro lado, se observa una variación de alrededor de 500 mV en la presencia de recombinación en la intercara.

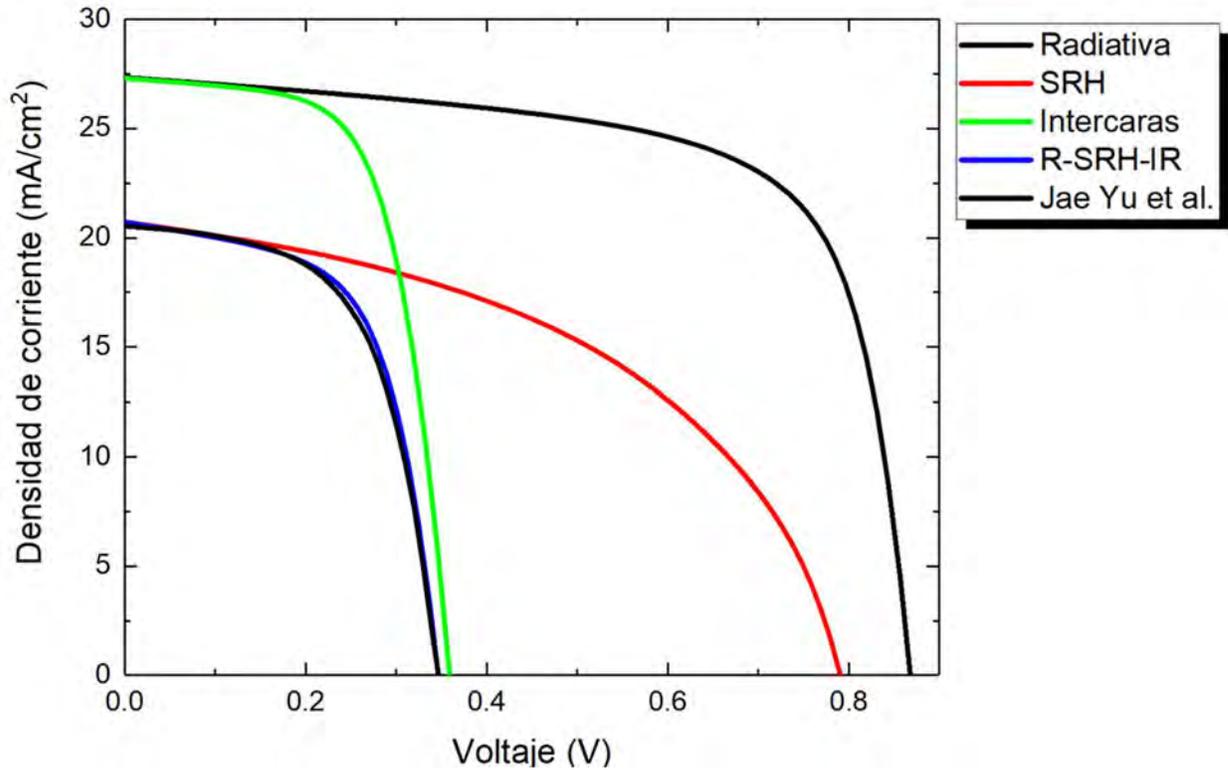


Figura 37. Análisis general de rol de los distintos mecanismos de recombinación en el comportamiento de la curva J-V de la celda solar.

Adicional a esta comparación, de manera más clara se muestran los valores exactos de las características optoelectrónicas de las celdas solares en cada uno de los sistemas establecidos en la tabla 11. En esta tabla se observa como los valores de las características optoelectrónicas del modelo teórico completo están ligeramente por encima de los de la celda solar reportada en la literatura con una diferencia de 0.7 mV en el voltaje de circuito abierto, 0.17 mA/cm<sup>2</sup> en la densidad de corriente de corto circuito, 0.18 % en el factor de forma y 0.02 % en la eficiencia de conversión.

Celda solar	V <sub>OC</sub> (mV)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	Factor de Forma (%)	Eficiencia (%)
Radiativa (R)	868.1	27.33	68.18	16.18
Intercaras (IR)	359.1	27.30	63.82	6.26
Shockley-Read-Hall (SRH)	790.7	20.72	47.28	7.75
R-IR-SRH	346.7	20.70	60.22	4.32
Jae Yu et al.	346	20.53	60.40	4.30

Tabla 11. Tabla comparativa de los valores de las propiedades optoelectrónicas de las diferentes celdas solares.

Finalmente hay que observar el comportamiento de la curva de eficiencia cuántica de la celda solar experimental y de la reproducida por el modelo teórico. Esto busca dar fidelidad de la efectividad del modelo para reproducir las características y el comportamiento de una celda solar. Se puede observar el comportamiento de las curvas de eficiencia cuántica en comparación en la figura 38. En la figura se observa un comportamiento de la curva de la eficiencia cuántica del modelo teórico muy fiel al de la curva de la celda experimental entre los 0 nm y los 600 nm, entre los 600 nm y los 650 nm se observa una diferencia de alrededor del 2-4 %, de los 650 nm a los 800 nm prácticamente el comportamiento es idéntico. Entre los 800 nm y los 950 nm se muestra un comportamiento similar con una diferencia de a lo más 5 %. Por último, el comportamiento de ambas curvas va al 0% poco después de los 1000 nm. La información obtenida a lo largo de este análisis hace constar que el modelo teórico puede ser utilizado para reproducir el comportamiento de las celdas solares de este tipo y con ello poder predecir sus variaciones ante las distintas mejoras que se pueden realizar a este tipo de tecnología.

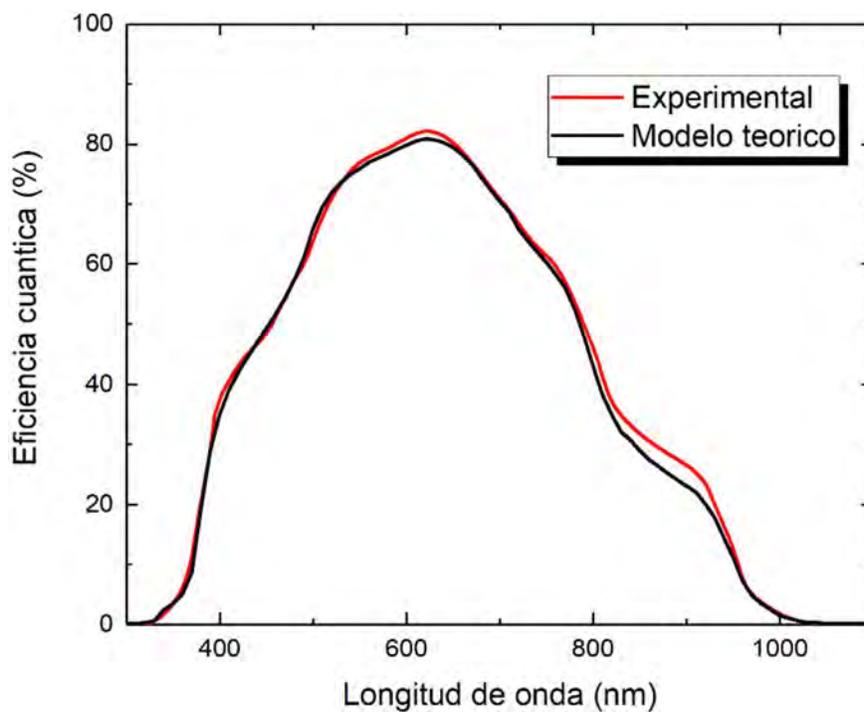


Figura 38. Comparación de las curvas de eficiencia cuántica del modelo teórico y la de la celda solar experimental.

## 5.2 Análisis del impacto de la variación de la concentración del $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ en las características optoelectrónicas de la curva J-V de la celda solar.

En vía de lograr el objetivo principal, el próximo paso a seguir es analizar el impacto que tiene la concentración de Cd y Zn en las propiedades de la celda solar. Para esto se recopilaron de la literatura los parámetros trascendentes de los diversos materiales en reportes experimentales. Estos parámetros son mostrados en la tabla 6. Para un análisis más claro los resultados de la simulación, se muestran los parámetros de las distintas celdas solares en la figura 39.

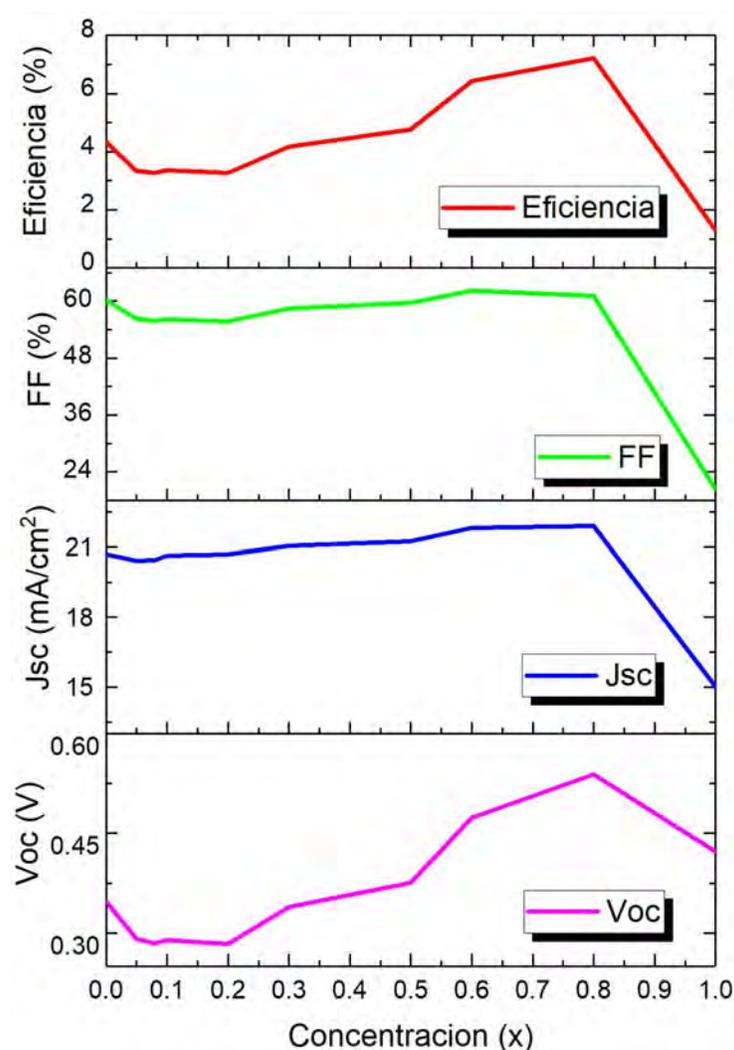


Figura 39. Características optoelectrónicas de la curva J-V y eficiencia de las celdas solares simuladas con distintas concentraciones en el ternario  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$  utilizado como ventana, cuyas propiedades fueron tomadas de reportes encontrados en la literatura.

El análisis de las características de las celdas solares muestra que para pequeñas concentraciones de Zn en el material ventana utilizado, la eficiencia de la celda disminuye. Esto ocurre debido a que la presencia de estas pequeñas concentraciones de Zn en el material disminuye los valores del  $V_{oc}$  de 346mV a menos de 300mV para concentraciones menores a  $x = 0.3$ . Sin embargo, posterior a estas concentraciones se observa un aumento en la eficiencia de conversión conforme aumenta la concentración de Zn en el ternario hasta lograr superar el 7% para valores de concentración de  $x = 0.8$ . En la celda solar con esta concentración en el ternario utilizado como material ventana se observa el mayor valor de  $J_{sc}$  y  $V_{oc}$  estando en 21.9mA/cm<sup>2</sup> y 538.8 mV, respectivamente. Para una mejor comprensión de su comportamiento, los parámetros optoelectrónicos son mostrados en la tabla 12.

Concentración (x)	$V_{oc}$ (mV)	$J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	Factor de Forma(%)	Eficiencia(%)
0	346.7	20.70	60.21	4.32
0.05	290.9	20.42	56.31	3.34
0.08	284.7	20.46	55.90	3.25
0.1	289.6	20.64	56.19	3.35
0.2	283.7	20.70	55.78	3.27
0.3	338.5	21.06	58.46	4.16
0.5	375.1	21.24	59.64	4.75
0.6	473.2	21.82	62.17	6.42
0.8	538.8	21.90	61.10	7.21
1	423.1	15.02	20.45	1.29

Tabla 12. Parámetros optoelectrónicos de las celdas solares simuladas con distintas concentraciones en el ternario  $Cd_{1-x}Zn_xS$  utilizado como ventana, cuyas propiedades fueron tomadas de reportes encontrados en la literatura.

El resultado anterior es importante para entender que cuando la cantidad de la aparición de la fase ZnS en el material ventana (valores de concentración x) es cercano al cero, disminuye la potencialidad de la celda solar. Sin embargo, al seguir aumentando esta concentración se aprecian los beneficios de la implementación del ternario en la celda solar. No obstante, no es posible apreciar

en que punto de la concentración las características optoelectrónicas son las más favorables debido a que en términos de la concentración entre  $x=0.6$  y  $x=1$  existen una gran cantidad de posibles concentraciones las cuales podrían favorecer aún mejor las características optoelectrónicas de la celda solar mejorando así la eficiencia de conversión de la misma. En este rango de concentraciones se pudo observar mediante el análisis del modelado que existen concentraciones con propiedades tales que propician el aumento de la eficiencia de conversión, observando el caso de la celda solar con material ventana el ternario  $Cd_{0.2}Zn_{0.8}S$ .

En búsqueda de una concentración con propiedades tales que el comportamiento de las características optoelectrónicas de la celda solar mejore, en el siguiente paso de la investigación se realizará una interpolación en las propiedades del material ternario. Esta interpolación se hará en las propiedades trascendentales y de interés para la simulación, que varían en función de la concentración  $x$ , entre ellas destacan la afinidad electrónica, el ancho de banda prohibida y la movilidad de los portadores de carga.

### 5.3 Análisis del impacto de la variación de la concentración interpolada del $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ en las características optoelectrónicas de la curva J-V de la celda solar.

Para el siguiente paso en la búsqueda de cumplir con los objetivos planteados para el desarrollo del presente trabajo de investigación se modelaron 21 celdas solares distintas. Estas celdas solares presentan mismo entorno y el mismo material en cada una de las películas empleadas, solo variando el material ternario utilizado como material ventana. Para los distintos materiales utilizados en el material ventana se consideró la variación de la concentración  $x$  en valores de 0.05 desde el  $x=0$  hasta el  $x=1$ . Este análisis se realizó mediante la variación de los valores de las propiedades de interés para el modelado de cada celda solar planteada.

Para realizar el análisis de cada celda solar se crea una galería de archivos que contienen la información de cada una de las películas utilizadas en la simulación. Cada uno de los archivos creados contiene información específica de la celda solar en cuestión y al realizar la simulación se obtienen el comportamiento de la curva J-V y de los parámetros optoelectrónicos. En la figura 40 se muestran las características optoelectrónicas obtenidas de la simulación de cada una de estas celdas solares. En esta figura se puede observar un comportamiento similar a la curva de eficiencia presentada por la figura 39, pero de manera más certera. De forma consistente se observa un mayor número en la eficiencia de conversión en la celda solar que emplea como material ventana el ternario de concentración  $x=0.8$  o correspondiente a la fórmula  $\text{Cd}_{0.2}\text{Zn}_{0.8}\text{S}$ .

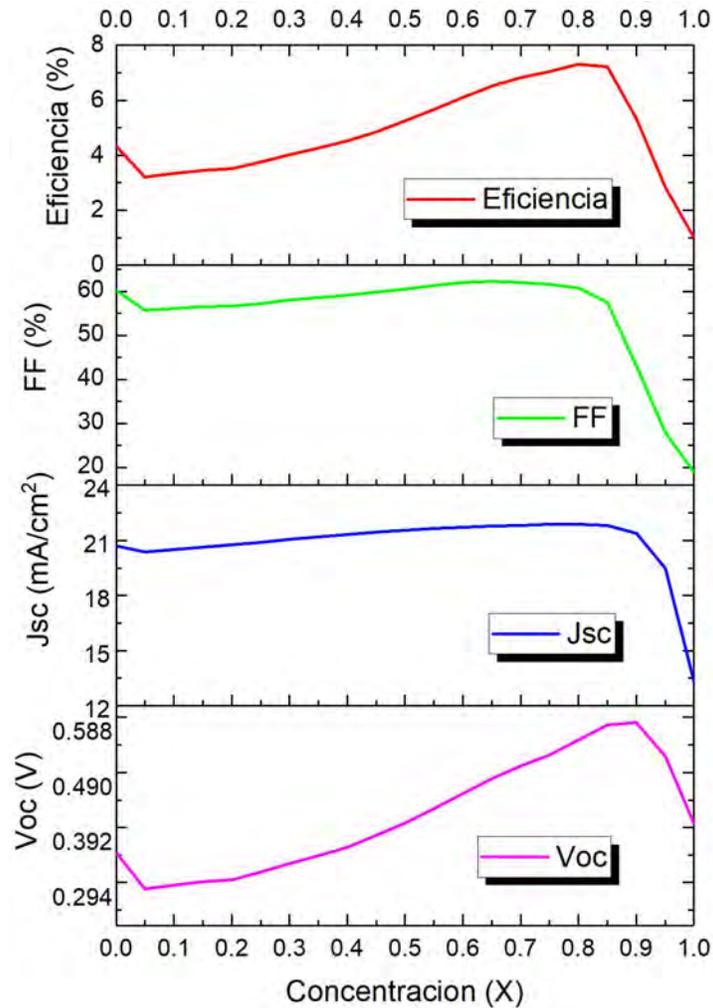


Figura 40. Características optoelectrónicas de la curva J-V y eficiencia de las celdas solares simuladas con distintas concentraciones en el ternario  $Cd_{1-x}Zn_xS$  utilizado como ventana, cuyas propiedades fueron aproximadas mediante la interpolación de los datos reportados en la literatura.

Este comportamiento se atribuye a la variación de los valores de voltaje de circuito abierto y de densidad de corriente de corto circuito de la celda solar en función de la concentración del material ternario empleado en ella. En la tabla 13 se muestran los valores de los parámetros optoelectrónicos de cada celda solar con distintas concentraciones en el material.

Concentración (x)	V <sub>oc</sub> (mV)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	Factor de Forma(%)	Eficiencia(%)
0.00	346.7	20.70	60.22	4.32
0.05	282.5	20.39	55.80	3.21
0.10	289.1	20.52	56.20	3.33
0.15	295.9	20.64	56.55	3.45
0.20	299.1	20.76	56.65	3.52
0.25	312.6	20.91	57.31	3.75
0.30	328.1	21.07	58.03	4.01
0.35	342.0	21.21	58.56	4.25
0.40	357.3	21.34	59.11	4.51
0.45	378.1	21.48	59.86	4.86
0.50	400.0	21.58	60.58	5.23
0.55	425.7	21.67	61.36	5.66
0.60	452.6	21.74	61.98	6.10
0.65	479.5	21.80	62.27	6.51
0.70	502.2	21.85	62.09	6.81
0.75	521.3	21.89	61.65	7.03
0.80	547.5	21.89	60.86	7.30
0.85	574.0	21.82	57.54	7.21
0.90	579.2	21.39	43.07	5.34
0.95	519.3	19.48	27.87	2.82
1.00	399.3	13.34	19.00	1.01

Tabla 13. Valores de las Características optoelectrónicas de la curva J-V de las celdas solares simuladas con distintas concentraciones en el ternario Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S utilizado como ventana, cuyas propiedades fueron aproximadas mediante la interpolación de los datos reportados en la literatura.

Este comportamiento de los valores de eficiencia en la celda solar también puede ser atribuido a las absorciones parasitas presentes en el CdS. Para mejor claridad y comprensión de las causas que propician este comportamiento, se analizó el impacto en la eficiencia cuántica de esta variación del material utilizado en la película ventana de la celda solar. Los resultados de este análisis son mostrados en la figura 41. En esta figura se observa como en la zona de la curva de eficiencia cuántica donde la absorción parasita del CdS está presente aumenta conforme la concentración de este material disminuye en el material ternario.

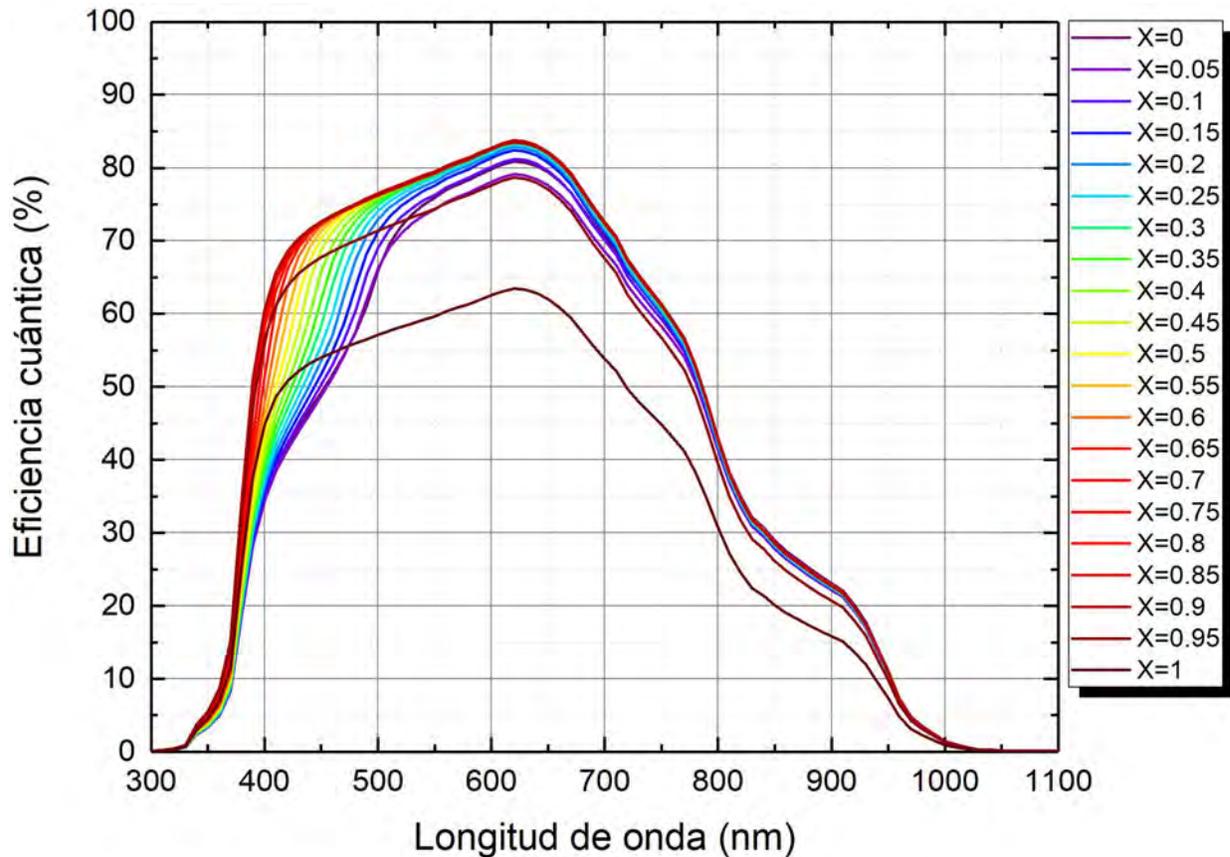


Figura 41. Curvas de eficiencia cuántica de las celdas solares simuladas con distintas concentraciones en el ternario  $Cd_{1-x}Zn_xS$  utilizado como ventana, cuyas propiedades fueron aproximadas mediante la interpolación de los datos reportados en la literatura.

La zona de mayor importancia en la contribución de la eficiencia cuántica al mejorar las características del material utilizado como ventana en este tipo de celdas solares se encuentra entre los 350nm y los 500nm. Para el objetivo principal de este trabajo de investigación que es enfocado al mejorar el valor de eficiencia mediante la búsqueda de una concentración en el ternario sulfuro de cadmio-zinc, la región de la eficiencia cuántica que se esperaba alterar es la que se observa que es modificada.

El comportamiento de la curva de eficiencia cuántica en esta zona se observa que al aumentar la concentración del ternario  $Cd_{1-x}Zn_xS$  desde  $x=0$  hasta  $x=0.8$  incrementa hasta llegar al 60% en los 400nm y por encima del 75% en 500nm. Para mayores valores en la concentración se observa como el comportamiento

completo de la curva de eficiencia cuántica se ve disminuido, afectando así los valores de eficiencia de conversión de esas celdas solares.

Con la intención de mejorar los argumentos que se tienen hasta el momento para determinar un valor de concentración  $x$  para el ternario  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$  para el cual la eficiencia de conversión en una misma celda solar del tipo  $\text{SnS}/\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$  sea mayor y a su vez tener la certeza de que propicia este comportamiento se analizará a continuación los diagramas de bandas de la celda solar estudiada. En la figura 42 se muestran los diagramas de las bandas de conducción y de valencia de las películas de interés de la celda solar a) experimental de  $x=0$  y b) la simulada con  $x=0.08$ . Se puede observar en la figura 42 a), que en la región del material que corresponde al material ventana, la distancia energética que poseen los electrones y los huecos generados en la banda de conducción y en la banda de valencia respectivamente, es de alrededor de  $0.5\text{eV}$ , lo cual facilita la recombinación en esta región. Además, en la región del material ventana del diagrama de bandas de la celda solar con  $x=0$  se muestra una fluctuación en la energía, lo cual es una obstrucción del camino que deben seguir los portadores de carga para ser colectados.

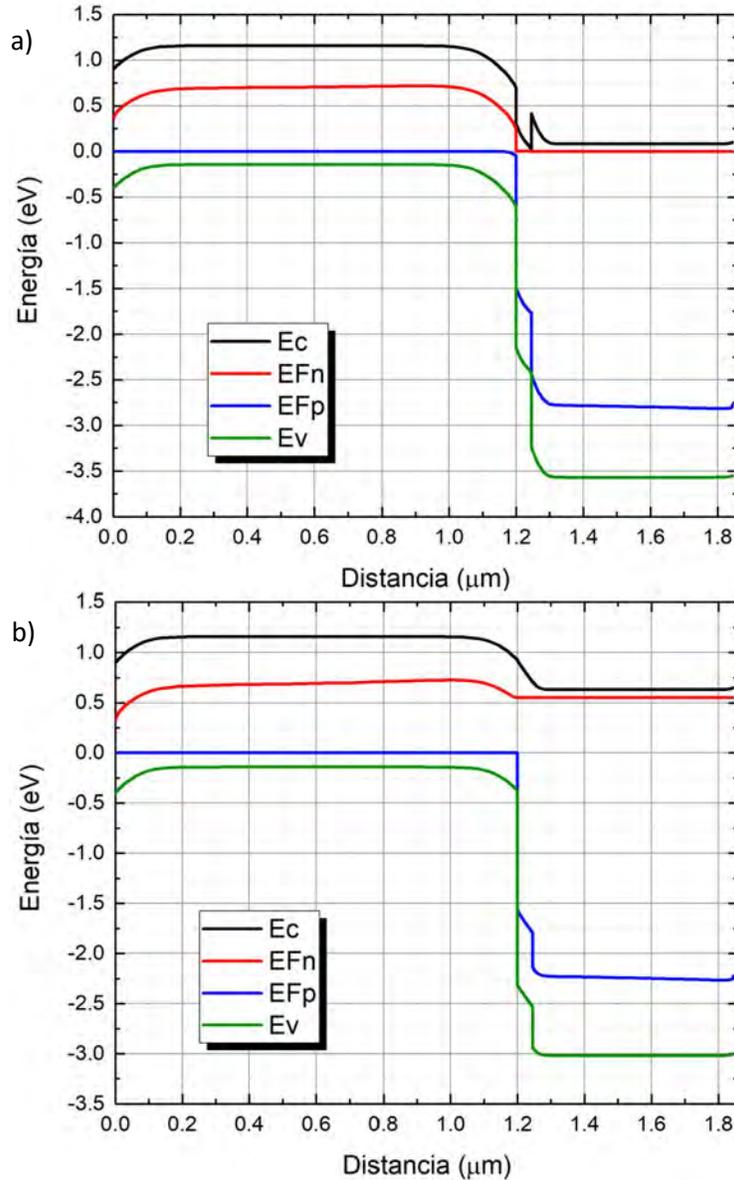


Figura 42. Diagrama de bandas de las celdas solares con distinta concentración en el material ternario  $Cd_{1-x}Zn_xS$ : a)  $x=0$ , b)  $x=0.8$ .

Por otro lado, en la figura 42 b) se observa como la distancia energética en la intercara del material  $SnS/Cd_{0.2}Zn_{0.8}S$  es de poco menos del doble que en el otro caso y en este diagrama el camino que recorren los portadores de carga para ser colectados no presenta la dificultad presentada anteriormente. Con estos argumentos, los valores de las características J-V y eficiencia de conversión presentadas por la celda solar utilizando la concentración  $x=0.8$  en el ternario como material ventana es posible llegar a la conclusión de que es la concentración

óptima para utilizar en celdas solares de película delgada de este tipo a mismas condiciones.

Algunas de las condiciones que podría alterar el comportamiento de las características J-V con respecto de la concentración del ternario serían el espesor de la película y la concentración de donores en el material. El estudio del impacto de la variación de estas propiedades en las características de la celda solar se realizó como continuación del trabajo de investigación presentado en esta tesis.

## 5.4 Impacto del espesor $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ en las características optoelectrónicas de la celda solar.

Otro de los objetivos particulares del presente trabajo de investigación es el análisis del impacto del espesor de la capa ventana usada en las celdas solares con distintas concentraciones en el ternario. Para este análisis se requirió hacer uso de la biblioteca antes creada y realizar la simulación de cada una de las celdas con diferentes concentraciones en el ternario en valores de espesor desde los 20nm hasta los 150nm. Estos valores se tomaron de la literatura donde reportan haber obtenido dichos espesores.

En la figura 43 se muestra el gráfico de contorno del  $V_{oc}$  en función de la concentración del material ternario utilizado y el espesor de esta película en la celda solar. En esta figura se observa que para menores espesores en el material a una misma concentración (menor de 0.3 y mayor de 0.9) se presentan mayores valores de  $V_{oc}$ . Los valores más altos de  $V_{oc}$  se observan en la región comprendida entre  $x=0.75$  y  $x=0.90$ , y espesores de 45nm a 140nm. El comportamiento de esta característica en función del espesor se mantiene relativamente constante para composiciones en el rango del  $x=0.35$  al  $x=0.6$ .

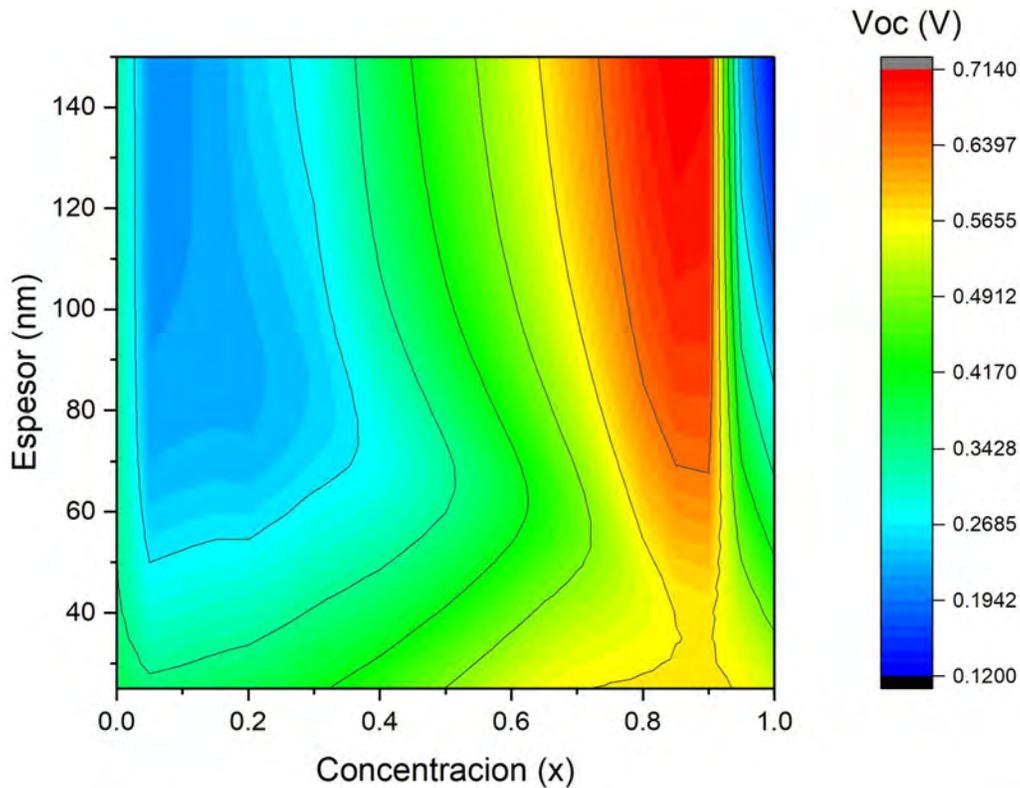


Figura 43. Gráfico de contorno de la influencia del espesor y la concentración del  $Cd_{1-x}Zn_xS$  en el voltaje de circuito abierto de la celda solar.

Si bien uno de los objetivos en el desarrollo de celdas solares en busca de aumentar los valores de eficiencia de conversión es tener mayores valores de  $V_{oc}$  y  $J_{sc}$ , no hay que perder de vista aspectos como la longitud de difusión de los portadores y el coeficiente de absorción del material ventana. Estas dos propiedades requieren que para tener altos valores de eficiencia de conversión se tengan menores valores en el espesor del material ventana.

En la figura 44 se presenta el gráfico de contorno de la densidad de corriente de corto circuito en función del espesor y la concentración del material ventana en la celda solar. Un comportamiento que persistente en el análisis a través de las diversas concentraciones del material ternario es que para mayores valores de espesor se observan menores valores de corriente. Esto es debido a que para películas ventana más gruesas, menor cantidad de fotones alcanzaran a llegar a la región del absorbedor para a su vez contribuir en la generación de pares electrón-hueco y con ello una mayor generación de corriente.

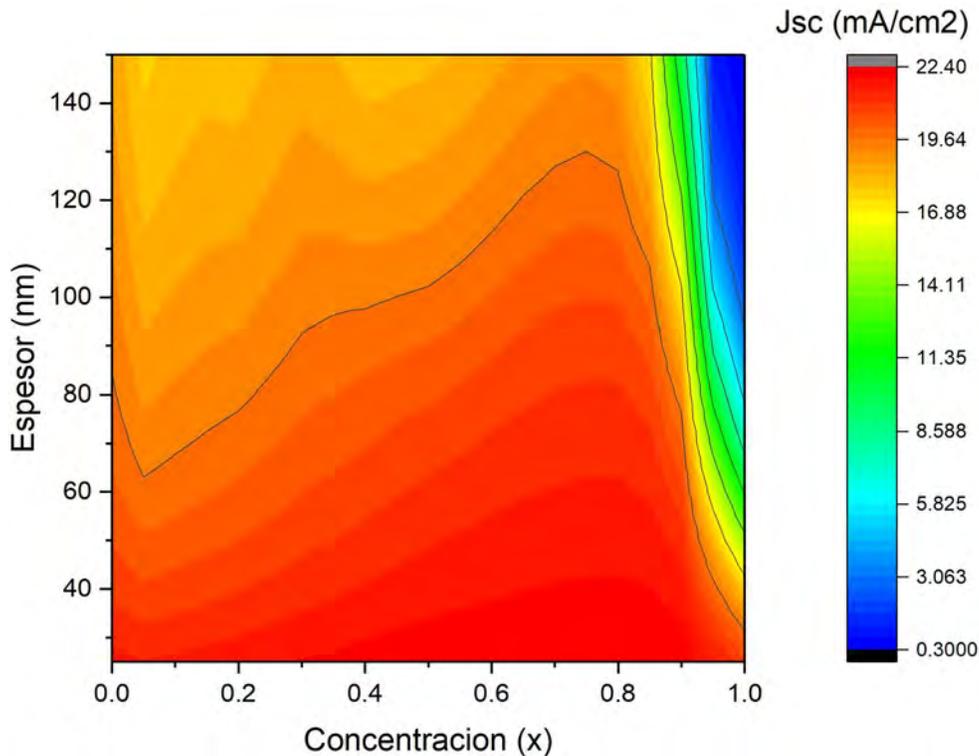


Figura 44. Gráfico de contorno de la influencia del espesor y la concentración del  $Cd_{1-x}Zn_xS$  en la densidad de corto circuito de la celda solar.

Se puede apreciar también en esta figura que existe una zona de rojo intenso para menores valores de espesor, la cual aumenta cuando los valores de concentración se acercan al  $x=0.8$  y posterior a este, esta zona se disipa. Esto muestra que para valores de concentración en el material ternario  $Cd_{1-x}Zn_xS$  entre  $x=0.6$  y  $x=0.8$  es menor la necesidad de películas más finas que 60-70nm para la generación de corriente.

Por otro lado, está la característica J-V nombrada como el factor de forma, la cual es crucial para los valores de eficiencia de conversión de una celda solar. En la figura 45 se muestra el gráfico de contorno del factor de forma en función de la concentración y el espesor del material ternario. En este gráfico se muestra un contraste muy marcado entre los valores de esta característica para las celdas solares con material ventana de concentración menor y mayor de  $x=0.85$ .

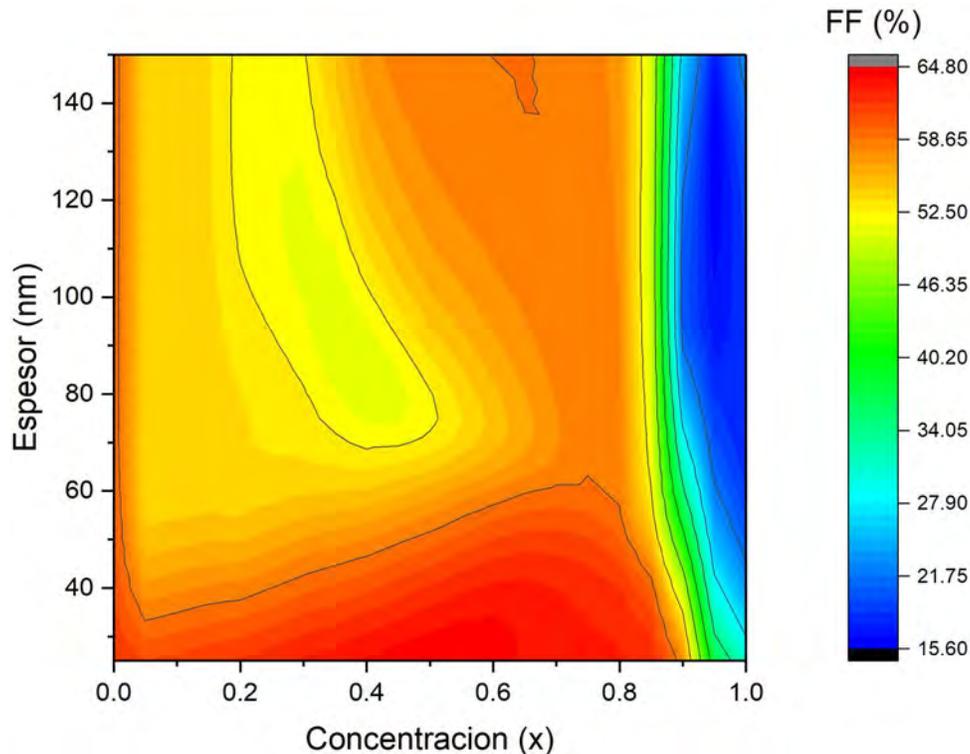


Figura 45. Gráfico de contorno de la influencia del espesor y la concentración del  $Cd_{1-x}Zn_xS$  en el factor de forma de la celda solar.

Esta zona se muestra dividida de forma vertical, donde para los valores menores a  $x=0.85$  el factor de forma es hasta 40% superior que para las celdas con material ternario de concentración mayor a  $x=0.85$ . Por otra parte, es necesario hacer énfasis que para menores valores de concentración partiendo del  $x=0.85$  se necesitan películas más finas para alcanzar los mismos valores de factor de forma según este análisis.

La característica más importante a estudiar para el interés del trabajo desarrollado en esta tesis es la eficiencia de conversión, si bien esta característica comúnmente tiene un comportamiento fiel al comportamiento del  $V_{oc}$ , la  $J_{sc}$  y el factor de forma, en ocasiones resultan comportamientos contraintuitivos. En la figura 46 se muestra el gráfico de contorno de la eficiencia de conversión de la celda solar en función del espesor y la concentración del material ternario utilizado como ventana en ella. En esta gráfica se observa como los mayores valores de eficiencia son encontrados para menores valores de espesor, esto debido a que menores valores de espesor de material ventana son necesarios para que se

tenga que una mayor cantidad de fotones lleguen a poder ser absorbidos por el material tipo p en este tipo de tecnologías. No obstante, se observa que los mayores valores de eficiencia de conversión, descritos en este gráfico por la zona roja, se encuentran alrededor de una concentración de  $x=0.8$ .

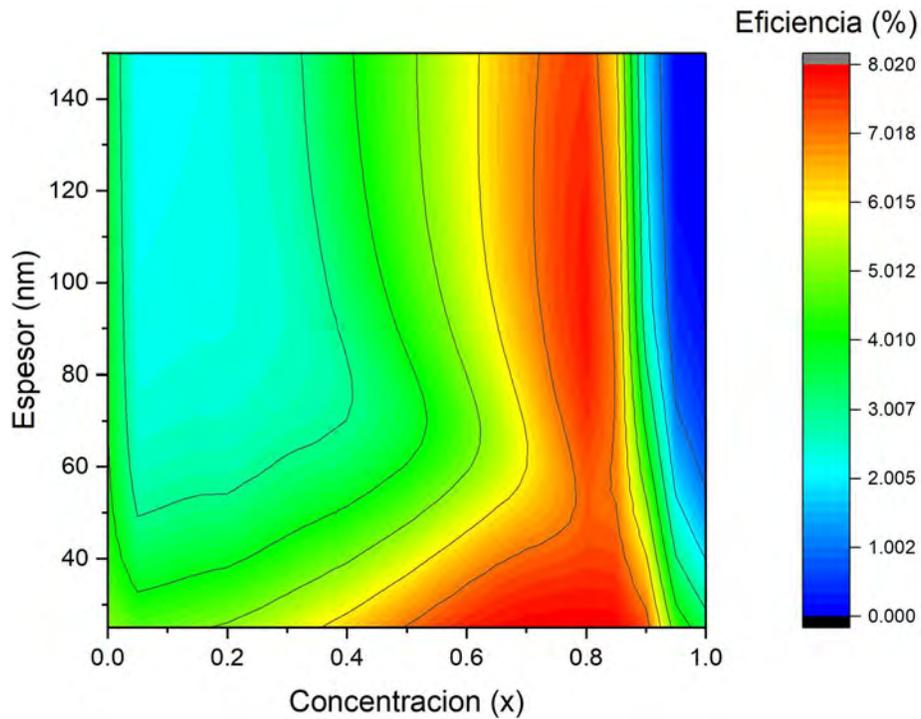


Figura 46. Gráfico de contorno de la influencia del espesor y la concentración del  $Cd_{1-x}Zn_xS$  en la eficiencia de conversión de la celda solar.

Este análisis resulta útil para determinar que el uso del material ternario  $Cd_{1-x}Zn_xS$  ayuda a aumentar la eficiencia de conversión en celdas solares de tipo SnS/CdS como sustitución del CdS como material ventana. Además, se puede decir que las mejores características que propician mayores valores de eficiencia en este tipo de celdas se encuentran alrededor de un valor de concentración de  $x=0.8$ .

## 5.5 Concentración de donores del $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ y su impacto en la potencialidad de la celda solar.

En una celda solar los portadores de carga presentes en un material tipo p predominantes son los huecos, así como en un semiconductor tipo n son los electrones. Estos electrones y huecos en los materiales extrínsecos en el estudio de semiconductores también se les conoce como donores y aceptores respectivamente, debido a que un hueco puede aceptar en él un electrón y a su vez un donador puede ser donado de un material. En este caso la película de interés es un material tipo n por lo que el estudio de la concentración de portadores en el material es en realidad sobre la concentración de donores en él.

Para el estudio del impacto de la concentración de donores en las características J-V de la celda solar se utilizó una variación en esta concentración desde los  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  hasta los  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  en cada uno de los dispositivos con los distintos ternarios. Esta variación se hizo con todas las celdas solares simuladas antes buscando si en función de la concentración de donores el comportamiento de las características cambia.

En la figura 47 se muestra el gráfico de contorno del  $V_{oc}$  en función de la concentración de donores y la concentración en el material ternario. El comportamiento de esta característica es constante hasta valores de alrededor de  $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Para mayores valores de la concentración de donores en el material se observa un aumento en el voltaje de circuito abierto en cada una de las celdas solares excepto en las situadas en la región entre  $x=0.85$  y  $x=0.9$ . Para estas celdas solares la concentración de donores no afecta en los valores de la característica analizada.

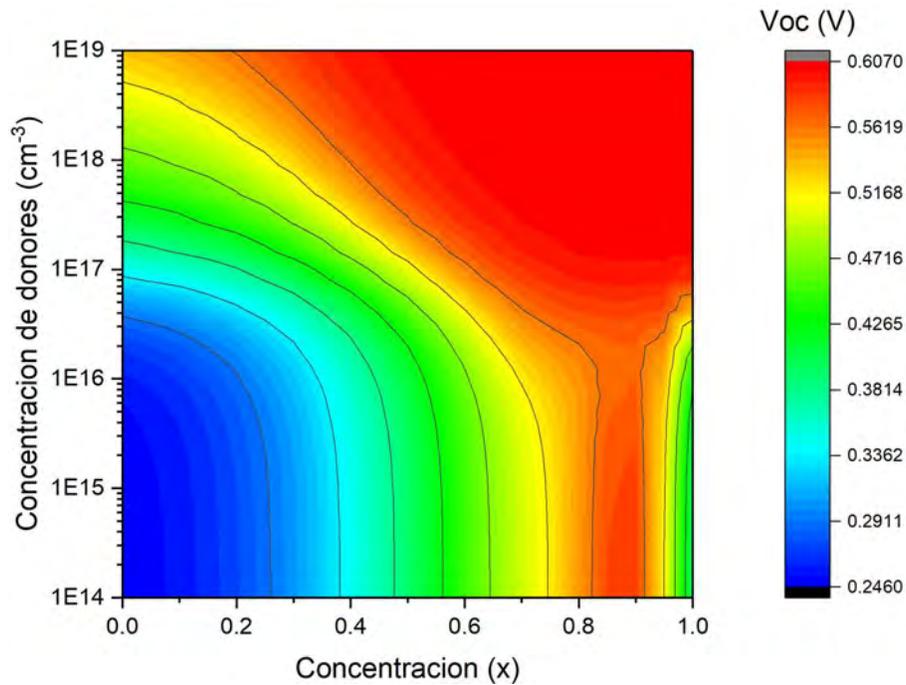


Figura 47. Gráfico de contorno de la influencia de la concentración de donores y la concentración estequiométrica en el  $Cd_{1-x}Zn_xS$  en el voltaje de circuito abierto de la celda solar.

Un comportamiento similar al presentado por el  $V_{oc}$  se observó al analizar el comportamiento de la densidad de corriente de corto circuito de las celdas solares con distintos ternarios como material ventana. El gráfico de contorno de este estudio se muestra en la figura 48. A diferencia del estudio del impacto de la concentración de donores en el  $V_{oc}$ , en la  $J_{sc}$  para las concentraciones de alrededor de  $x=0.85$  se observa un aumento con el aumento de la concentración de donores desde los  $21 \text{ mA/cm}^2$  hasta alrededor de los  $24 \text{ mA/cm}^2$ . Esta característica llega a su máximo valor en una concentración de donores de  $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  para las celdas solares de concentración en el ternario mayores a  $x=0.7$ .

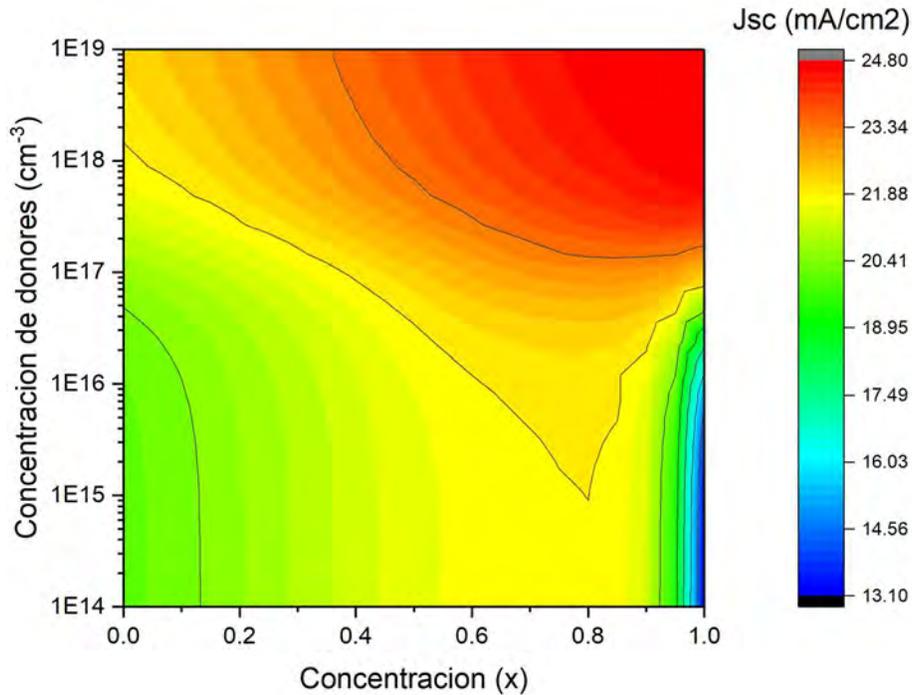


Figura 48. Gráfico de contorno de la influencia de la concentración de donores y la concentración estequiométrica en el  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$  en la densidad de corriente de corto circuito de la celda solar.

En la figura 49 se muestra el gráfico de contorno del factor de forma de la curva J-V en función de la concentración de donores y la concentración estequiométrica del material ternario. El factor de forma de la curva J-V de la celda solar es afectado por la concentración de donores de manera similar, se observa un comportamiento constante hasta una concentración de alrededor de  $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Posterior a este valor se ve un aumento de hasta valores de alrededor de 64% en todas las celdas solares con distintas concentraciones en el material ternario.

El comportamiento de la eficiencia de conversión en una celda solar es resultado de las 3 características antes analizadas. Por esto es de esperarse que si para bajos valores de concentración de donores, los valores de  $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$  y factor de forma de las distintas celdas solares permanecieron constantes, la eficiencia de conversión también lo hará.

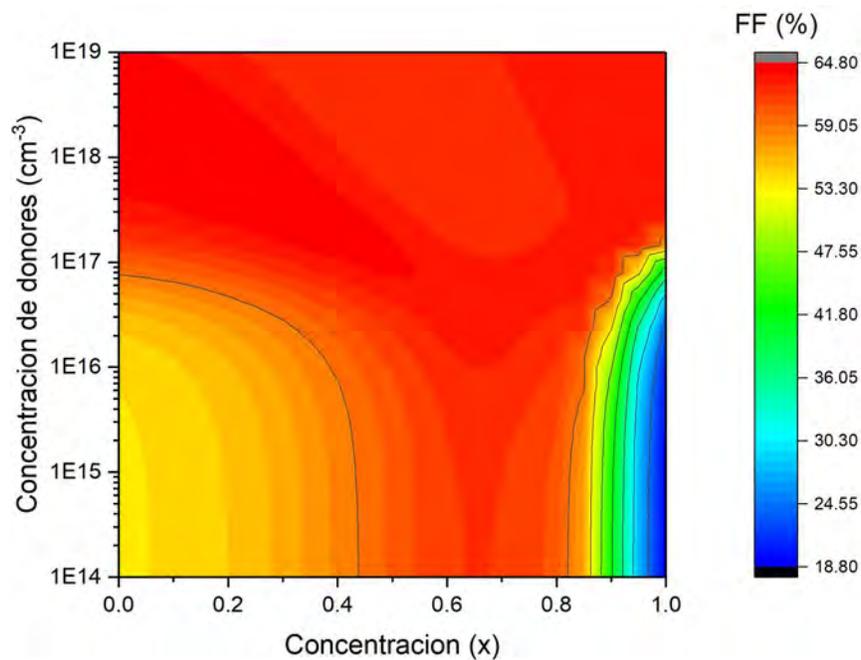


Figura 49. Gráfico de contorno de la influencia de la concentración de donores y la concentración estequiométrica en el  $Cd_{1-x}Zn_xS$  en el factor de forma de la celda solar.

En la figura 50 se muestra el gráfico de contorno de la eficiencia de conversión de las celdas solares con distintas concentraciones del material ternario en función de la concentración de donores en esta película. Los mayores valores de eficiencia de conversión en este gráfico de contorno se aprecian en la zona comprendida entre una concentración de donores de  $1.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  y  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , alrededor de la concentración del ternario de  $x=0.8$ .

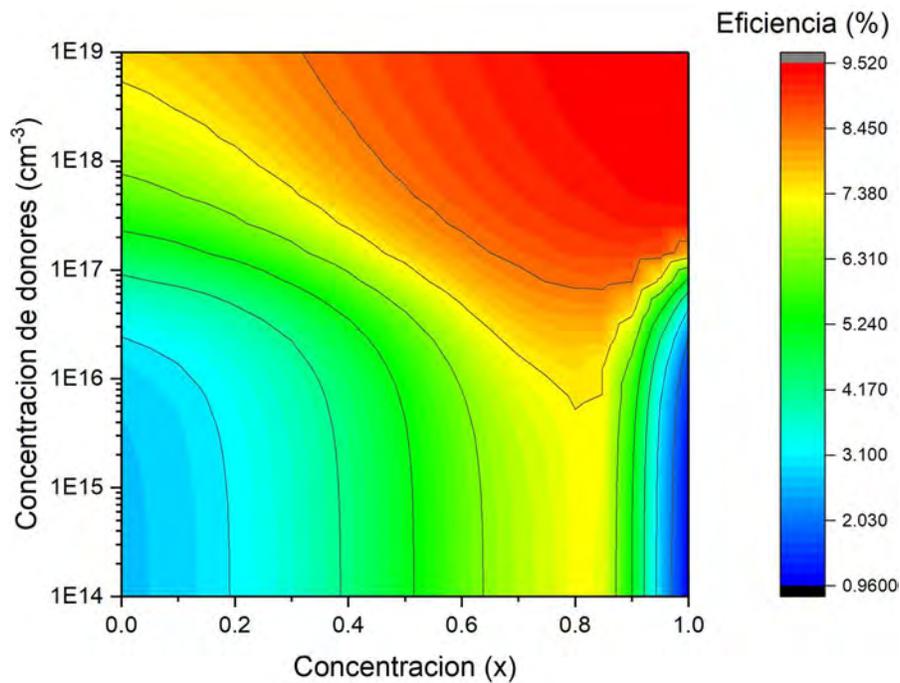


Figura 50. Gráfico de contorno de la influencia de la concentración de donores y la concentración estequiométrica en el  $Cd_{1-x}Zn_xS$  en la eficiencia de conversión de la celda solar.

Para una eficiencia de conversión máxima se puede establecer un valor óptimo de concentración de donores en el material de la celda solar ventana de  $1.45 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Esta es la mínima concentración de donores en una de estas celdas solares que logra una eficiencia de conversión máxima, y es lograda en la celda solar del tipo SnS/ $Cd_{1-x}Zn_xS$  a un espesor de 90nm de este material.

## 5.6 Comparación de las propiedades optoelectrónicas entre las celdas solares con CdS y Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S como material ventana.

Para poder magnificar la importancia del presente trabajo de investigación y el logro que representa es importante realizar la comparación de las características J-V de la celda solar original con las características después de realizar estos cambios. Cabe recalcar que para este trabajo de simulación no se supuso una mejora de ningún tipo en el material absorbedor, el óxido conductor transparente, en la intercara p-n ni en los ninguno de los contactos. Los resultados responden únicamente a la implementación de una película de material ternario Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S de concentración x=0.8 en lugar del material ventana originalmente utilizado (CdS) y un aumento a  $1.45 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$  de la concentración de donores del material.

En la figura 51 se muestra un gráfico comparativo entre las curvas J-V de las celdas solares experimental, con material ternario x=0.8 y la celda con material ternario con una concentración de donores de  $1.45 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ . La curva roja corresponde a la celda solar reportada en la literatura, la verde corresponde a la celda solar con el ternario Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S con x=0.8 sustituyendo al CdS como material ventana y la curva azul es la curva característica de la celda solar con el ternario Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S con x=0.8 y una concentración de donores de  $1.45 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ . Al sustituir el CdS en la celda solar por el material ternario se logró aumentar el V<sub>oc</sub> desde alrededor de 350mV hasta cerca de los 550mV, después de aumentar la concentración de donores en el material ventana esta característica llego hasta poco más de los 600mV.

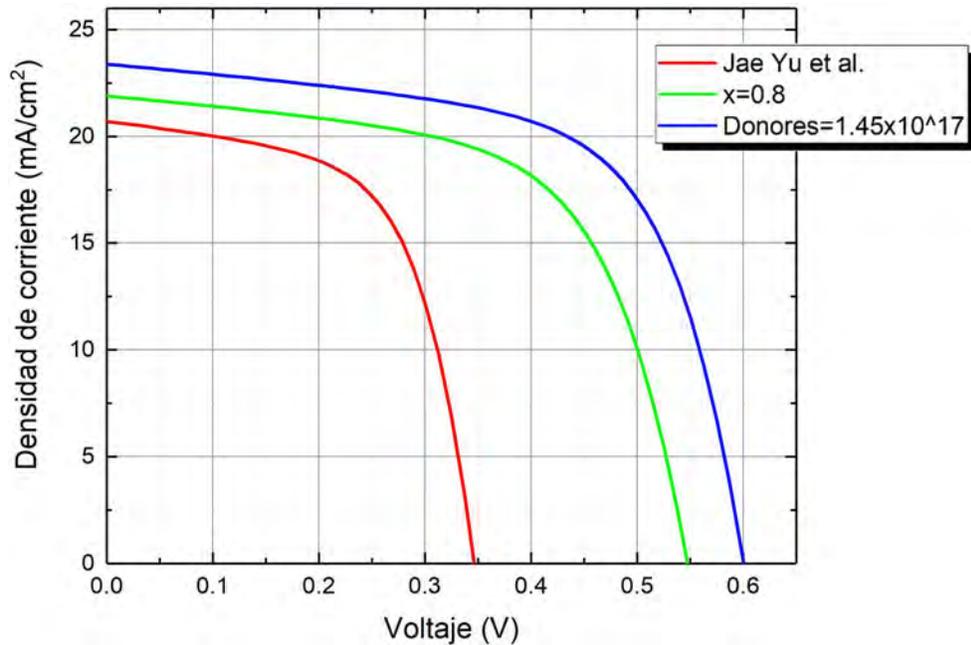


Figura 51. Comparación de las curvas J-V de las celdas solares: Experimental (reportada en la literatura), celda solar con material ventana de concentración  $x=0.8$ , y la implementación de una concentración de donores de  $1.45 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

Para un análisis más claro, los valores de los parámetros optoelectrónicos de las celdas solares se presentan para su comparación en la tabla 14. En esta tabla se puede observar que después de sustituir el CdS por el ternario y aumentar la concentración de donores se logró aumentar la  $J_{sc}$  desde un valor de  $20.7 \text{ mA/cm}^2$  hasta los  $23.38 \text{ mA/cm}^2$ , y el factor de forma se aumentó ligeramente de  $60.22\%$  hasta  $62.95\%$ . Con estos cambios en las propiedades del material ventana y como consecuencia de la mejora en las características J-V de la celda solar se logró llevar la eficiencia de su valor reportado en la literatura de  $4.32\%$  hasta un valor de  $8.84\%$ .

Celda solar	$V_{oc}(mV)$	$J_{sc}(mA/cm^2)$	Factor de Forma (%)	Eficiencia (%)
$x=0$	346.7	20.70	60.22	4.32
$x=0.8$	547.5	21.89	60.86	7.29
$x=0.8$ ; Don.	600.3	23.38	62.95	8.84

Tabla 14. Comparación de los valores de la característica J-V de las celdas solares: Experimental (reportada en la literatura), celda solar con material ventana de concentración  $x=0.8$ , y la implementación de una concentración de donores de  $1.45 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

El resultado del aumento en la eficiencia de conversión de la celda solar se alcanzó debido a que con los cambios pertinentes aplicados al material ventana se consiguió mejorar la eficiencia cuántica. En la figura 52 se muestra la comparación entre las curvas de eficiencia cuánticas de las celdas solares experimental, con material ternario  $\text{Cd}_{0.2}\text{Zn}_{0.8}\text{S}$  como ventana y con una concentración de donores de  $1.45 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$  como las curvas roja, verde y azul respectivamente. Se observa como al reducir la cantidad de cadmio en el material ventana de la celda solar se aumentó la curva de eficiencia cuántica en la zona desde antes de los 400nm hasta los 600nm cerca de 20%.

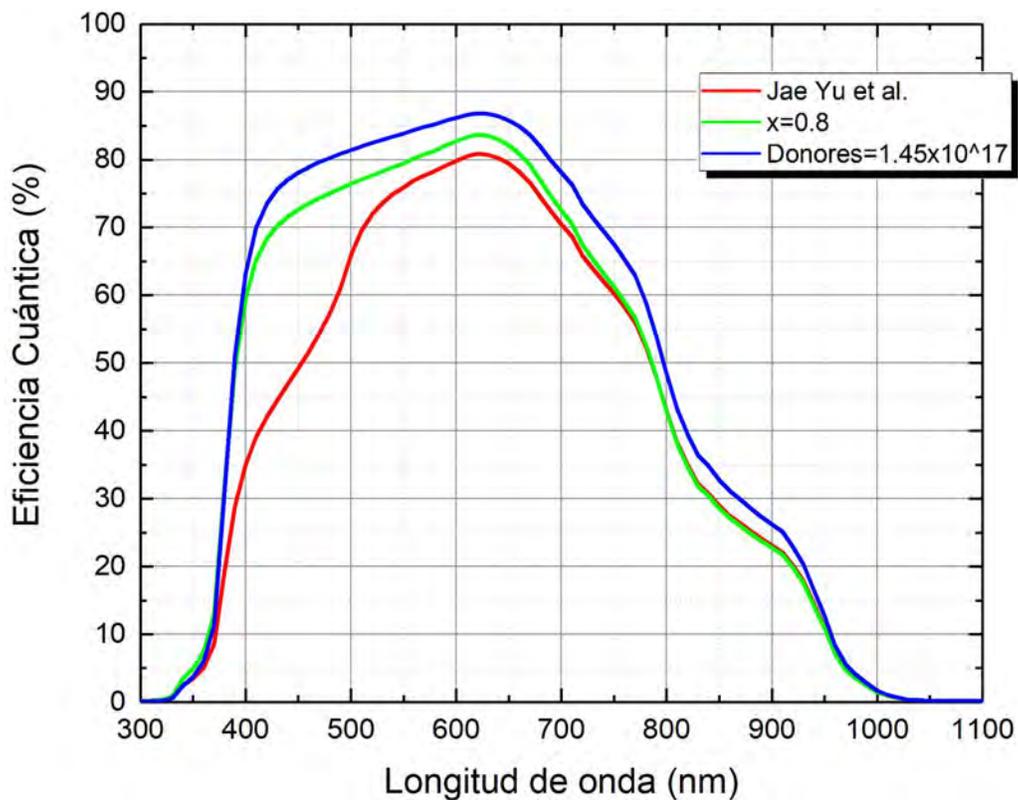


Figura 52. Comparación de la eficiencia cuántica de las celdas solares: Experimental (reportada en la literatura), celda solar con material ventana de concentración  $x=0.8$ , y la implementación de una concentración de donores de  $1.45 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ .

## 5.7 Conclusiones.

Un aspecto importante a resaltar del presente trabajo de investigación es que se consiguió demostrar que la hipótesis era cierta. Además, esto se alcanzó mediante el cumplimiento de los objetivos particulares y general propuestos desde el protocolo de tesis.

Se logró demostrar que mediante el uso del ternario  $\text{Cd}_{0.2}\text{Zn}_{0.8}\text{S}$  es posible aumentar la eficiencia de conversión en una celda solar del tipo SnS/CdS reportada en la literatura desde los 4.32% hasta los 8.84%. Este resultado se logró mediante el incremento de la eficiencia cuántica en la región que tiene absorciones parásitas el CdS (400nm – 500nm) desde un valor de alrededor de 40% hasta cerca de los 80%, y con ello a su vez se incrementó el valor de densidad de corriente de corto circuito de 20.7 mA/cm<sup>2</sup> a 23.38 mA/cm<sup>2</sup> y el voltaje de circuito abierto de 346.7 mV a 600.3 mV. Esto a su vez reduciendo el uso de cadmio necesario para el desarrollo del dispositivo.

Un aspecto importante que me deja esta investigación es que es de suma relevancia en la elección de absorbedor y ventana en el desarrollo del diseño de una celda de película delgada tomar en cuenta el diagrama de bandas resultante.

El uso del software SCAPS 1-D es eficiente al ayudar a determinar el comportamiento de las características de una celda solar en función del uso de un material ternario donde no se conoce la concentración óptima de los constituyentes de dicho material.

## 5.8 Estudios posteriores.

Como estudios posteriores a este trabajo se propone la implementación de la metodología aplicada en este trabajo de investigación en distintas celdas solares en las cuales se utilice el CdS como material ventana. Esto con el fin de poder determinar la concentración del material ternario en las cuales para esos tipos de dispositivos la eficiencia aumente o al menos se mantenga, pero buscando reducir el uso de cadmio en el desarrollo del material. Una de las celdas solares que se ha observado para aplicar esta metodología es la celda de tipo SnSe/CdS. Se sabe que hay mucho potencial de lograr aumentar la eficiencia de conversión de dicha celda solar, solo hace falta encontrar la ruta de optimización adecuada.

## 6 Bibliografía

---

- [1] SENER, "Infraestructura del sistema eléctrico nacional 2022," *01 febrero 2022*, vol. 1999, no. December. pp. 1–6, 2022.
- [2] G. Carbon, "Annual change in fossil CO2 territorial emissions." [Online]. Available: <https://enactivescience.com/gcp2021/>.
- [3] Solargis, "Potencial eléctrico fotovoltaico." .
- [4] S. Lu, C. Chen, and J. Tang, "Possible top cells for next-generation Si-based tandem solar cells," *Front. Optoelectron.*, vol. 13, no. 3, pp. 246–255, 2020, doi: 10.1007/s12200-020-1050-y.
- [5] F. J. Sánchez-Rodríguez *et al.*, "The path to overcome low efficiency values in SnS solar cells: An overview on the different current recombination mechanisms," *Opt. Mater. (Amst.)*, vol. 129, p. 112559, 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2022.112559>.
- [6] A. Romeo and E. Artegiani, "Cdte-based thin film solar cells: Past, present and future," *Energies*, vol. 14, no. 6, 2021, doi: 10.3390/en14061684.
- [7] L. Mansfield, "Advanced Thin Film Core Technology: CIGS Final Technical Report (FTR)," doi: 10.2172/1874254.
- [8] S. Gharibzadeh *et al.*, "2D/3D Heterostructure for Semitransparent Perovskite Solar Cells with Engineered Bandgap Enables Efficiencies Exceeding 25% in Four-Terminal Tandems with Silicon and CIGS," *Adv. Funct. Mater.*, vol. 30, no. 19, 2020, doi: 10.1002/adfm.201909919.
- [9] M. A. Steiner *et al.*, "High Efficiency Inverted GaAs and GaInP/GaAs Solar Cells With Strain-Balanced GaInAs/GaAsP Quantum Wells," *Adv. Energy Mater.*, vol. 11, no. 4, pp. 1–8, 2021, doi: 10.1002/aenm.202002874.
- [10] S. Sengupta, R. Aggarwal, and M. Raula, "A review on chemical bath deposition of metal chalcogenide thin films for heterojunction solar cells," *J. Mater. Res.*, 2022, doi: 10.1557/s43578-022-00539-9.
- [11] H. C. Urey, "The abundances of the elements," *Phys. Rev.*, vol. 88, no. 2, pp. 248–252, 1952, doi: 10.1103/PhysRev.88.248.
- [12] T. Bur, Y. Crouau, A. Bianco, L. Gandois, and A. Probst, "Toxicity of pb and of pb/cd combination on the springtail folsomia candida in natural soils: Reproduction, growth and bioaccumulation as indicators," *Sci. Total Environ.*, vol. 414, pp. 187–197, 2012, doi: 10.1016/j.scitotenv.2011.10.029.
- [13] J. A. Andrade-Arvizu, M. Courel-Piedrahita, and O. Vigil-Galán, "SnS-based thin film solar cells: perspectives over the last 25 years," *J. Mater. Sci. Mater. Electron.*, vol. 26, no. 7, pp. 4541–4556, Jul. 2015, doi: 10.1007/s10854-015-3050-z.
- [14] S. Rühle, "Tabulated values of the Shockley-Queisser limit for single junction solar cells," *Sol. Energy*, vol. 130, pp. 139–147, 2016, doi: 10.1016/j.solener.2016.02.015.
- [15] I. Suzuki, "Pte Us Pt," *Nanotechnology*, pp. 0–22, 2018.

- [16] A. Jain *et al.*, "Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation," *APL Mater.*, vol. 1, no. 1, p. 11002, 2013, doi: 10.1063/1.4812323.
- [17] N. Koteeswara Reddy, M. Devika, and E. S. R. Gopal, "Review on Tin (II) Sulfide (SnS) Material: Synthesis, Properties, and Applications," *Crit. Rev. Solid State Mater. Sci.*, vol. 40, no. 6, pp. 359–398, 2015, doi: 10.1080/10408436.2015.1053601.
- [18] J. Y. Cho *et al.*, "Achieving over 4% efficiency for SnS/CdS thin-film solar cells by improving the heterojunction interface quality," *J. Mater. Chem. A*, vol. 8, no. 39, pp. 20658–20665, 2020, doi: 10.1039/d0ta06937j.
- [19] L. Cheng, Q. Xiang, and Y. Liao, "Environmental Science," pp. 4–7, 2018, doi: 10.1039/c7ee03640j.
- [20] A. A. G. Regmi, A. R. Núñez, M. S. López, and H. Castaneda, "Comparative studies of CdS thin films by chemical bath deposition techniques as a buffer layer for solar cell applications," *J. Mater. Sci. Mater. Electron.*, no. 0123456789, 2020, doi: 10.1007/s10854-020-03024-3.
- [21] T. M. Project, "Materials Data on CdS by Materials Project," doi: 10.17188/1189751.
- [22] B. Z. Chen *et al.*, "ZnS Branched Architectures as Optoelectronic Devices and Field Emitters," pp. 2376–2380, 2010, doi: 10.1002/adma.200903643.
- [23] A. Mills and S. Le Hunte, "An overview of semiconductor photocatalysis," vol. 108, no. 1997, pp. 1–35, 2000.
- [24] Z. Nh and C. H. Ch, "Shape and Phase Control of ZnS Nanocrystals : Template Fabrication of Wurtzite ZnS Dendrites from a Lamellar Molecular Precursor," no. 96, pp. 296–300, 2002.
- [25] D. Jing and L. Guo, "A Novel Method for the Preparation of a Highly Stable and Active CdS Photocatalyst with a Special Surface Nanostructure," no. 2, pp. 11139–11145, 2006.
- [26] F. Göde and S. Ünlü, "Materials Science in Semiconductor Processing Synthesis and characterization of CdS window layers for PbS thin film solar cells," *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 90, no. July 2018, pp. 92–100, 2019, doi: 10.1016/j.mssp.2018.10.011.
- [27] M. Isik, H. H. Gullu, S. Delice, M. Parlak, and N. M. Gasanly, "Materials Science in Semiconductor Processing Structural and temperature-dependent optical properties of thermally evaporated CdS thin films," *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 93, no. November 2018, pp. 148–152, 2019, doi: 10.1016/j.mssp.2019.01.001.
- [28] J. Y. Cho, S. Sinha, M. G. Gang, and J. Heo, "Controlled thickness of a chemical-bath-deposited CdS buffer layer for a SnS thin film solar cell with more than 3% efficiency," *J. Alloys Compd.*, vol. 796, pp. 160–166, 2019, doi: 10.1016/j.jallcom.2019.05.035.
- [29] E. T. Efaz1 *et al.*, "A review of primary technologies of thin-film solar cells," *Eng. Res. Express*, vol. 3, no. 3, 2021, doi: 10.1088/2631-8695/ac2353.
- [30] W. Mahmood, J. Ali, I. Zahid, and A. Thomas, "Optik Optical and electrical studies of CdS thin films with thickness variation," *Opt. - Int. J. Light Electron Opt.*, vol. 158, pp. 1558–1566, 2018, doi: 10.1016/j.ijleo.2018.01.045.
- [31] S. Butt, N. A. Shah, A. Nazir, Z. Ali, and A. Maqsood, "Influence of film thickness and In-

- doping on physical properties of CdS thin films," *J. Alloys Compd.*, vol. 587, pp. 582–587, 2014, doi: 10.1016/j.jallcom.2013.10.221.
- [32] S. S. Hegde, A. G. Kunjomana, M. Prashantha, C. Kumar, and K. Ramesh, "Photovoltaic structures using thermally evaporated SnS and CdS thin films," *Thin Solid Films*, vol. 545, pp. 543–547, 2013, doi: 10.1016/j.tsf.2013.08.078.
- [33] W. Mahmood and N. A. Shah, "CdZnS thin films sublimated by closed space using mechanical mixing: A new approach," *Opt. Mater. (Amst).*, vol. 36, no. 8, pp. 1449–1453, 2014, doi: 10.1016/j.optmat.2013.09.003.
- [34] S. Kumar, P. Sharma, and V. Sharma, "CdS nanofilms: Synthesis and the role of annealing on structural and optical properties," *J. Appl. Phys.*, vol. 111, no. 4, 2012, doi: 10.1063/1.3688042.
- [35] A. Jain *et al.*, "Commentary: The materials project: A materials genome approach to accelerating materials innovation," *APL Mater.*, vol. 1, no. 1, 2013, doi: 10.1063/1.4812323.
- [36] X. Yu *et al.*, "Numerical simulation analysis of effect of energy band alignment and functional layer thickness on the performance for perovskite solar cells with Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S electron transport layer," *Mater. Res. Express*, vol. 7, no. 10, 2020, doi: 10.1088/2053-1591/abbf12.
- [37] A. Bouich, S. Ullah, H. Ullah, M. Mollar, B. Marí, and M. E. Touhami, "Electrodeposited CdZnS/CdS/CIGS/Mo: Characterization and Solar Cell Performance," *Jom*, vol. 72, no. 2, pp. 615–620, 2020, doi: 10.1007/s11837-019-03951-5.
- [38] M. M. Hadi and K. A. Mohammed, "Investigation of the role of annealing time in the optical, structural and morphological properties of ternary CdZnS thin films prepared by chemical bath deposition," *Chalcogenide Lett.*, vol. 19, no. 4, pp. 277–283, 2022, doi: 10.15251/CL.2022.194.277.
- [39] Z. X. W. L. H. B. Z. Y. et al. Li Z Li Y, "synthesis and optical property studies of monodisperse," *Systematic*, doi: <https://doi.org/10.1166/sam.2017.2352>.
- [40] M. Chen, P. Wu, Y. Zhu, S. Yang, Y. Lu, and Z. Lin, "Enhanced photocatalytic H<sub>2</sub> production activity of CdZnS with stacking faults structure assisted by ethylenediamine and NiS," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 43, no. 24, pp. 10938–10949, 2018, doi: 10.1016/j.ijhydene.2018.04.218.
- [41] F. Baig, Y. H. Khattak, B. Marí, S. Beg, S. R. Gillani, and A. Ahmed, "Mitigation of interface recombination by careful selection of ETL for efficiency enhancement of MASnI<sub>3</sub> solar cell," *Optik (Stuttg.)*, vol. 170, pp. 463–474, 2018, doi: 10.1016/j.ijleo.2018.05.135.
- [42] T. N. Fridolin, D. K. G. Maurel, G. W. Ejuh, T. T. Bénédicte, and N. J. Marie, "Highlighting some layers properties in performances optimization of CIGSe based solar cells: Case of Cu(In, Ga)Se–ZnS," *J. King Saud Univ. - Sci.*, vol. 31, no. 4, pp. 1404–1413, 2019, doi: 10.1016/j.jksus.2018.03.026.
- [43] S. Kumari and A. S. Verma, "Buffer layer selection for CuIn<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> based thin film solar cells," *Mater. Res. Express*, vol. 1, no. 1, 2014, doi: 10.1088/2053-1591/1/1/016202.
- [44] R. Keshav and M. G. Mahesha, "Optical and electrical characterization of vacuum deposited n-CdS/n-ZnS bilayers," *Sol. Energy*, vol. 167, no. February, pp. 172–178, 2018, doi:

10.1016/j.solener.2018.04.013.

- [45] S. Tripathi, Sadanand, P. Lohia, and D. K. Dwivedi, "Contribution to sustainable and environmental friendly non-toxic CZTS solar cell with an innovative hybrid buffer layer," *Sol. Energy*, vol. 204, no. May, pp. 748–760, 2020, doi: 10.1016/j.solener.2020.05.033.
- [46] A. Belghachi and N. Limam, "Analysis of Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S window effect on CdTe solar cells," *Proc. 2013 Int. Renew. Sustain. Energy Conf. IRSEC 2013*, pp. 5–9, 2013, doi: 10.1109/IRSEC.2013.6529654.
- [47] S. Vallisree, R. Thangavel, and T. R. Lenka, "Theoretical investigations on enhancement of photovoltaic efficiency of nanostructured CZTS/ZnS/ZnO based solar cell device," *J. Mater. Sci. Mater. Electron.*, vol. 29, no. 9, pp. 7262–7272, 2018, doi: 10.1007/s10854-018-8715-y.
- [48] S. Di Mare *et al.*, "SnS thin film solar cells: Perspectives and limitations," *Coatings*, vol. 7, no. 2, pp. 1–12, 2017, doi: 10.3390/coatings7020034.
- [49] K. J. Norton, F. Alam, and D. J. Lewis, "A Review of the Synthesis, Properties, and Applications of Bulk and Two-Dimensional Tin (II) Sulfide (SnS)," *Appl. Sci.*, vol. 11, no. 5, p. 2062, 2021, doi: 10.3390/app11052062.
- [50] M. Devika, N. K. Reddy, K. Ramesh, K. R. Gunasekhar, E. S. R. Gopal, and K. T. R. Reddy, "Influence of annealing on physical properties of evaporated SnS films," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 21, no. 8, pp. 1125–1131, 2006, doi: 10.1088/0268-1242/21/8/025.
- [51] S. Cheng and G. Conibeer, "Physical properties of very thin SnS films deposited by thermal evaporation," *Thin Solid Films*, vol. 520, no. 2, pp. 837–841, 2011, doi: 10.1016/j.tsf.2011.01.355.
- [52] K. Hartman *et al.*, "SnS thin-films by RF sputtering at room temperature," *Thin Solid Films*, vol. 519, no. 21, pp. 7421–7424, 2011, doi: 10.1016/j.tsf.2010.12.186.
- [53] R. E. Banai *et al.*, "Optical properties of sputtered SnS thin films for photovoltaic absorbers," *IEEE J. Photovoltaics*, vol. 3, no. 3, pp. 1084–1089, 2013, doi: 10.1109/JPHOTOV.2013.2251758.
- [54] A. Haddout, A. Raidou, and M. Fahoume, "A review on the numerical modeling of CdS/CZTS-based solar cells," *Appl. Phys. A Mater. Sci. Process.*, vol. 125, no. 2, p. 0, 2019, doi: 10.1007/s00339-019-2413-3.
- [55] M. A. Mughal, R. Engelken, and R. Sharma, "Progress in indium (III) sulfide (In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) buffer layer deposition techniques for CIS, CIGS, and CdTe-based thin film solar cells," *Sol. Energy*, vol. 120, pp. 131–146, 2015, doi: 10.1016/j.solener.2015.07.028.
- [56] I. M. Dharmadasa, "Review of the CdCl<sub>2</sub> treatment used in CdS/CdTe thin film solar cell development and new evidence towards improved understanding," *Coatings*, vol. 4, no. 2, pp. 282–307, 2014, doi: 10.3390/coatings4020282.
- [57] M. Green, E. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopidakis, and X. Hao, "Solar cell efficiency tables (version 57)," *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, vol. 29, no. 1, pp. 3–15, 2021, doi: 10.1002/pip.3371.
- [58] T. D. Dzhaferov, F. Ongul, and I. Karabay, "Formation of CdZnS thin films by Zn diffusion," *J. Phys. D. Appl. Phys.*, vol. 39, no. 15, pp. 3221–3225, 2006, doi: 10.1088/0022-3727/39/15/001.

- [59] J. H. Lee, W. C. Song, J. S. Yi, and Y. S. Yoo, "Characteristics of the CdZnS thin film doped by thermal diffusion of vacuum evaporated indium films," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 75, no. 1–2, pp. 227–234, 2003, doi: 10.1016/S0927-0248(02)00164-2.
- [60] R. Zellagui, H. Dehdouh, M. Adnane, M. S. Akhtar, and M. A. Saeed, "Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>S thin films deposited by Chemical Bath Deposition (CBD) method," *Optik (Stuttg.)*, vol. 207, no. February, 2020, doi: 10.1016/j.ijleo.2020.164377.
- [61] P. M. Parameshwari, "Spray Deposition and Characterization of Nanocrystalline Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S thin films," *Int. J. Nanotechnol. Appl.*, vol. 11, no. 1, pp. 45–58, 2017.
- [62] H. Uda, H. Yonezawa, Y. Ohtsubo, M. Kosaka, and H. Sonomura, "Thin CdS films prepared by metalorganic chemical vapor deposition," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 75, no. 1–2, pp. 219–226, 2003, doi: 10.1016/S0927-0248(02)00163-0.
- [63] L. S. Ravangave, U. V. Biradar, and S. D. Misal, "The effect of ionic composition on structural and optical properties of Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>S thin films grown by spray pyrolysis," *Int. J. Sci. Res. Publ.*, vol. 2, no. 6, pp. 1–5, 2012.
- [64] Y. Raviprakash, K. V. Bangera, and G. K. Shivakumar, "Preparation and characterization of Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>S thin films by spray pyrolysis technique for photovoltaic applications," *Sol. Energy*, vol. 83, no. 9, pp. 1645–1651, 2009, doi: 10.1016/j.solener.2009.06.004.
- [65] S. Rajathi, N. Sankarasubramanian, K. Ramanathan, and M. Senthamizhselvi, "Structural and optoelectronic properties of pyrolytically sprayed CdZnS thin films," *Chalcogenide Lett.*, vol. 9, no. 12, pp. 495–500, 2012.
- [66] M. Gunasekaran and M. Ichimura, "Photovoltaic cells based on pulsed electrochemically deposited SnS and photochemically deposited CdS and Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 91, no. 9, pp. 774–778, 2007, doi: 10.1016/j.solmat.2006.10.026.
- [67] V. Hernández-Calderón *et al.*, "Optimization of Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>S compound from CdS/ZnS bilayers deposited by chemical bath deposition for thin film solar cells application," *Thin Solid Films*, vol. 676, no. August 2018, pp. 100–107, 2019, doi: 10.1016/j.tsf.2019.03.003.
- [68] M. M. Nicolás-Marín, F. Ayala-Mato, O. Vigil-Galán, and M. Courel, "Simulation analysis of Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S/Sb<sub>2</sub>(Se<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub>)<sub>3</sub> solar cells with n-i-p structure," *Sol. Energy*, vol. 224, no. June, pp. 245–252, 2021, doi: 10.1016/j.solener.2021.05.092.
- [69] P. Sinsersuksakul *et al.*, "Overcoming Efficiency Limitations of SnS-Based Solar Cells," *Adv. Energy Mater.*, vol. 4, no. 15, pp. 1–7, 2014, doi: 10.1002/aenm.201400496.
- [70] X. Chen, Y. Hou, B. Zhang, X. H. Yang, and H. G. Yang, "Low-cost SnS<sub>x</sub> counter electrodes for dye-sensitized solar cells," *Chem. Commun.*, vol. 49, no. 51, pp. 5793–5795, 2013, doi: 10.1039/c3cc42679c.
- [71] R. Triboulet and P. Siffert, *CdTe and Related Compounds; Physics, Defects, Hetero- and Nano-structures, Crystal Growth, Surfaces and Applications: Physics, CdTe-based Nanostructures, CdTe-based Semimagnetic Semiconductors, Defects*. Elsevier Science, 2009.
- [72] T. M. Razykov, C. S. Ferekides, D. Morel, E. Stefanakos, H. S. Ullal, and H. M. Upadhyaya, "Solar photovoltaic electricity: Current status and future prospects," *Sol. Energy*, vol. 85, no. 8, pp. 1580–1608, 2011, doi: 10.1016/j.solener.2010.12.002.
- [73] P. K. Tawalare, "Optimizing photovoltaic conversion of solar energy," *AIP Adv.*, vol. 11, no.

10, 2021, doi: 10.1063/5.0064202.

- [74] H. Sekhar and D. N. Rao, "Spectroscopic studies on Zn-doped CdS nanopowders prepared by simple coprecipitation method," *J. Mater. Sci.*, vol. 47, no. 4, pp. 1964–1971, 2012, doi: 10.1007/s10853-011-5991-9.
- [75] S. Siebentritt, "Photovoltaics the Shockley-Queisser limit," pp. 1–24, 2021.
- [76] N. Donald A., *Semiconductor physics and devices: basic principles*. 2011.
- [77] C. J.-P. and C. C.A., "Physics of Semiconductor Devices," *Springer*, 2005.
- [78] Niemegeers, Alex and Gillis, Sofie and Burgelman, Marc, "A user program for realistic simulation of polycrystalline heterojunction solar cells: SCAPS-1D," in *Proceedings of the 2nd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, JRC, European Commission, juli, 1998*, pp. 672–675.
- [79] M. Burgelman, P. Nollet, and S. Degraeve, "Modelling polycrystalline semiconductor solar cells," *Thin Solid Films*, vol. 361, pp. 527–532, 2000, doi: 10.1016/S0040-6090(99)00825-1.
- [80] K. Decock, S. Khelifi, and M. Burgelman, "Modelling multivalent defects in thin film solar cells," *Thin Solid Films*, vol. 519, no. 21, pp. 7481–7484, 2011, doi: 10.1016/j.tsf.2010.12.039.
- [81] M Burgelman and J Marlein, "Analysis of graded band gap solar cells with SCAPS," vol. 49, no. 1, pp. 69–73, 2008, [Online]. Available: [https://www.bertelsmann-stiftung.de/fileadmin/files/BSt/Publikationen/GrauePublikationen/MT\\_Globalization\\_Report\\_2018.pdf](https://www.bertelsmann-stiftung.de/fileadmin/files/BSt/Publikationen/GrauePublikationen/MT_Globalization_Report_2018.pdf)[http://eprints.lse.ac.uk/43447/1/India\\_globalisation%2C\\_society\\_and\\_inequalities%28Isero%29.pdf](http://eprints.lse.ac.uk/43447/1/India_globalisation%2C_society_and_inequalities%28Isero%29.pdf)<https://www.quora.com/What-is-the>.
- [82] J. Verschraegen and M. Burgelman, "Numerical modeling of intra-band tunneling for heterojunction solar cells in scaps," *Thin Solid Films*, vol. 515, no. 15 SPEC. ISS., pp. 6276–6279, 2007, doi: 10.1016/j.tsf.2006.12.049.
- [83] S. Degraeve, M. Burgelman, and P. Nollet, "Modelling of polycrystalline thin film solar cells: new features in SCAPS version 2.3," in *3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, 2003. Proceedings of, 2003*, vol. 1, pp. 487-490 Vol.1.
- [84] A. Niemegeers and M. Burgelman, "Numerical modelling of AC-characteristics of CdTe and CIS solar cells," in *Conference Record of the Twenty Fifth IEEE Photovoltaic Specialists Conference - 1996*, 1996, pp. 901–904, doi: 10.1109/PVSC.1996.564274.