



*Instituto de Ciencias
Centro de Investigaciones en Dispositivos Semiconductores
Posgrado en Dispositivos Semiconductores*

**Estudio y evaluación del desempeño de celdas solares basadas en seleniuro
de antimonio usando el simulador SCAPS-1D.**

*Tesis sometida como requisito para obtener el grado de
Maestro en Dispositivos Semiconductores*

Presentada por:

Lic. Omar Betanzos Sánchez #220470135

Dirigida por:

Dr. Karim Monfil Leyva
Director

Dr. José A. Luna López
Codirector

Dra. Ana Luz Muñoz Zurita
Codirectora.

©BUAP, Abril 2022
Todos los derechos reservados.
Beca CONACyT#1023968

Dedicatoria

A mi familia,
amigos y profesores.

Agradecimientos

A la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, al Instituto de Ciencias (ICUAP) y al Posgrado en Dispositivos Semiconductores por permitirme continuar con mi formación profesional.

A mi familia, por su paciencia y apoyo ante esta nueva etapa de mi formación.

A novia y amigos, por los consejos, risas y momentos que pasamos juntos.

Agradezco a mi director el Dr. Karim Monfil Leyva por toda su paciencia, consejos, conocimientos y tiempo invertido para la realización de este trabajo,

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por la beca de maestría otorgada.

Índice General

Dedicatoria.....	ii
Agradecimientos.....	iii
Índice General.....	iv
Lista de Figuras	vi
Lista de Tablas.....	viii
Introducción.....	1
Objetivos.....	5
Objetivo General.....	5
Objetivos Específicos	5
Capítulo 1. Celdas solares basadas en calcogenuros	6
1.1 Calcogenuros	6
1.2 Seleniuro de Antimonio (Sb_2Se_3)	6
1.3 Celdas solares de película delgada.....	8
1.3.1 Celdas solares de película delgada de Sb_2Se_3	8
1.3.2 Simulación de celdas solares de película delgada de Sb_2Se_3	9
1.4 Sulfuro de Tungsteno (WS_2).....	10
1.4.1 Celdas solares con película delgada de Sulfuro de Tungsteno (WS_2).....	11
1.5 Parámetros Básicos de las Celdas Solares	12
1.5.1 Características de la curva J-V	12
1.5.2 Corriente de corto circuito.....	12
1.5.3 Voltaje de circuito abierto	13
1.5.4 Eficiencia.....	13
1.6 Diagrama de Bandas	15
Capítulo II. Principio de funcionamiento de SCAPS-1D	18
2.1 Análisis Numérico	18
2.2 Ecuaciones básicas de semiconductores	18
2.3 SCAPS-1D.....	19
2.3.1 Interfaz de SCAPS-1D	20
2.3.2 Panel de definición de celda solar SCAPS-1D.....	21
2.3.3 Panel de capas SCAPS-1D.....	22
2.3.4 Panel de defectos	23
Capítulo III. Procedimiento Teórico-Experimental.....	26
Capítulo IV. Resultados y Discusión.....	30

4.1	Introducción	30
4.2	Simulación de celda solar con estructura ITO/CdS/Sb ₂ Se ₃ /	30
4.2.1	Estructura ITO/CdS/Sb ₂ Se ₃ /Au Ideal.....	30
4.2.2	Evaluación de defectos del CdS	31
4.2.3	Evaluación de defectos del Sb ₂ Se ₃	33
4.2.4	Densidad de defectos en la interfaz CdS/Sb ₂ Se ₃	35
4.2.5	Diagrama de Bandas de la estructura ITO/CdS/Sb ₂ Se ₃ /Au	36
4.3	Evaluación de la estructura FTO/CdS/Sb ₂ Se ₃ /Au	37
4.3.1	Diagrama de bandas de la estructura FTO/CdS/Sb ₂ Se ₃ /Au	38
4.4	Evaluación de la estructura FTO/WS ₂ /Sb ₂ Se ₃ /Au	39
4.4.1	Diagrama de Bandas de la estructura FTO/WS ₂ /Sb ₂ Se ₃ /Au	40
4.5	Análisis del desempeño de las capas de la celda solar FTO/WS ₂ /Sb ₂ Se ₃ /Au	41
4.5.1	Capa transparente conductora de óxido	41
4.5.2	Capa Ventana	42
4.5.2.1	Espesor de la capa WS ₂	42
4.5.2.2	Concentración de donadores WS ₂	42
4.5.2.3	Densidad de defectos de WS ₂	43
4.5.3	Capa Absorbente	45
4.5.3.1	Espesor de Sb ₂ Se ₃	45
4.5.3.2	Concentración aceptores del Sb ₂ Se ₃	46
4.5.3.3	Densidad de defectos aceptores de Sb ₂ Se ₃	47
4.5.3.4	Densidad de defectos donadores de Sb ₂ Se ₃	48
4.5.4	Interfaz	49
4.5.4.1	Densidad de defectos en la interfaz.	49
Capítulo V. Conclusiones		51
Trabajo Futuro		54
Referencias		55

Lista de Figuras

Figura 1.1. Crecimiento de la eficiencia de celdas solares de película delgada	2
Figura 1.2. (a) Celda unitaria Ortorrónica de Sb_2Se_3 (esferas rosas representan al Sb y esfera azules al Se) (b) vista direccional de la estructura cristalina que muestra el plano 001.30	7
Figura 1.3. Disposición de átomos dentro de una tricapa de WS_2	11
Figura 1.4. Circuito equivalente ideal de la celda solar.....	12
Figura 1.5. Corriente de corto circuito y voltaje de circuito abierto a partir de la curva J-V	13
Figura 1.6. Punto de máxima potencia a partir de la curva J-V	15
Figura 1.7. a) Diagrama de banda de bandas de un semiconductor n y p separados b) diagrama de bandas de una unión pn.....	16
Figura 1.8. Diagramas de Banda a) Tipo acantilado b) Tipo Pico.	17
Figura 2.1. Interfaz del programa SCAPS-1D.....	21
Figura 2.2. Panel de definición de celda solar SCAPS-1D	22
Figura 2.3. Panel de capas de SCAPS-1D.....	23
Figura 2.4. Panel para agregar, editar o eliminar un defecto.....	23
Figura 2.5. Panel de propiedades de defecto	24
Figura 3.1. Esquema de la celda solar experimental simulada.....	26
Figura 3.2. Panel SCAPS sin defectos.....	27
Figura 3.3. Panel SCAPS densidad de defectos a) CdS b) Sb_2Se_3 c) interfaz.....	28
Figura 3.4. Estructura de las celdas solares a) experimental b) propuesta	29
Figura 4.1. Curva J-V de la celda solar ideal ITO/CdS/ Sb_2Se_3 /Au.....	30
Figura 4.2. Transmitancia del 80% del contacto delantero	31
Figura 4.3. Comparación de las curvas J – V entre la celda solar ideal y con 80% transmitancia.....	31
Figura 4.4. Comparación entre las celdas solares con y sin defecto de CdS.....	32
Figura 4.5. Densidad de defectos del CdS vs a) V_{oc} , J_{sc} b) FF, η	33
Figura 4.6. Posición de defectos del Sb_2Se_3	33
Figura 4.7. Densidad de defectos aceptores vs a) V_{oc} y J_{sc} b) FF y η	34
Figura 4.8. Densidad de defectos donadores vs a) V_{oc} y J_{sc} b) FF y η	35
Figura 4.9. a) Curva J-V de la celda solar ITO/CdS/ Sb_2Se_3 /Au con los defectos en ambos materiales b) Comparación de las curvas J-V	35
Figura 4.10. a) Curva J-V de celda solar simulada b) Comparación de las curvas J-V entre celda solar simulada y experimental.....	36
Figura 4.11. Diagrama de bandas de la estructura ITO/CdS/ Sb_2Se_3 /Au.....	37

Figura 4.12. Comparación del cambio de capa de óxido conductor transparente entre ITO y FTO.	38
Figura 4.13. Diagrama de bandas de la estructura FTO/CdS/Sb ₂ Se ₃ /Au	39
Figura 4.14. a) Gráfico J-V celda solar FTO/WS ₂ /Sb ₂ Se ₃ /Au b) comparación entre capas ventana.	40
Figura 4.15. Diagrama de bandas de la estructura FTO/WS ₂ /Sb ₂ Se ₃ /Au.....	41
Figura 4.16. Curvas J-V a diferentes espesores.....	41
Figura 4.17. a) V _{oc} , J _{sc} vs Espesor de WS ₂ b) Curvas J-V a diferentes espesores de WS ₂	42
Figura 4.18. Concentración de donadores vs a) V _{oc} , J _{sc} b) FF, n. c) Curvas J-V a diferentes concentraciones de donadores d) Curva J-V a una concentración de 1x10 ¹⁸ (1/cm ³).....	43
Figura 4.19. Densidad de defectos de WS ₂ vs a) V _{oc} , J _{sc} b) FF, η, c) Comparación de curvas J-V a diferentes densidades de defectos.....	44
Figura 4.20 Espesor de WS ₂ vs a) V _{oc} , J _{sc} b) FF y n, c) Curvas J-V a diferentes espesores, d) Curva J – V a 700 nm de espesor de Sb ₂ Se ₃	46
Figura 4.21. Concentración de aceptores vs a) V _{oc} , J _{sc} b) FF y η, c) Curvas J-V a diferentes concentraciones de aceptores d) Curva J-V a concentración de aceptores de 1x10 ¹³ (1/cm ³)	47
Figura 4.22. Densidad de defectos aceptores vs a) V _{oc} , J _{sc} b) FF y η, c) comparación de densidades de defectos aceptores en Gráfico J-V.....	48
Figura 4.23. Densidad de defectos donadores vs a) V _{oc} , J _{sc} b) FF y η, c) Comparación de densidades de defectos donadores por gráfico J-V.....	49
Figura 4.24. Densidad de defectos en la interfaz vs a) V _{oc} , J _{sc} b) FF y η. c) Curvas J-V a diferentes densidades de defecto en la interfaz d) Curva J-V Final.	50

Lista de Tablas

Tabla 1.1 Propiedades físicas del Sb_2Se_3	8
Tabla 2.1 Parámetros Variables en SCAPS.....	19
Tabla 3.1 Parámetros para simulación.....	26
Tabla 4.1 Defectos del CdS	32
Tabla 4.2 Defectos aceptores y donadores del Sb_2Se_3	34
Tabla 4.3 Defectos en la interfaz CdS/ Sb_2Se_3	36
Tabla 4.4 Comparación de V_{oc} , J_{sc} , FF y η entre celda solar simulada y experimental .	36
Tabla 4.5 Comparación de V_{oc} , J_{sc} , FF y η entre el cambio de la capa de óxido conductor transparente.....	38
Tabla 4.6 Comparación de V_{oc} , J_{sc} , FF y η entre el CdS y WS_2 como capa ventana.....	40

Introducción

Actualmente, la mayoría de las fuentes convencionales de energía están basadas en la combustión de energéticos fósiles; lo cual conlleva a la emisión de gases contaminantes derivando en el efecto invernadero. Dicha contaminación ha encendido una alarma para el desarrollo de tecnologías más sustentables con el fin de reducir la emisión de estos gases a la atmósfera [1]. Por lo tanto, diferentes instituciones se han enfocado en el aprovechamiento de energías renovables como una estrategia para mitigar este problema.

La posición geográfica de México facilita la producción de energía a través de fuentes renovables, principalmente la solar, debido a que la irradiación solar media diaria durante el año es de 5.5 kWh/m^2 y puede presentar valores superiores a los 8.5 kWh/m^2 . De acuerdo con el Inventario Nacional de Energías Renovables (INERE), el recurso solar tiene un potencial de generación de 6,500,000 GWh siendo una cantidad importante de energía que podría satisfacer necesidades nacionales [2]. A partir de los datos al 30 de abril de 2021 del programa de desarrollo del sistema eléctrico nacional 2021 – 2035 de la Secretaría de Energía (SENER), México cuenta con 18 principales centrales eléctricas a partir de energía solar fotovoltaica, las cuales se encuentran distribuidas a lo largo de la nación, éstas sumaron 5,149 MW de capacidad y generó 13,528 GWh en el año de 2020, aunque para el 30 de abril de 2021 la capacidad incremento a 7,026 MW obteniendo 5,610 GWh de energía eléctrica representando el 7.7% de la energía producida en la nación [3]. Esta información evidencia la importancia de la adopción de tecnología fotovoltaica y su continuo desarrollo para la generación de electricidad.

Para llevar a cabo la conversión de energía solar a energía eléctrica es necesario un dispositivo conocido como *celda solar*; la cual utiliza el efecto fotovoltaico para su adecuado funcionamiento [4]. Una celda solar se caracteriza por tener una unión entre un semiconductor tipo n y uno tipo p, tal que cuando la radiación solar incide sobre esta unión se generan pares electrón-hueco los cuales son separados por el campo eléctrico interno creado en la interfaz de la unión p-n de los semiconductores [5].

El primer dispositivo fotovoltaico basado en una unión p-n fue creado en 1954, este dispositivo fue realizado a partir de Silicio (Si) mostrando una eficiencia de conversión (η) de 6% [6]. Desde ese momento hasta la actualidad las celdas solares son tema de investigación y desarrollo tecnológico con el fin de fabricar dispositivos más accesibles y eficientes. Actualmente, aunque las celdas solares a base de Si abarcan el 90% del mercado de estos dispositivos, el costo de producción sigue siendo mayor que

el uso cotidiano de tecnologías a base de combustibles fósiles [7]. Por ende, varios grupos de investigación han buscado distintos materiales para el desarrollo de nuevas celdas solares que tengan mejores eficiencias y un menor precio.

El silicio amorfo (a-Si), el di-selenuro de cobre indio galio (CIGS) y el telurio de cadmio (CdTe) son materiales que buscan sustituir al Si cristalino a partir de celdas solares de películas delgadas [8]. En la Figura 1.1 se muestra el crecimiento que esta tecnología ha tenido desde 1975 a la fecha. Actualmente el CdTe presenta eficiencias entre 15% al 20% [9 – 10] mientras que el CIGS presenta eficiencias entre 20.4% al 23.4% [9], sin embargo, la toxicidad del Cadmio (Cd) y el alto de costo del Indio (In) y Galio (Ga) evitan el adecuado desarrollo de estas tecnologías [11].

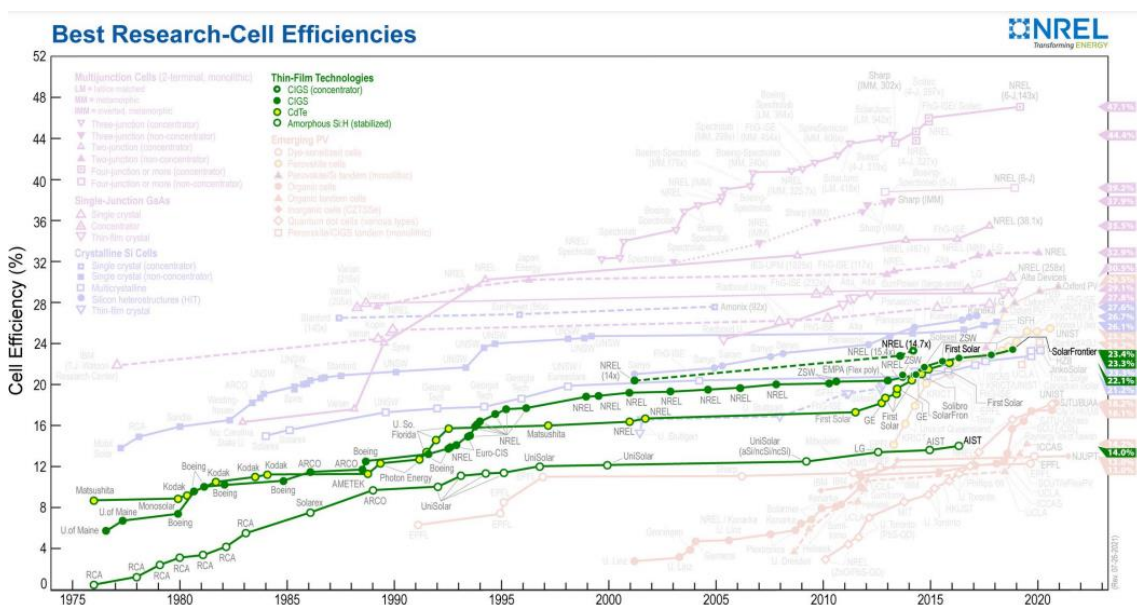


Figura 1.1. Crecimiento de la eficiencia de celdas solares de película delgada [12]

Por lo anterior, la búsqueda de nuevos materiales absorbentes para sustituir al CdTe y al CIGS conlleva a la investigación de los calcogenuros, materiales que han llamado la atención de la comunidad científica al ser semiconductores que tienen grandes propiedades ópticas y eléctricas, además, son elementos que destacan por su bajo costo y abundancia [13]. Dentro de estos, recientemente ha destacado el Seleniuro de Antimonio (Sb_2Se_3) siendo un material que posee una banda prohibida directa entre 1.0 y 1.2 eV [13], con un sistema cristalino ortorrómbico [14] y una absorción de luz menor a 10^5 cm^{-1} [11]. Dicho lo anterior, es un material de gran interés científico ya que posee grandes propiedades termoeléctricas [14], fotovoltaicas [13] y optoelectrónicas [15], lo cual lo hace el material ideal para sustituir al CdTe y al CIGS en la construcción de celdas solares [13].

Actualmente, la mayoría de las celdas solares de película delgada utilizan el sulfuro de cadmio (CdS) como capa ventana, sin embargo, como se mencionó anteriormente la toxicidad del Cd conlleva a la investigación de nuevos materiales para su uso como capa ventana dentro de los cuales destacan el dióxido de titanio (TiO_2) [16] y el sulfuro de zinc (ZnS) [17]. Por otro lado, los dicalcogenuros de metales de transición (TMDC), como el sulfuro de tungsteno (WS_2), son materiales semiconductores que se plantea sean capaces de sustituir al CdS como capa ventana, debido a que poseen un alto coeficiente de absorción de alrededor de $10^5 cm^{-1}$ y una adecuada brecha de energía [18].

Algunos de los principales trabajos sobre celdas solares que emplean el Sb_2Se_3 como capa activa absorbente han reportado múltiples aspectos por mejorar entre los cuales se destacan reducir la densidad de defectos tanto en bulto como en la interfaz, mejorar la fotocorriente a longitudes de onda cortas, incrementar el voltaje de circuito abierto (V_{oc}), la implementación de nuevos materiales como capa buffer y el uso de nuevas arquitecturas [19 – 20]. Aunque este material se considera una alternativa para el desarrollo de celdas solares, hasta ahora se ha reportado una eficiencia máxima de 9.2% [21]. Por tanto, resulta de primordial interés identificar los factores que no han permitido obtener eficiencias más altas, de tal manera que puedan minimizarse mediante el tipo de técnicas de fabricación empleadas, diseño y características de las estructuras o el tipo de unión empleada. La investigación y desarrollo de las celdas solares de película delgada requiere múltiples experimentos y caracterizaciones para identificar los factores que se necesitan controlar para incrementar la eficiencia del dispositivo. Sin embargo, una metodología de investigación basada en simulaciones ha probado ser una importante y eficiente alternativa para el desarrollo de este tipo de dispositivos ya que puede reducir el gasto en materiales, equipo y herramientas para su desarrollo y de igual manera se puede disminuir el tiempo de prueba y asegurar la reproducibilidad.

El uso y aplicación de simuladores para el desarrollo de dispositivos semiconductores incluso se vio incrementado exponencialmente debido a las condiciones impuestas ante la presente pandemia global. Existen softwares especializados en analizar y proporcionar información sobre celdas solares como Silvaco, Sentaurus y Lumerical, sin embargo, requieren licencias costosas para su empleo. Por otra parte, también han surgido softwares de libre acceso como AFORS HET, PC 1D y SCAPS-1D por mencionar algunos, los cuales han sido ampliamente utilizados para el estudio y desarrollo de celdas solares de películas delgadas.

En el presente trabajo se reporta una simulación de celdas solares a base de Sb_2Se_3 utilizando el programa SCAPS-1D. Empleando como base la estructura de la celda solar experimental $ITO/CdS/Sb_2Se_3/Au$ la cual cuenta con una eficiencia del 7.6% [22]. Una vez simulada la estructura se sustituyó la capa transparente de óxidos (TCO) de ITO por FTO y la capa ventana de CdS por WS_2 . Se optimizaron los parámetros de la celda solar propuesta ($FTO/WS_2/Sb_2Se_3/Au$) como el grosor de la capa transparente conductora de óxidos, la capa ventana y la capa absorbente, las densidades de estados donadores y aceptores y las densidades de defectos. Finalmente, se estudió y evaluó el desempeño del WS_2 como capa ventana en celdas solares de Sb_2Se_3 concluyendo la viabilidad de este material para sustituir el CdS como capa ventana en el desarrollo de celda solares.

Objetivos

Objetivo General

Estudiar y evaluar el efecto del WS_2 como capa ventana en celdas solares de Sb_2Se_3 mediante simulaciones con SCAPS-1D

Objetivos Específicos

- Comprender el uso del software de simulación SCAPS-1D
- Estudiar y optimizar una celda solar con la estructura ITO/CdS/ Sb_2Se_3 /Au mediante el simulador SCAPS-1D.
- Comparar los valores ideales obtenidos por la simulación de la celda solar de ITO/CdS/ Sb_2Se_3 /Au con los reportados experimentalmente.
- Comparar el efecto de la capa transparente conductora de óxido entre el ITO y FTO sobre la eficiencia de estructuras tipo TCO/CdS/ Sb_2Se_3 /Au.
- Aplicar el WS_2 como capa ventana para el estudio y evaluación de la estructura mediante el simulador SCAPS-1D

Capítulo 1. Celdas solares basadas en calcogenuros

1.1 Calcogenuros

Los calcogenuros son compuestos en donde el anión es un elemento del grupo VI A de la tabla periódica; aunque los óxidos pertenecen a este grupo se utiliza este término para los compuestos de Azufre (S), Selenio (Se) y Telurio (Te) [23]. El interés de estudio de estos compuestos es debido a su alta afinidad con diferentes metales formando así semiconductores binarios, ternarios, etc. Esta afinidad permite formar calcogenuros metálicos, en donde las propiedades del compuesto dependerán de la elección del catión metálico; formando una gama variada de semiconductores con diferentes propiedades eléctricas, ópticas, fotovoltaicas, detectoras, etc.[24]

Actualmente los semiconductores binarios como el CdTe y el CdS, así como los semiconductores ternarios como el Teluro de Cadmio-Zinc (CdZnTe) son materiales semiconductores altamente estudiados por sus propiedades fotovoltaicas [25], sin embargo, debido al alto costo y la escasez tanto del Indio (In) como del Teluro (Te), además de la alta toxicidad del Cadmio (Cd), estos materiales resultan inviables para el desarrollo de futuras tecnologías [11]. A pesar de todo, dentro de los calcogenuros metálicos binarios destaca el Sb_2Se_3 al ser un material no tóxico con compuestos abundantes y económicos [26].

1.2 Seleniuro de Antimonio (Sb_2Se_3)

El Selenio (Se) es un elemento del grupo VI, el cual puede combinarse con elementos específicos como el Antimonio (Sb), el Arsénico (Ar) y el Germanio (Ge) para formar diferentes materiales con propiedades únicas y diferentes [27]. Dentro de las combinaciones anteriores destaca el Sb_2Se_3 siendo un material semiconductor con excelentes propiedades termoeléctricas [14], fotovoltaicas [13] y optoelectricas [15].

El Sb_2Se_3 es un material formado por elementos del grupo V_2VI_3 , el cual ha sido tema de estudio desde 1950 hasta la actualidad [28]. Este material tiene un sistema cristalino ortorrómbico cuyos parámetros de red son $a = 1.16330 \text{ nm}$ $b = 1.1700 \text{ nm}$ y $c = 0.39850 \text{ nm}$ [29] describiendo una estructura cristalina anisotrópica la cual consta de cuatro subunidades moleculares de Sb_2Se_3 por celda unitaria como se describe en la Figura 1.2 a) [30]. La estructura está formada por cintas unidimensionales (1D) en la forma Sb_4Se_6 apiladas en paralelo en la dirección [001] como se muestra en la Figura 1.2 b) [31]. Básicamente, la estructura de las cintas consta de cadenas de Se-Sb-Se a lo largo del eje c teniendo dos diferentes uniones, es decir, por dentro los átomos están unidos covalentemente, mientras que las cintas están unidas por interacciones Se – Se

débiles [32]. La estructura 1D formada tiene una gran ventaja en las propiedades del material ya que los límites de grano que se forman paralelos a las cintas son beneficiosos para la recombinación [33] manteniendo así un alto transporte de portadores por toda la película [22].

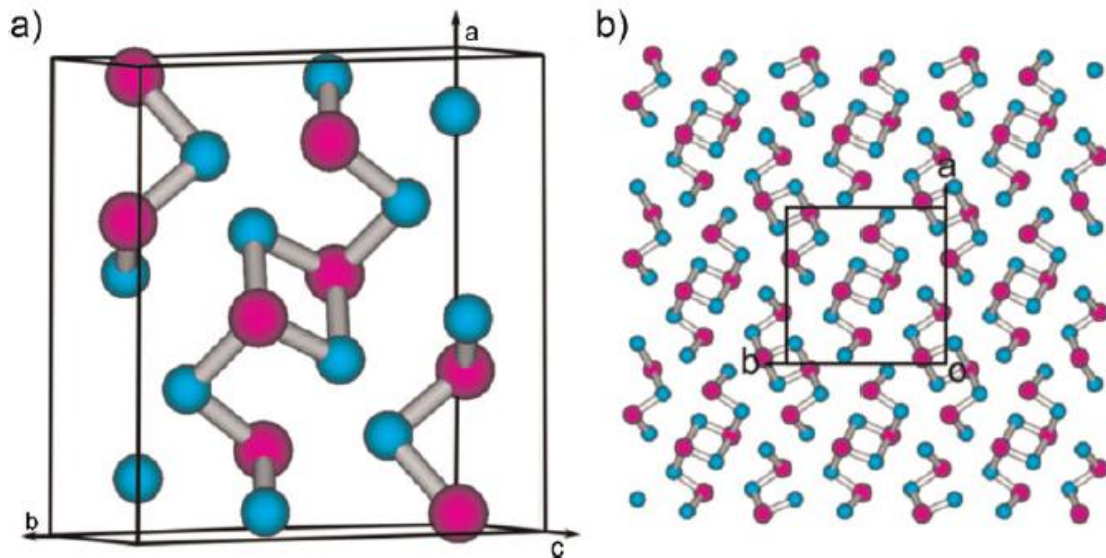


Figura 1.2. (a) Celda unitaria Ortorrónica de Sb_2Se_3 (esferas rosas representan al Sb y esfera azules al Se) (b) vista direccional de la estructura cristalina que muestra el plano [001]. [30]

La propiedad que permite el fácil desarrollo de este material es su bajo punto de fusión de 885 Kelvin (K) junto con su alta presión de vapor ya que permiten el depósito de películas homogéneas utilizando bajas temperaturas [34 – 35]. La estructura de bandas de este material es bastante compleja debido a las múltiples transiciones que hay a energías muy cercanas a la banda máxima de valencia; concluyendo que el material tiene una banda prohibida indirecta de 1.21 eV, sin embargo, una transición directa es posible a 1.22 eV por medio de los cálculos a partir de la teoría funcional de densidad utilizando la aproximación de gradiente generalizada [30]. Por otro lado, es común encontrar la banda prohibida utilizando el método de Tauc mostrando que el material cuenta con una banda prohibida indirecta menor de 1.03 ± 0.01 eV y una banda prohibida directa menor de 1.17 ± 0.02 eV ambas a 300 K [36] mostrando así la dualidad de las bandas prohibidas.

En la Tabla 1.1 se resumen algunas propiedades del Sb_2Se_3 que lo destacan como un excelente material absorbedor comenzando por ser un semiconductor tipo p con una excelente absorción de alrededor 10^5 cm^{-1} , además, cuenta con una buena

movilidad de portadores minoritarios de $\sim 15 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ y un tiempo de vida del portador de $\sim 60 \text{ ns}$ [34 – 36].

Tabla 1.1 Propiedades físicas del Sb_2Se_3

Propiedad del Material	Símbolo	Valor	Referencia
Parámetros de Red (nm)	a	1.16330	[29]
	b	1.1700	
	c	0.39850	
Grupo Espacial		Pnma 62	[29]
Densidad (g cm^{-3})	ρ	5.84	[35]
Punto de fusión (K)	T_f	885	[35]
Banda prohibida (eV)	$E_{g.d}$	1.17 a 300 K	[36]
	$E_{g.i}$	1.03 a 300 K	[36]
Coeficiente de absorción (cm^{-1})	A	$> 10^5$	[11]
Constante dieléctrica relativa (ϵ_0)	ϵ_r	14.3 – 19.8	[35]
Tiempo de vida de portadores minoritarios (ns)	τ_e	60	[36]
Movilidad ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)	μ_e	15	[35]
	μ_h	42	[35]

1.3 Celdas solares de película delgada

A partir de 1970 comienza el desarrollo de celdas solares de película delgada basadas principalmente en Silicio amorfo (a-Si), en compuestos binarios II-VI y compuestos ternarios I-III-VI [37]. Este dispositivo está basado en capas sucesivas delgadas, del rango de los micrómetros, depositadas sobre diferentes sustratos como vidrio o plástico. Una película delgada debe ser económica, no tóxica, estable y principalmente debe tener un mayor coeficiente de absorción que el silicio [38]. Es una tecnología económica ya que utiliza menor cantidad de reactivos y es escalable, sin embargo, hasta la fecha la eficiencia en las celdas solares de Silicio cristalino (c-Si) sigue siendo mejor que muchas de las celdas solares de película delgada [39].

1.3.1 Celdas solares de película delgada de Sb_2Se_3

Aunque el Sb_2Se_3 es un material estudiado desde 1950 [29] fue hasta 1982 que este material se utilizó por primera vez en un dispositivo fotovoltaico obteniendo una eficiencia (η) de 0.52% [40]. La investigación del Sb_2Se_3 como material absorbente en un dispositivo fotovoltaico continuó desarrollándose, utilizando diferentes estructuras. En 2014 se mostró que la estructura $\text{FTO}/\text{Sb}_2\text{Se}_3/\text{CdS}/\text{ZnO}/\text{ZnO}:\text{Al}/\text{Au}$ obtenía la

eficiencia más alta siendo de 2.1% [41], sin embargo, en el mismo año se realizó el cambio entre el CdS por TiO_2 como capa ventana mostrando que la celda solar $FTO/TiO_2/Sb_2Se_3/Au$ tenía la eficiencia más alta siendo de 2.26% [34]. Tres años después, en 2017 se propuso un dispositivo solar tipo NIP con la estructura $ITO/CdS/Sb_2Se_3/PbS/Au$ en donde el sulfuro de plomo (PbS) funge como una capa transportadora de huecos, obteniendo una eficiencia de 6.5% [42]. En 2018, bajo la misma estructura NIP se realiza sustituye el CdS y PbS por TiO_2 y PCDTBT, respectivamente, aumentando la eficiencia del dispositivo a 6.6% utilizando la estructura $FTO/TiO_2/Sb_2Se_3/PCDTBT/Au$, siendo un avance importante ya que remueven el uso de materiales tóxicos como el CdS y PbS [43]; en el mismo año, se incrementó la eficiencia a 7.6% utilizando la técnica de depósito por transporte de vapor con la estructura $ITO/CdS/Sb_2Se_3/Au$ [22]. Finalmente, en 2019 se obtiene la eficiencia más alta reportada en celdas solares en película delgada de Sb_2Se_3 siendo de 9.2% utilizando la estructura $Mo/MoSe_2/Sb_2Se_3/HR - ZnO/LR - ZnO/Ag$, en donde la capa de Sb_2Se_3 está formada por un arreglo de “nanorods”, es decir, un arreglo de morfologías a escala nanométrica que mejoran la respuesta del dispositivo a longitudes de ondas largas, además, mejoran la captación de luz y por ende, se reduce la reflexión óptica y la orientación preferencial del arreglo nanométrico facilitando el transporte del portador concluyendo en un incremento de la densidad de corriente (J_{sc}) [21].

1.3.2 Simulación de celdas solares de película delgada de Sb_2Se_3

En años recientes la simulación de celdas solares en película delgada de Sb_2Se_3 ha incrementado debido a la facilidad y precisión de los programas. En 2018 se realizó una simulación acerca de la heterounión Sb_2Se_3/CdS enfocándose principalmente en la optimización del dispositivo; este artículo quedó como guía de futuras investigaciones debido a la exactitud de los parámetros [44]. Un año después se utilizó la estructura $ITO/CdS/Sb_2Se_3/PbS/Au$ [42] observando que la capa transportadora de huecos podía ser reemplazada por óxido cuproso (Cu_2O) y la capa transportadora de electrones podía ser reemplazada por sulfuro de indio (In_2S_3) de esta manera se eliminan los elementos tóxicos tanto de Cd como de Pb, de igual manera, al cambiar la afinidad electrónica de la capa transportadora de huecos se logró cambiar el contacto trasero de Oro (Au) por nanotubos de carbono (NTC) obteniendo una eficiencia de 13.2% después de optimizar la celda solar [45].

Durante el 2020 y 2021 las simulaciones de celdas solares de este material se han enfocado en encontrar diferentes capas tanto transportadoras de huecos como de electrones con el fin de obtener una celda solar sin elementos tóxicos. Se han propuesto

los siguientes materiales como sustitutos de capa transportadora de electrones: ZnO, V_2O_5 , CdSe [46], TiO_2 , WS_2 [47], $Zn_{0.93}Mg_{0.07}O/ZnO_{0.4}S_{0.6}$ [48], y $Cd_{1-x}Zn_xS$ [49] siendo los más destacados, de igual manera, a continuación, se presentan los materiales propuestos como sustitutos de capa transportadora de huecos: CuO, CuI, PEDOT:PSS, CuSCN [50], CZTSe [51], Spiro-OMeTAD, CZ-Ta [47] y SnS [52] por mencionar solo algunos.

1.4 Sulfuro de Tungsteno (WS_2)

Las celdas solares en película delgada se basan en la unión p-n entre el absorbente y la capa ventana; esta última capa debe tener una gran brecha de energía, un grosor pequeño y una baja resistencia en serie [53]. El CdS es un material que destaca como capa ventana debido a su adecuada brecha de energía, coeficiente de absorción y su baja resistividad [54], sin embargo, la toxicidad de este material inhibe el desarrollo de esta tecnología [11], por ende, diferentes materiales se han estudiado para el reemplazo del CdS como el ZnS [17], el TiO_2 [16] y los dicalcogenuros de metales de transición (TMDC).

Los dicalcogenuros de metales de transición (TMDC) tienen la forma general TX_2 en donde T es un metal de transición de los grupos 4 – 6 de la tabla periódica (W, Mo) mientras que X son los calcogenuros (S, Se y Te) [55]. Estos materiales han probado ser candidatos para sustituir al CdS como capa ventana por su modificable brecha de energía, su coeficiente de absorción, su bajo costo y sus propiedades optoelectrónicas [55 – 57]. Dentro de estos materiales destacan el sulfuro de molibdeno (MoS_2) y el sulfuro de tungsteno (WS_2), pese a que el MoS_2 es uno de los materiales más estudiados dentro de los TMDC por su aplicación en el desarrollo de transistores [58]; él WS_2 cuenta con una mayor estabilidad, propiedades térmicas y propiedades optoelectrónicas [55,59] que el MoS_2 .

El WS_2 es un material abundante, económico y menos tóxico comparado con otros TMDCs, sin embargo, la investigación de este material en capas delgadas no ha sido tan estudiando con respecto a otros [60]. Actualmente, este material ha llamado la atención de la comunidad científica al presentar propiedades interesantes, es decir, este material tiene una brecha de energía modificable, ya que cuenta con una brecha de energía indirecta >1.5 eV en bulto y una brecha de energía directa < 2.0 eV en película delgada (dependiendo el tipo de síntesis que se utilice) [61], además, cuenta con una fase cristalina romboédrica con una dirección preferencial al plano (101), la Figura 1.3 muestra la disposición de los átomos dentro de una tricapa de WS_2 ; en donde una capa de átomos de tungsteno (W) esta intercalada por dos capas de Azufre (S) en una

coordinación prismática trigonal cuyos enlaces en las tricapas son covalentes mientras que las capas adyacentes se mantienen unidas por fuerzas débiles de Van der Waals [55].

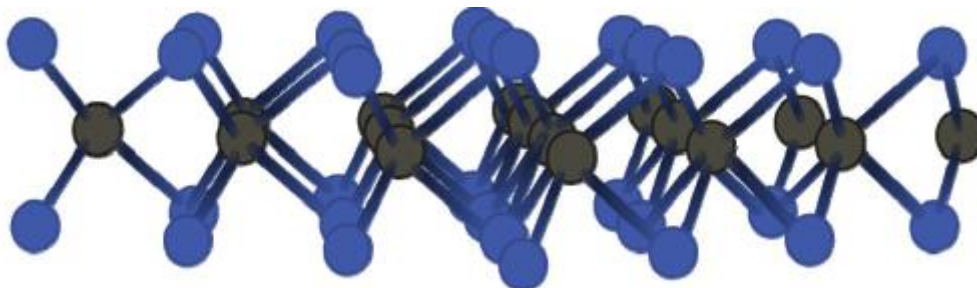


Figura 1.3. Disposición de átomos dentro de una tricapa de WS_2 [55].

1.4.1 Celdas solares con película delgada de Sulfuro de Tungsteno (WS_2)

Aunque este material ha sido sintetizado por diferentes técnicas como el electrodeposición [62], depósito químico de vapor metal-orgánico [63] y depósito por haz de iones [64] no había logrado la incorporación de las capas de este material en dispositivos fotovoltaicos hasta el año 2020 que B. R. M. K. Sobayel et al. utilizaron la técnica de pulverización catódica con magnetron de radiofrecuencia para el depósito de este material en un sustrato de vidrio y por primera vez se construyó la celda solar con el WS_2 como capa ventana con la estructura ITO/ WS_2 /CdTe/Cu:C/Ag obteniendo una eficiencia de 1.20% [60].

En 2019 se utilizó por primera vez el WS_2 como capa transportadora de electrones (ETL) en una simulación con la estructura cátodo/ WS_2 / $CH_3NH_3PbX_3$ /Spiro-OMeTAD/Ni demostrando que teóricamente el WS_2 puede reemplazar al TiO_2 como ETL en celdas solares de perovskita (PSC) obteniendo una eficiencia de 25.70% una vez optimizada [65]. Para el 2020 las simulaciones con este material incrementaron destacando los trabajos de A. Kumar y S. Singh quienes utilizaron el WS_2 como ETL en la estructura FTO/ WS_2 / $CH_3NH_3SnI_3$ /CuSCN/Au utilizando una perovskita sin Plomo, en donde observaron que los defectos en la interface $WS_2/CH_3NH_3SnI_3$ afectan de una manera importante la eficiencia final del dispositivo, obteniendo 19.84% de eficiencia [66]. R. Huang et al. realizaron la simulación de la celda solar WS_2/c -Si obteniendo 20.57% de eficiencia [67] siendo la primera simulación que no utiliza la perovskita como absorbente. K. Sobayel et al. utilizaron el WS_2 como capa ventana en una celda solar con la estructura Mo/CIGS/ WS_2 /i-ZnO obteniendo una eficiencia de 26.4% siendo mayor a las eficiencias obtenidas a la fecha [68], de tal manera que esta simulación intensificó la investigación del uso de WS_2 como capa ventana en celdas solares de película delgada. Finalmente, para el año 2021 A. M. Islam et al. simularon la celda con la

estructura ITO/WS₂/CdTe/Au obteniendo 20.55% de eficiencia destacando la viabilidad de utilizar el WS₂ como sustituto del CdS al ser un material más económico y no tóxico [69].

1.5 Parámetros Básicos de las Celdas Solares

1.5.1 Características de la curva J-V

En términos prácticos, cuando la celda es expuesta a la luz no todos los fotones son absorbidos, es decir, los fotones con energías menores a la brecha de energía no serán absorbidos, además, los fotones con energías mayores a la brecha de energía serán, o no, absorbidos y el excedente de energía será disipado como calor. Una celda solar ideal cuenta con una curva J-V semejante a la curva característica de un diodo formado por una unión p-n obteniendo así el circuito equivalente en la Figura 1.4 [70].

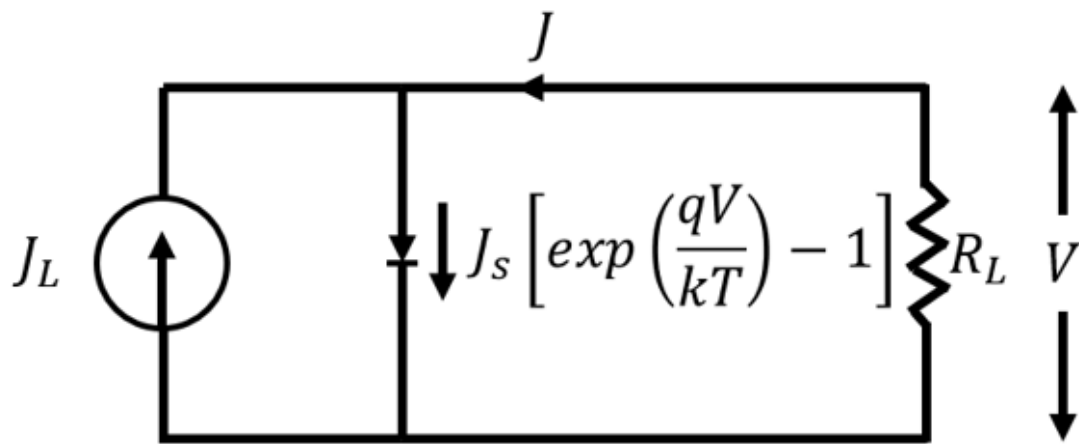


Figura 1.4. Circuito equivalente ideal de la celda solar.

Donde J_L es la densidad de fotocorriente, J_S es la densidad corriente de saturación del diodo y R_L es la resistencia de la carga. Las curvas características J-V de la celda solar muestran la representación gráfica del funcionamiento de la celda tanto en oscuridad como en iluminación. Finalmente, la densidad de corriente del dispositivo bajo iluminación es la suma de la densidad de fotocorriente y la densidad de corriente en oscuridad dado como [70]:

$$J = J_S \left[\exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) - 1 \right] - J_L \quad (1.1)$$

Donde q es la carga electrónica, V es el voltaje aplicado (el cuál es 0 V), k_B es la constante de Boltzmann y T es la temperatura.

1.5.2 Corriente de corto circuito

La densidad de corriente de corto circuito (J_{sc}) es la máxima corriente que fluye por la celda solar cuando el Voltaje (V) es igual a cero como se muestra en la Figura 1.5 [8, 70 – 71]. Esta corriente fluye debido a la generación y recolección de portadores de carga generados a partir de la luz incidente.

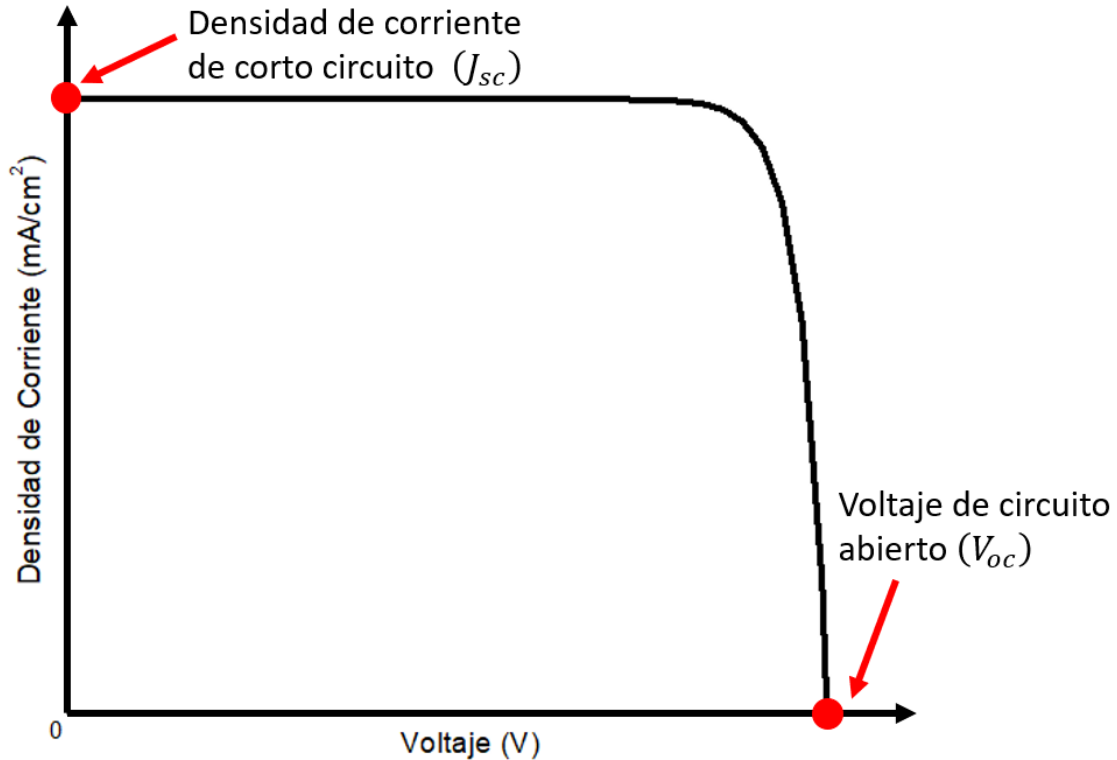


Figura 1.5. Corriente de corto circuito y voltaje de circuito abierto a partir de la curva J-V

1.5.3 Voltaje de circuito abierto

El voltaje de circuito abierto (V_{oc}) es el valor máximo de voltaje que puede tener la celda solar mostrado en la Figura 1.5. Si la celda solar no está conectada a la carga entonces la corriente estará en su valor mínimo (cero) de tal manera que a partir de la ecuación (1.1) si $J = 0$ se obtiene la ecuación (1.2) [8, 70 – 71].

$$V_{oc} = \frac{k_B T}{q} \ln \left(\frac{J_L}{J_s} + 1 \right) \quad (1.2)$$

En donde se puede observar que el V_{oc} es una medida que depende de la densidad de corriente fotogenerada (J_L) y la densidad de corriente de saturación (J_s).

1.5.4 Eficiencia

La eficiencia de conversión de energía se define como la capacidad de convertir la luz incidente en electricidad. La celda solar tiene un rango de funcionamiento entre 0 a V_{oc} ,

en el que se suministra energía. La densidad de potencia de la celda solar está dada por la ecuación (1.3) [38]

$$P = JV \quad (1.3)$$

La densidad de potencia (P) alcanza su valor máximo en el punto de máxima potencia el cuál se obtiene en el voltaje (V_m) y su correspondiente densidad de corriente (J_m) mostrado en la Figura 1.6. A partir de estos valores se puede calcular el factor de llenado (FF) por la ecuación (1.4) la cual describe la forma cuadra ideal de la curva J-V [38].

$$FF = \frac{J_m V_m}{J_{sc} V_{oc}} \quad (1.4)$$

La eficiencia de la celda solar η se define como la densidad de potencia liberada en el punto de funcionamiento como fracción de la densidad de potencia de la luz incidente P_i mostrado en la ecuación (1.5) [38].

$$\eta = \frac{J_m V_m}{P_i} \quad (1.5)$$

A partir de la ecuación (1.4) se puede expresar la ecuación (1.5) de la siguiente manera [38].

$$\eta = \frac{J_{sc} V_{oc} FF}{P_i} \quad (1.6)$$

Finalmente, los cuatro parámetros mencionados anteriormente J_{sc} , V_{oc} , FF y η describen el comportamiento característico de la celda solar, estos se pueden obtener a partir de las curvas J-V del mismo dispositivo.

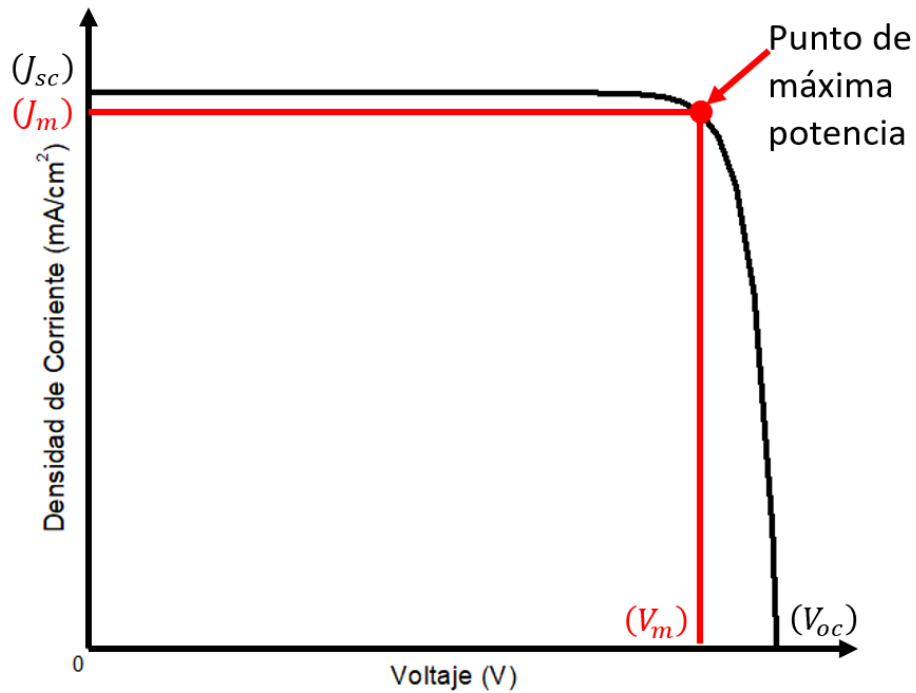
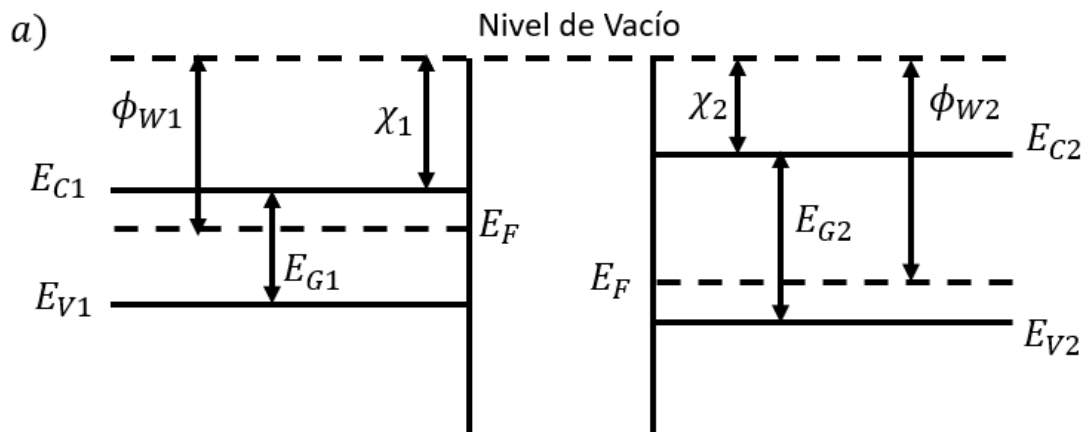


Figura 1.6. Punto de máxima potencia a partir de la curva J-V

1.6 Diagrama de Bandas

La alineación de bandas es un término que describe la forma en que las bandas de valencia y de conducción de dos materiales diferentes se alinean lo cual es crucial ya que describe la facilidad con la cual se llevara acabo la separación de los electrones y los huecos fotoexcitados para permitir la extracción de los portadores de carga antes que se produzca la recombinación [72]. En la Figura 1.7 a) se observan los diagramas de banda de dos semiconductores, uno n y uno p, respectivamente, con respecto al nivel de vacío, antes de hacer contacto. Cada semiconductor tiene diferentes brechas de energía (E_G), afinidades electrónicas (χ) y funciones de trabajo (ϕ_W), parámetros que definen el tipo de alinamiento que van a tener después de hacer contacto [5].



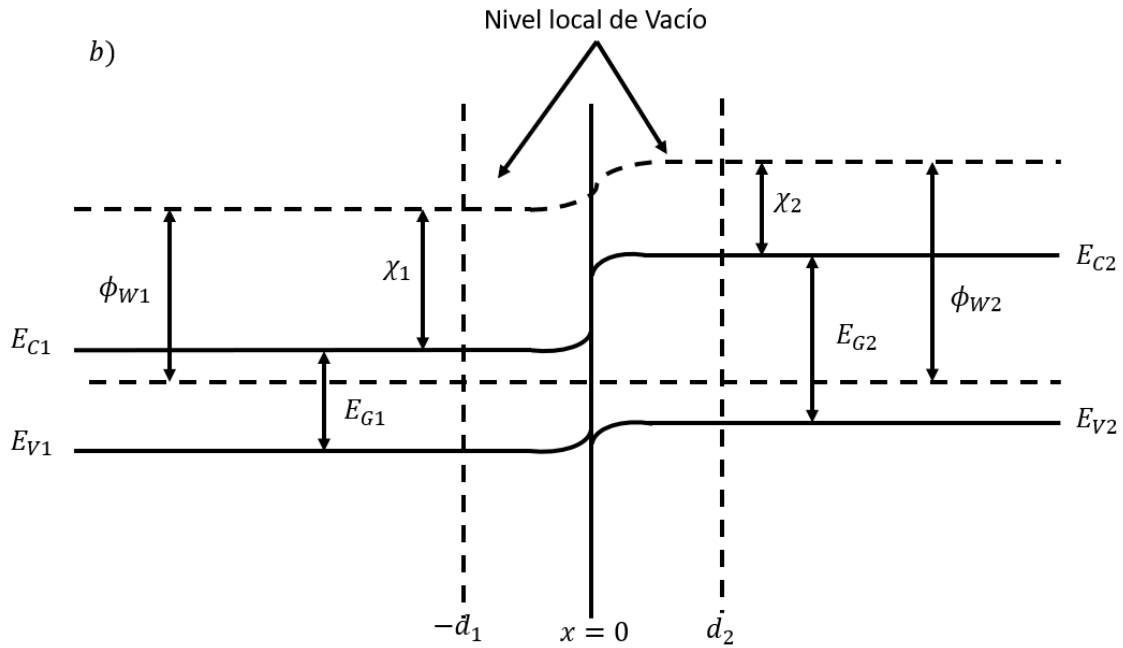


Figura 1.7. a) Diagrama de banda de bandas de un semiconductor n y p separados b) diagrama de bandas de una unión pn.

En la Figura 1.7 b) se observa el diagrama de banda de los semiconductores después de tener contacto y llegar a un equilibrio térmico. Las discontinuidades de las bandas de valencia, conducción y del nivel de vacío local se debe al campo interconstruido en la zona de agotamiento denotado por la distancia entre $-d_1$ a d_2 permitiendo la formación del nivel de Fermi con las mismas posiciones de función de trabajo, afinidad electrónica y brecha energética con respecto al nivel de vacío [5].

La orientación relativa de las bandas de energía crea dos tipos de desplazamientos de banda en la interfaz siendo el desplazamiento de la banda de conducción ΔE_c (CBO) y el desplazamiento de la banda de valencia ΔE_v (VBO) denotado por las ecuaciones (1.7) y (1.8) [69].

$$\Delta E_c = \Delta\chi \quad (1.7)$$

$$\Delta E_v = \Delta E_g - \Delta E_c \quad (1.8)$$

Donde $\Delta\chi$ es la diferencia entre las afinidades electrónicas y ΔE_g es la diferencia entre las brechas energéticas de los dos materiales.

Las uniones entre semiconductores son clasificadas como tipo I, II y III basadas en el alineamiento de sus bandas, sin embargo, dentro de éstas solo las uniones tipo I y II son de interés para aplicaciones fotovoltaicas. Una unión tipo II conocida como “escalonada” también puede denominarse como desplazamiento “tipo acantilado” en

donde ΔE_c es negativa mostrando este comportamiento, por otro lado, la una unión tipo I puede denominarse como desplazamiento “tipo pico” donde ΔE_c es positiva como se muestra en la Figura 1.8 a) y b) respectivamente [69, 72 – 73]. Para la capa absorbente tipo p los portadores minoritarios son los electrones que son promovidos a la banda de conducción del material. Por ende, el adecuado transporte de los electrones desde la banda de conducción hasta el contacto es de suma importancia para determinar la eficiencia del dispositivo. Es por esto que se necesita un adecuado alineamiento de la banda de conducción ya que en la unión tipo I se crea un barrera de potencial en la interfaz que no permite el adecuado flujo de electrones reduciendo la corriente de corto circuito y la eficiencia del dispositivo, aunque es posible que los electrones puedan cruzar una pequeña barrera de potencial a partir del exceso de energía térmica que tenga o por medio del tunelamiento. Mientras que la unión tipo II conduce a una fuente potencial de recombinación en la interface entre la banda de conducción de la capa ventana y la banda de valencia del absorbente, básicamente, esta recombinación se da por la cercanía de estas bandas en donde los electrones de la capa ventana se recombinan con los huecos del absorbente a través de los estados de la interface, por ende entre más estrecha sea la brecha entre los dos niveles mayor tasa de recombinación habrá, lo cual reduce de manera directa el voltaje de circuito abierto del dispositivo [72 – 75].

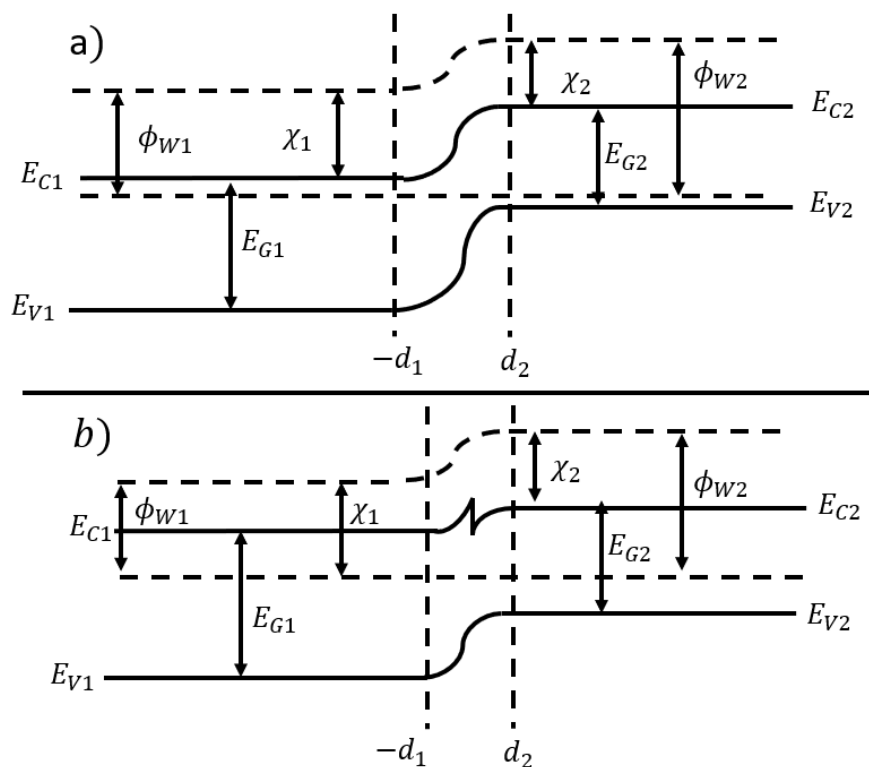


Figura 1.8. Diagramas de Banda a) Tipo acantilado b) Tipo Pico.

Capítulo II. Principio de funcionamiento de SCAPS-1D

2.1 Análisis Numérico

Actualmente la implementación de diferentes métodos de análisis numéricos en el campo de los semiconductores ha llevado al desarrollo de diversos programas de simulación; siendo la celda solar el dispositivo más estudiado dentro del campo de semiconductores, el análisis numérico se ha enfocado al desarrollo de softwares capaces de resolver las ecuaciones que rigen el comportamiento de las celdas solares brindando una respuesta precisa a un problema real. El desarrollo de este tipo de softwares ayuda al investigador a realizar cálculos complejos de una manera más sencilla optimizando tiempo de laboratorio al igual que recursos económicos (reactivos) ya que el software indica los parámetros necesarios de cada capa en la celda solar para obtener los resultados simulados. Dicho esto, los softwares de simulación de celdas solares son una herramienta esencial para el desarrollo de esta tecnología ya que proveen una manera más sencilla de entender el comportamiento de estos dispositivos sin tener que manufacturarlo.

2.2 Ecuaciones básicas de semiconductores

Para analizar el desempeño de una celda solar los softwares deben de ser capaces de resolver las ecuaciones básicas de los semiconductores. Comenzando con la ecuación de Poisson la cual muestra la relación entre el campo eléctrico (E) de la unión p-n y la densidad de carga espacial (ρ) mostrado en la ecuación (2.1) [76]:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 x} = -\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{\rho}{\epsilon_s} = -\frac{q}{\epsilon_s} [p - n + N_D^+(x) - N_A^-(x) \pm N_{def}(x)] \quad (2.1)$$

En donde ψ es el potencial electrostático, q es la carga electrónica, ϵ_s es la permitividad relativa estática, p, n son las concentraciones libres de hueco y electrón respectivamente, $N_D^+(x), N_A^-(x)$ concentración ionizada de donadores y aceptores respectivamente y $N_{def}(x)$ es la concentración de defectos (aceptores o donadores).

La segunda ecuación es la ecuación de continuidad la cuál gobierna el comportamiento de las celdas solares ya que analiza la corriente de arrastre, difusión y la recombinación simultáneamente. La ecuación 2.2 representa la ecuación de continuidad para el electrón y hueco respectivamente; en donde (J_n, J_p) son las densidades de corriente del electrón y hueco respectivamente, (G) es la tasa de generación y (R) es la tasa de recombinación [77].

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} + G - R \\ \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} - G + R \end{cases} \quad (2.2)$$

Finalmente, la tercera ecuación permite hacer el cálculo de la corriente de arrastre y difusión de los portadores de carga como se muestra en la ecuación (2.3). Donde (J_n, J_p) son la densidad de corriente del electrón y hueco respectivamente, (μ_n, μ_p) son la movilidad del electrón y hueco respectivamente y (D_n, D_p) son el coeficiente de difusión del electrón y hueco respectivamente.

$$\begin{cases} J_n = qn\mu_n \frac{\partial \psi}{\partial x} + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \\ J_p = -qn\mu_p \frac{\partial \psi}{\partial x} + qD_p \frac{\partial n}{\partial x} \end{cases} \quad (2.3)$$

Actualmente se cuentan con diferentes softwares para el análisis de celdas solares, que resuelven las ecuaciones descritas anteriormente, dentro de los cuales destacan:

1. SCAPS-1D (Solar cell capacitance simulator)
2. AMPS-1-D (Analysis of microelectronics and photonics structures)
3. AFORS-HET (Automat for simulation of heterostructures)
4. ASA (Amorphous semiconductor analysis)

Entre estos softwares se escogió SCAPS-1D para el desarrollo de este trabajo debido a que existe más literatura registrada acerca de simulaciones utilizando este programa, además de contar con una mayor exactitud al momento de realizar los cálculos.

2.3 SCAPS-1D

El software SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator) es un programa de simulación de celdas solares unidimensionales (1-D) desarrollado por el departamento de Electrónica e Información de Sistemas (ELIS) de la Universidad de Grent, Bélgica. La simulación se realiza modificando diferentes parámetros, mostrados en la Tabla 2.0 de hasta 7 capas de semiconductores; de igual manera, maneja el análisis de interfaz entre capas y las diferentes recombinaciones [78]. En el presente trabajo se utiliza la versión SCAPS 3.8 actualizada en mayo de 2020.

Tabla 2.1 Parámetros Variables en SCAPS

Parámetro	Símbolo	Unidades
Brecha energética	E_g	eV
Afinidad Electrónica	χ	eV
Permitividad dieléctrica relativa	ϵ	-
Densidad de estados efectivos de la banda de valencia	N_v	cm^{-3}
Densidad de estados efectivos de la banda de conducción	N_c	cm^{-3}
Velocidad térmica del electrón	vth_e	$cm \cdot s^{-1}$
Velocidad térmica del hueco	vth_h	$cm \cdot s^{-1}$
Movilidad del electrón	μ_e	$cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$
Movilidad del hueco	μ_h	$cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$
Concentración de donadores	N_D	cm^{-3}
Concentración de aceptores	N_A	cm^{-3}

La simulación calcula las mediciones óptico-eléctricas más relevantes de una celda solar siendo: (1) el gráfico J-V, (2) la eficiencia cuántica EQ (λ), (3) el diagrama de bandas y mediciones de capacitancia como (4) C-V y (5) C-f, mostrando una aproximación cercana a la realidad, que permite entender el funcionamiento de la estructura fotovoltaica, asimismo, facilita la modificación de los parámetros para obtener una mejor eficiencia del dispositivo.

2.3.1 Interfaz de SCAPS-1D

A continuación, se describe la interfaz del programa SCAPS-1D, la cual consiste principalmente en 4 paneles como se muestra en la Figura 2.1.

- 1 El primer panel se centra en la definición del problema, es decir, se definen las características de la celda solar a simular presionando el botón de “*set problem*”, ahora, para que el programa realice los cálculos para obtener la simulación se presiona el botón “*Calculate: single shot*”, por otro lado, si se desea hacer la variación de un parámetro dentro de algún rango establecido se presiona el botón de “*Calculate: batch*”.
- 2 El panel de acción es el segundo, el cual se enfoca en colocar la escala de las mediciones deseadas a realizar, es decir, se coloca los gráficos a obtener como lo son el I-V, C-V, C-f y QE colocando el rango de voltajes, las frecuencias y las longitudes de onda deseadas para realizar el barrido.
- 3 El tercer panel es de iluminación, el cual detalla si es una medición con o sin iluminación.

- 4 Finalmente, el cuarto panel es de punto de trabajo el cual detalla la temperatura, voltaje y frecuencia a la que se realizará la simulación. De igual manera, se pueden añadir resistencias en serie o en paralelo.

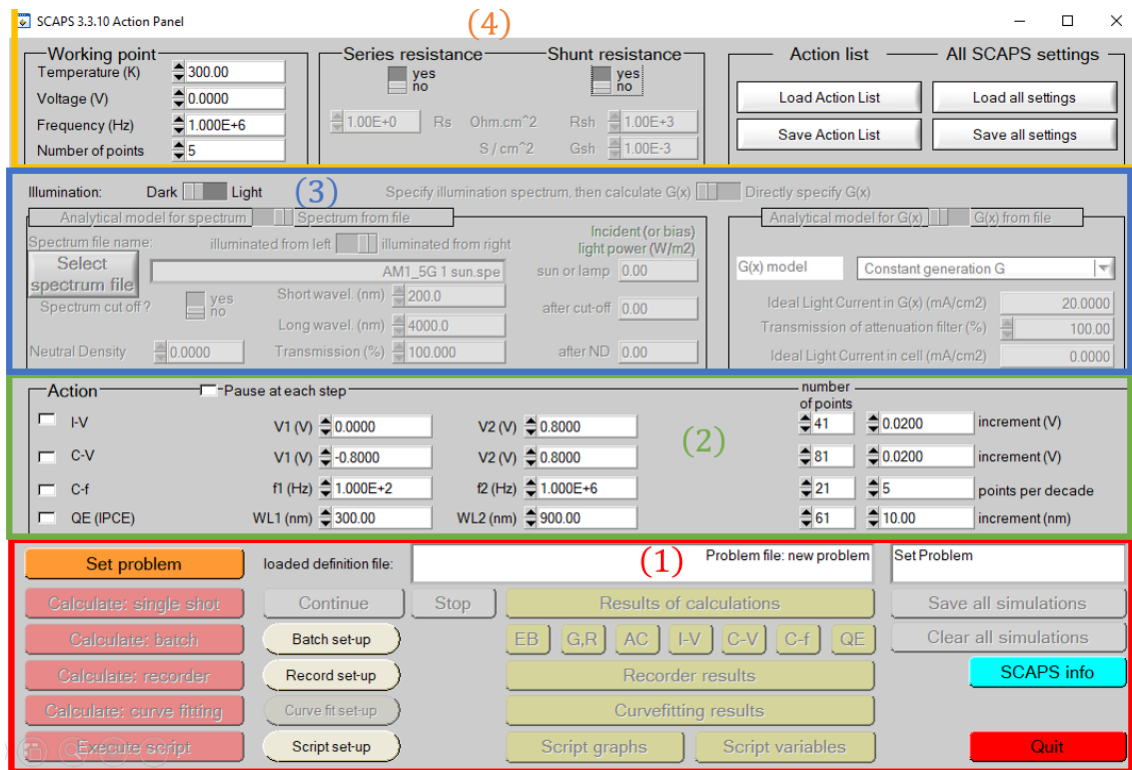


Figura 2.1. Interfaz del programa SCAPS-1D.

2.3.2 Panel de definición de celda solar SCAPS-1D

Una vez presionando el botón de “Set problem” se abre una nueva interfaz siendo el panel de definición de celda solar el cual permite definir la estructura de la celda solar a simular. Este panel nos permite visualizar el orden que van a tener las capas y la entrada de iluminación. Como el panel anterior este se puede definir en 3 categorías mostradas en la Figura 2.2:

- 1 La primera categoría se centra en abrir, guardar, borrar y cancelar nuevas estructuras de celdas solares a simular.
- 2 La segunda categoría permite observar la estructura que tiene la celda solar a simular brindando una idea del grosor que van a tener las capas, además de verificar en donde va a entrar la luz al sistema.
- 3 La tercera categoría es la más importante ya que se pueden agregar las capas de semiconductores que se necesiten mientras no sea mayor a 7. Por otro lado, se pueden agregar los defectos en las interfaces de acuerdo con número de capas

agregadas, además, se puede cambiar la función de trabajo del contacto trasero y delantero para la adecuada caracterización del dispositivo.

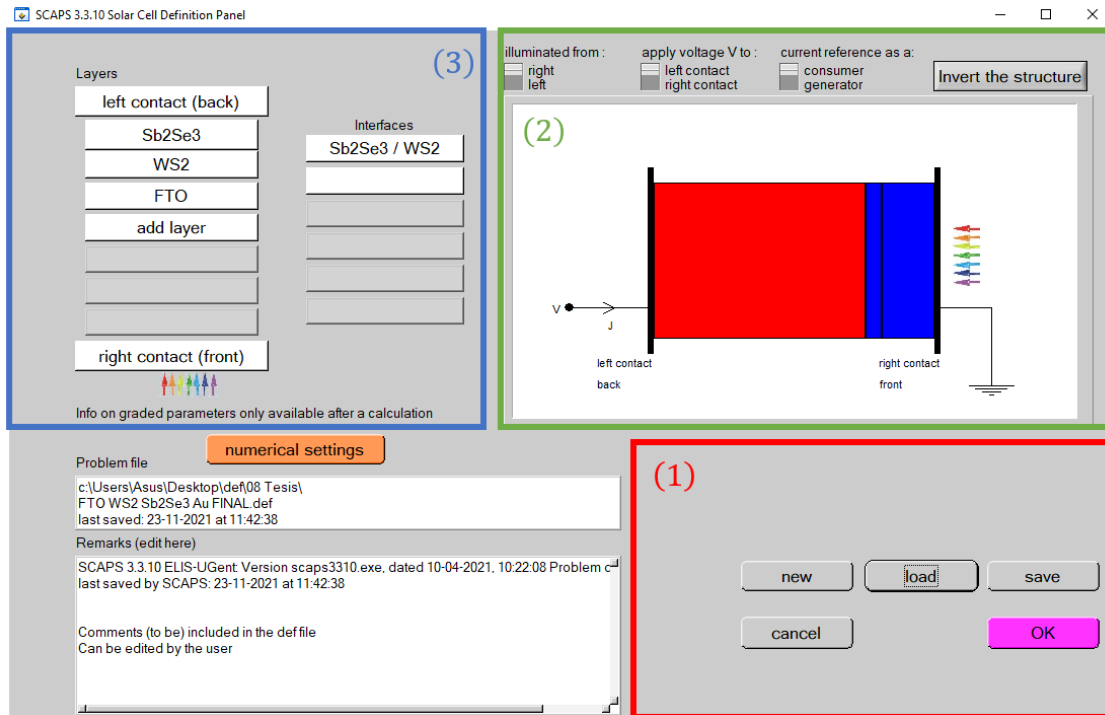


Figura 2.2. Panel de definición de celda solar SCAPS-1D

2.3.3 Panel de capas SCAPS-1D

Al presionar el botón “*add layer*” el programa abre una nueva interfaz en la cual se puede modificar cada una de las capas utilizando datos de diferentes literaturas. Como en los paneles anteriores esta nueva interfaz se clasifica en tres diferentes categorías mostradas en la Figura 2.3:

- 1 En primer lugar, se tiene la categoría de las propiedades dentro de la cual se agregan los datos que se obtiene de uno o más referencias.
- 2 En segundo lugar, se tiene la categoría del coeficiente de absorción, en esta categoría es importante observar que se tiene la opción de cargar un archivo o de utilizar el modelo base de SCAPS para calcular un coeficiente de absorción de acuerdo con las propiedades previamente añadidas en la categoría uno. En la opción de carga de archivo se puede observar que el programa ya tiene cargados algunos coeficientes de absorción referentes a las primeras simulaciones que se han realizado y que se pueden utilizar a conveniencia. Sin embargo, también se puede añadir nuevos coeficientes de absorción.
- 3 En tercer lugar, se tiene la categoría de defectos, en esta categoría se pueden añadir hasta 7 defectos ya sean neutrales, aceptores o donadores.

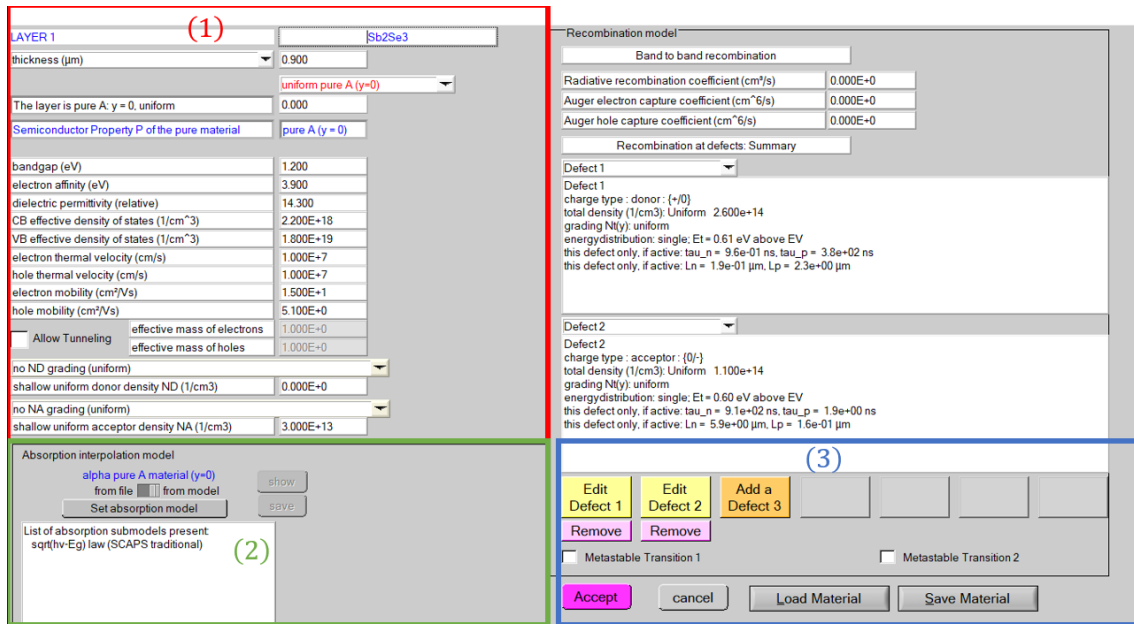


Figura 2.3. Panel de capas de SCAPS-1D

2.3.4 Panel de defectos

Dado que todo dispositivo contiene defectos el programa de SCAPS-1D cuenta con un panel de defectos dentro del cual se pueden añadir hasta 7 tipos de defectos en cada capa. Los parámetros necesarios de cada defecto pueden ser modificados al presionar “Add a defect” como se muestra en la Figura 2.4, esta opción abre el panel de “defect properties” el cuál se divide en 7 partes importantes como se muestra en la Figura 2.5 y se explican a continuación:



Figura 2.4. Panel para agregar, editar o eliminar un defecto

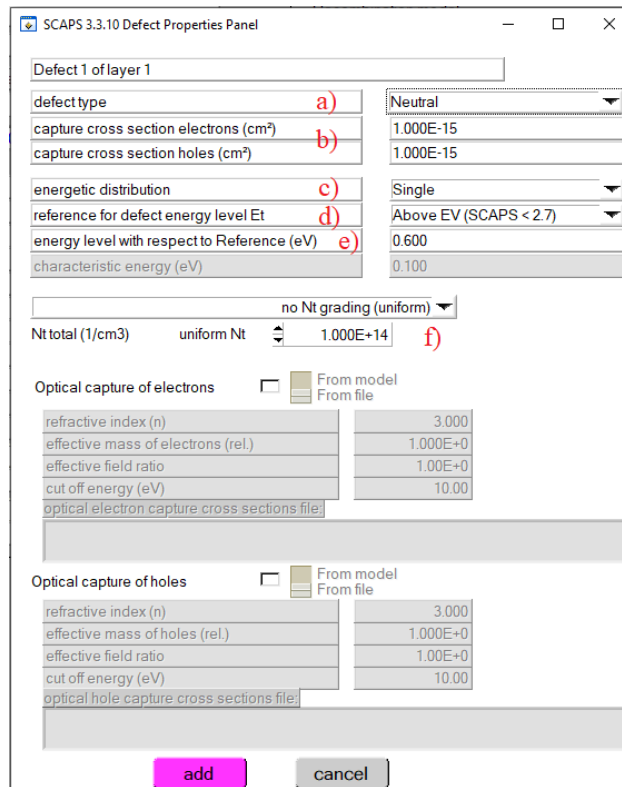


Figura 2.5. Panel de propiedades de defecto

- a) La herramienta “defect type” muestra los diferentes tipos de defectos que se pueden agregar en los materiales, aunque los dos defectos más comunes en los semiconductores son aceptor y donador, con esta herramienta se pueden agregar los siguientes defectos: neutral, donador simple, aceptor simple, doble donador, doble aceptor, anfótero y de multinivel.
- b) La sección transversal de captura de electrones y huecos es un parámetro extraído de los trabajos experimentales el cual se puede variar. Entre mayor sea la sección transversal afectará el tiempo de vida de los portadores al fungir como centros recombinación afectando directamente la eficiencia final del dispositivo.

$$\tau_{\text{tiempo de vida}} = \frac{1}{N_t \delta v_{th}}$$

Donde τ es el tiempo de vida, N_t es la densidad de defectos, v_{th} es la velocidad térmica de los portadores y δ es el área de sección transversal de captura de electrones y huecos.

- c) La distribución de energía del defecto puede tomar cinco valores como lo son: simple, uniforme, gaussiana, cola de banda de conducción y cola de banda de valencia. Siempre que la distribución de energía del defecto no sea única, esta

distribución se discretiza como un número determinado de niveles de defectos individuales.

- d) El nivel de energía de referencia indica la posición aproximada del nivel de energía con respecto a las tres opciones del programa: E_V por encima del nivel de la banda de valencia, E_C por debajo de la banda de conducción y E_i por encima del nivel intrínseco.
- e) La energía de nivel con respecto a la referencia es un parámetro extraído de los trabajos experimentales, el cual depende de la referencia colocada en el inciso e).
- f) La densidad de defectos total es un parámetro extraído de los trabajos experimentales el cual se puede variar.

Capítulo III. Procedimiento Teórico-Experimental

Se utilizó la estructura experimental ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au como base de la simulación, la cual reporta 7.6% de eficiencia [22] como se muestra en la Figura 3.1. Esta estructura es conformada por ITO como la capa de óxido conductor transparente, CdS como capa ventana, Sb₂Se₃ como material absorbente y Oro (Au) como contacto metálico. Cada simulación se realizó tomando en cuenta una irradiación solar incidente AM 1.5 de 1000 W/cm² a una temperatura de funcionamiento de 300 K, sin tomar en cuenta las masas efectivas, la resistencia en serie y la resistencia en paralelo. A partir de los datos recuperados de la literatura mostrados en la Tabla 3.1 [22, 31, 38,42, 50, 64, 79 – 86] se realiza la primera simulación de esta estructura sin tener a consideración los defectos del CdS, del Sb₂Se₃ y de la interfaz CdS/Sb₂Se₃ como se muestra en la Figura 3.2. Dadas las concentraciones mostradas en Tabla 3.1 se trata de películas semiconductoras no degeneradas.

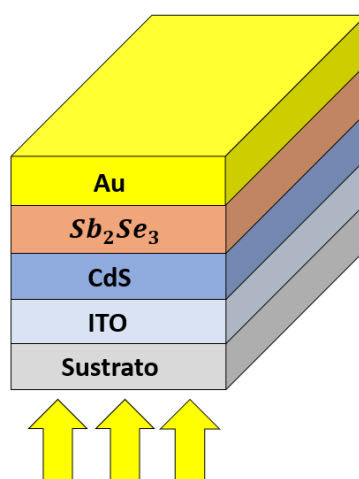


Figura 3.1. Esquema de la celda solar experimental simulada

Tabla 3.1 Parámetros para simulación

Parámetros	ITO	FTO	CdS	WS ₂	Sb ₂ Se ₃
Espesor μm	0.225	0.225	0.070	0.070	0.900
Brecha Energética (eV)	3.6	3.6	2.4	2.150	1.2
Afinidad Electrónica (eV)	4.1	4	4	4	3.9
Permitividad Dieléctrica	10	9	10	5.1	14.3
Densidad de estados efectiva en la banda de conducción (1/cm ³)	2.2×10^{18}	2.2×10^{18}	2.2×10^{18}	9.7×10^{18}	2.2×10^{18}
Densidad de estados efectiva en la banda de valencia (1/cm ³)	1.8×10^{19}	1.8×10^{19}	1.8×10^{19}	1.34×10^{19}	1.8×10^{19}

Movilidad de electrones (cm²/Vs)		100	100	100	200	15
Movilidad de huecos (cm²/Vs)		25	25	25	50	5.1
Concentración de donadores (1/cm³)	de	1x10 ¹⁷	1x10 ¹⁷	1.1x10 ¹⁸	1.1x10 ¹⁸	0
Concentración de aceptores (1/cm³)	de	0	0	0	0	3x10 ¹³

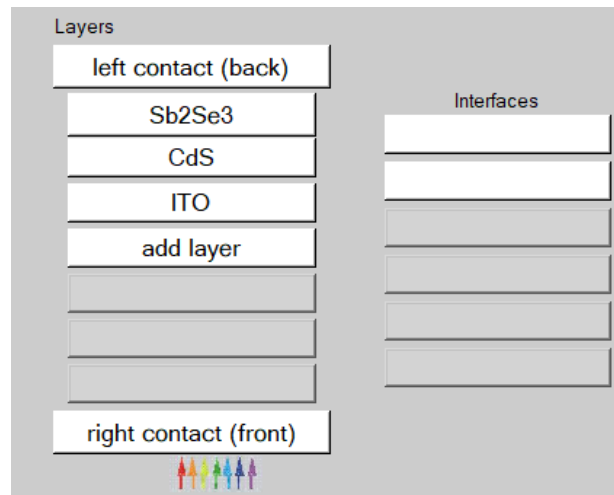


Figura 3.2. Panel SCAPS sin defectos

A continuación, se agregaron las densidades de defectos, tanto aceptores como donadores, del CdS y del Sb₂Se₃ los cuales se variaron entre 1x10¹² a 1x10¹⁸ (1/cm³) y entre 1x10¹⁰ a 1x10¹⁶ (1/cm³) respectivamente; con el fin de realizar un análisis entre la cantidad de densidad de defectos y la eficiencia del dispositivo. Finalmente, se varió la densidad de defectos en la interfaz CdS/Sb₂Se₃ para coincidir la parte experimental con la simulación como se muestra en la Figura 3.3.

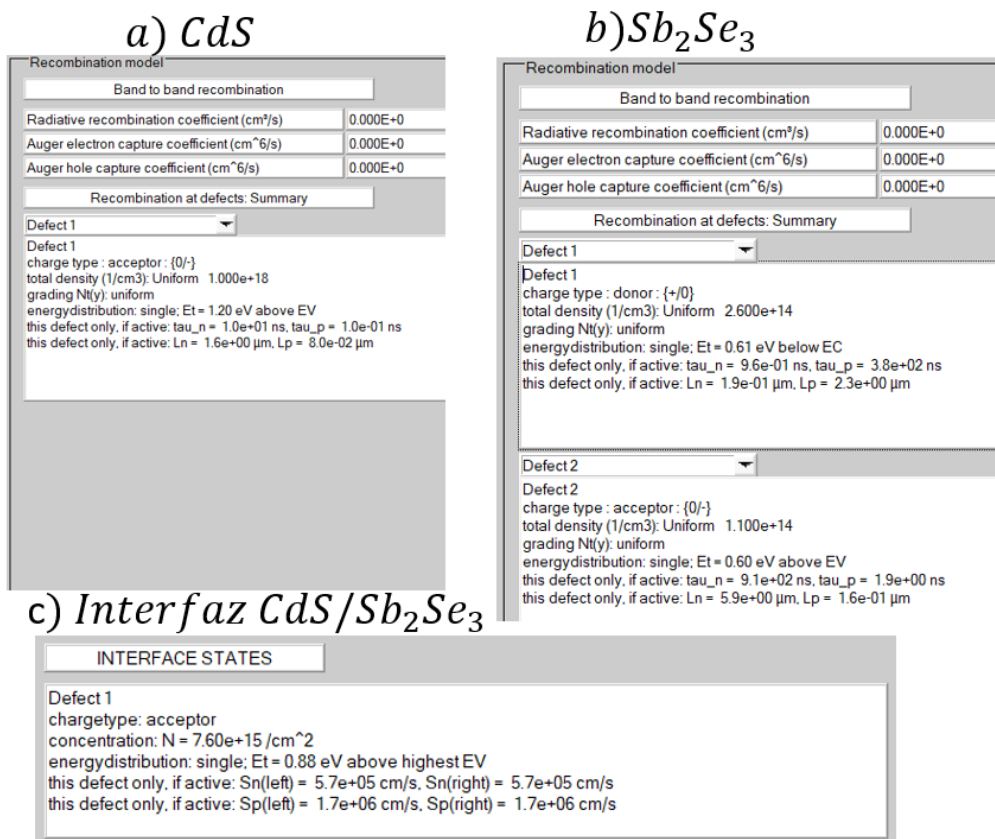


Figura 3.3. Panel SCAPS densidad de defectos a) CdS b) Sb₂Se₃ c) interfaz

Para obtener la celda solar propuesta (FTO/WS₂/Sb₂Se₃/Au) se cambió la capa de óxido conductor transparente entre ITO y FTO, además de la capa ventana entre CdS y WS₂ (Figura 3.4) utilizando los datos mostrados en la Tabla 3.1. Una vez obtenida la estructura deseada se optimizaron diferentes parámetros como el espesor del FTO, WS₂ y Sb₂Se₃, la densidad de estados donadores del WS₂, la densidad de estados aceptores del Sb₂Se₃ y las densidades de defectos del WS₂, Sb₂Se₃ y de la interfaz WS₂/Sb₂Se₃ obteniendo una eficiencia del 16.11%.

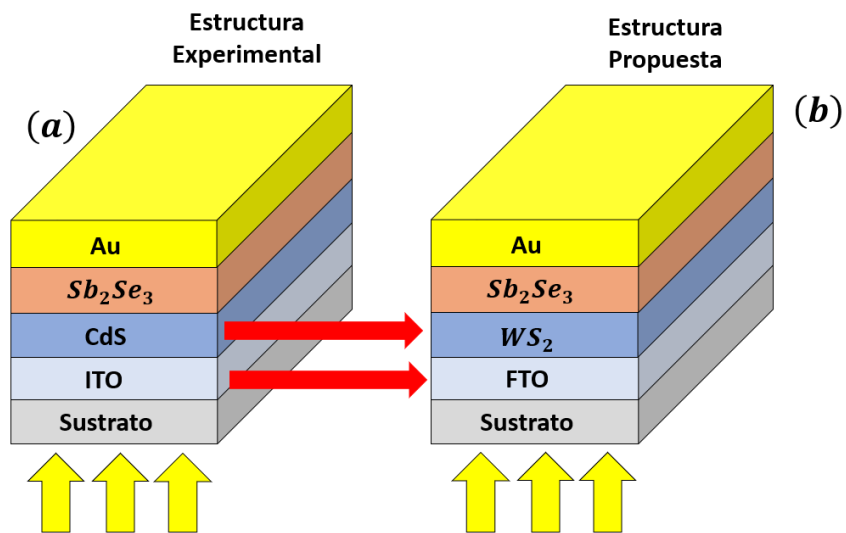


Figura 3.4. Estructura de las celdas solares a) experimental b) propuesta

Capítulo IV. Resultados y Discusión

4.1 Introducción

En esta sección se analiza cada una de las simulaciones obtenidas, además de observar el efecto que ocasiona la variación de diferentes parámetros como el espesor, la densidad de estados donadores, la densidad de estados aceptores y la densidad de defectos tanto de los materiales como en la interfaz. En el presente trabajo se detalla la viabilidad y los parámetros adecuados para el uso del WS_2 como capa ventana.

4.2 Simulación de celda solar con estructura ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au

4.2.1 Estructura ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au Ideal

En primer lugar, se realizó la simulación en SCAPS de la heterounión partiendo de la estructura ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au con 7.6% de eficiencia [22]. Los parámetros utilizados para cada uno de los materiales propuestos se pueden observar en la Tabla 3.1. Este modelo parte de la idealidad, es decir, se utilizaron únicamente los parámetros obtenidos en la literatura sin agregar las densidades de defectos tanto de los materiales como de la interfaz. En la Figura 4.1 se observa la curva J – V ideal de la celda solar teniendo una eficiencia de 24.88% siendo una eficiencia cercana al cálculo ideal de este tipo de celdas solares que es aproximadamente de 30% [87].

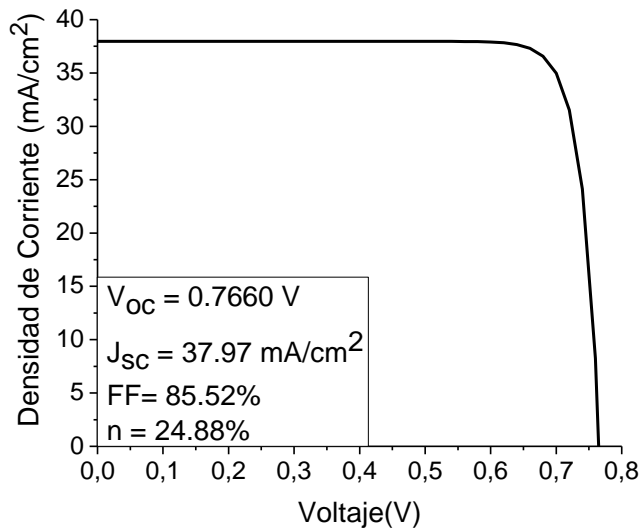


Figura 4.1. Curva J-V de la celda solar ideal ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au.

De acuerdo con la literatura, el ITO tiene una transmitancia que ronda entre el 78.8% al 79.6% [22] por ende para tener un cálculo más cercano a la realidad se coloca una transmitancia en el contacto delantero del programa SCAPS del 80%, siendo el valor más cercano como se muestra en la Figura 4.2. Así mismo, se realizó la simulación

utilizando esta condición de transmitancia observando que la J_{sc} decrece a 30.37 mA/cm² debido a que se disminuyen de los fotones que llegan a la capa absorbente viéndose, reflejando en una menor generación de pares electrón-hueco por ende disminuye la eficiencia del dispositivo a 19.75%. Por otro lado, el voltaje de circuito abierto y el factor de llenado permanece constantes con un valor de 0.7606 V y 85.49%. En la Figura 4.3 se muestra una comparación entre las curvas J-V entre la celda ideal (con 100% de transmitancia) y la celda solar con 80% de transmitancia en la capa de ITO.

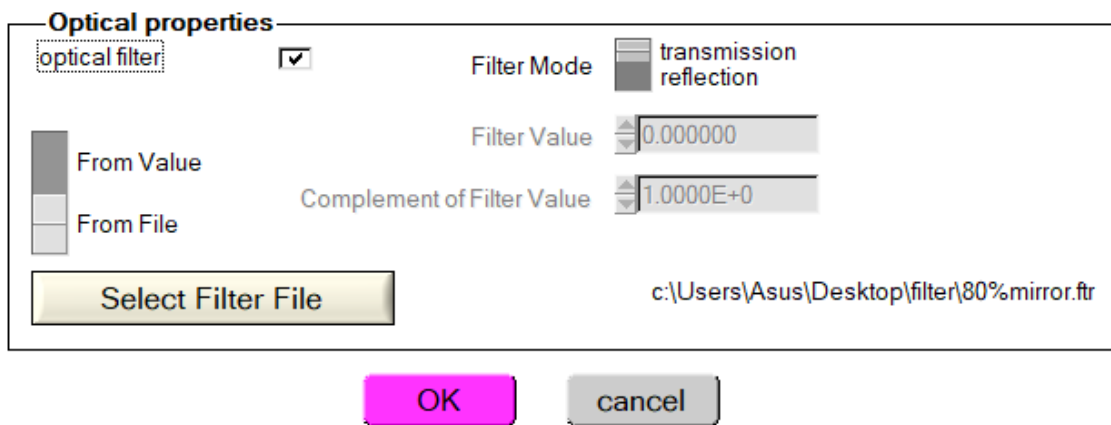


Figura 4.2. Transmitancia del 80% del contacto delantero.

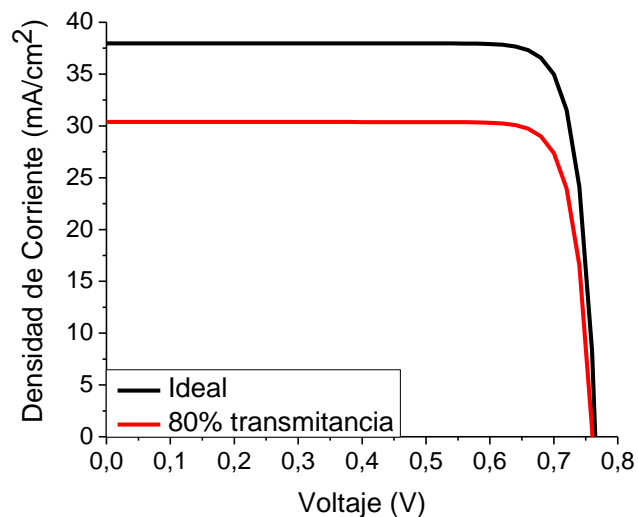


Figura 4.3. Comparación de las curvas J – V entre la celda solar ideal y con 80% transmitancia.

4.2.2 Evaluación de defectos del CdS

A continuación, se añadió la densidad de defectos del CdS reportado en la literatura [86] como se muestra en la Tabla 4.1. A partir de las curvas J-V de la Figura 4.4 se muestra una comparación entre la celda solar sin y con defecto del CdS observando un

comportamiento constante en la eficiencia de la celda solar. Por ende, se llevó a cabo la variación en la densidad de defectos entre 1×10^{12} a 1×10^{18} ($1/\text{cm}^3$) en donde el V_{oc} , J_{sc} , FF y la eficiencia de la celda solar permanecen constantes a densidades de defectos menores a 1×10^{16} ($1/\text{cm}^3$), sin embargo, a densidades mayores comienzan ligeras variaciones en los cuatro parámetros como se muestra en la Figura 4.5 a) y b). Finalmente, se observa que dentro del rango simulado la densidad de defectos intrínsecos del CdS no afecta de manera directa la eficiencia del dispositivo.

Tabla 4.1 Defectos del CdS

Concepto	Valor
Sección transversal de captura de electrones (cm^2)	1×10^{-17}
Sección transversal de captura de huecos (cm^2)	1×10^{-15}
Distribución de energía	Simple
Referencia del nivel de energía del defecto	E_v
Nivel de Energía (eV)	1.2
Densidad de defectos aceptores ($1/\text{cm}^3$)	$1 \times 10^{+18}$

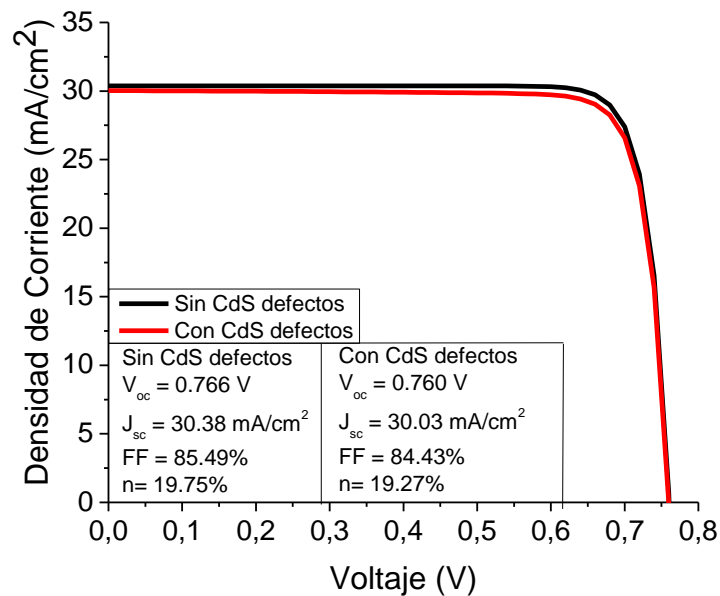


Figura 4.4. Comparación entre las celdas solares con y sin defecto de CdS

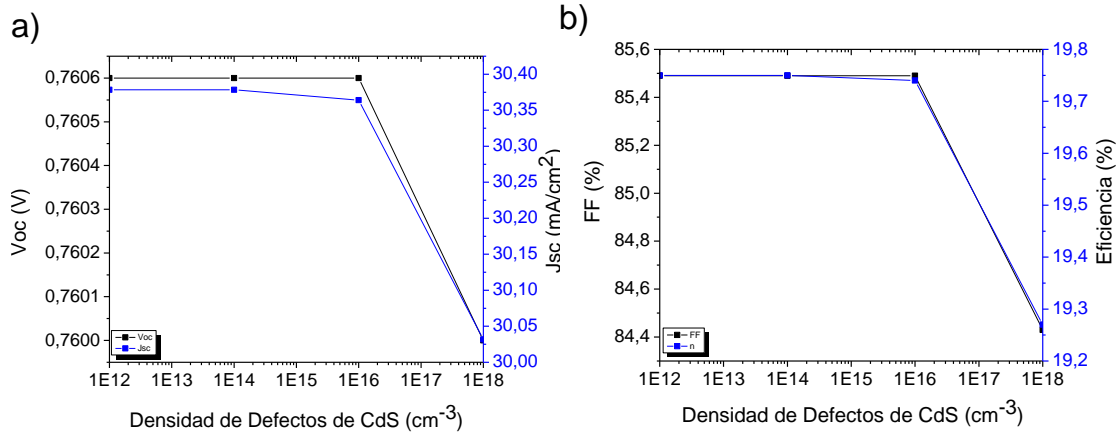


Figura 4.5. Densidad de defectos del CdS vs a) V_{oc} , J_{sc} b) FF , η .

4.2.3 Evaluación de defectos del Sb_2Se_3

De acuerdo con la literatura [22] los defectos de la capa absorbente se separan en defectos donadores y aceptores mostrados en la Figura 4.6 y descritos en la Tabla 4.2. En primer lugar, se realizó un barrido de la densidad de defectos aceptores entre 1×10^{10} a 1×10^{16} ($1/cm^3$) observando que a densidades mayores de 1×10^{13} ($1/cm^3$) comienzan a disminuir todos los parámetros como se observa en la Figura 4.7 a) y b), indicando que al aumentar la densidad de defectos aceptores incrementa la tasa de recombinación de los portadores provocando la disminución en la eficiencia del dispositivo, por ende la densidad de defectos aceptores ideal cae en el rango de 1×10^{13} ($1/cm^3$), sin embargo, dado que con la simulación se busca una representación del trabajo experimental, se tomó la densidad de defectos aceptores de 1×10^{14} ($1/cm^3$) como indica la literatura [22], obteniendo los valores de $V_{oc} = 0.734$ V $J_{sc} = 29.58$ mA/cm² $FF = 70.98\%$ y $\eta = 15.42\%$.

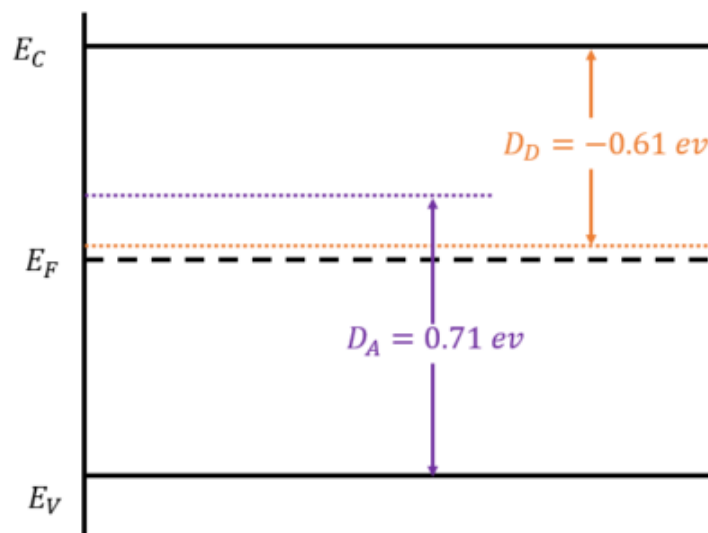


Figura 4.6. Posición de defectos del Sb_2Se_3

Tabla 4.2 Defectos aceptores y donadores del Sb_2Se_3

Concepto	Valor	Valor
Sección transversal de captura de electrones (cm^2)	4.0×10^{-13}	1.0×10^{-15}
Sección transversal de captura de huecos (cm^2)	1.0×10^{-15}	4.9×10^{-13}
Distribución de Energía	Simple	Simple
Referencia del nivel de energía del defecto	E_C	E_V
Nivel de Energía (eV)	-0.61 ± 0.03	$+0.71 \pm 0.02$
Densidad de defectos aceptores ($1/\text{cm}^3$)	0	1.0×10^{14}
Densidad de defectos donadores ($1/\text{cm}^3$)	2.6×10^{14}	0

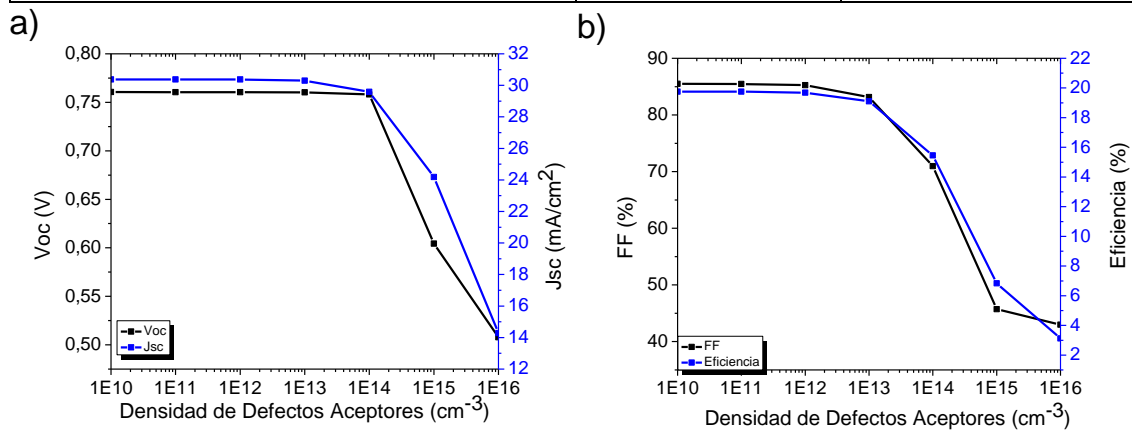


Figura 4.7. Densidad de defectos aceptores vs a) V_{oc} y J_{sc} b) FF y η .

De la misma manera se realizó un barrido de la densidad de defectos donadores del Sb_2Se_3 entre 1×10^{10} a 1×10^{16} ($1/\text{cm}^3$) tomando en cuenta el valor experimental de 2.6×10^{14} ($1/\text{cm}^3$). Como se observa en la Figura 4.8 a) y b) a partir de densidades mayores a 1×10^{13} ($1/\text{cm}^3$) comienza a decrecer el V_{oc} , FF y la eficiencia, sin embargo, la J_{sc} se ve más afectada a partir de densidades mayores a 1×10^{14} ($1/\text{cm}^3$). Aunque la densidad ideal a tomar es de 1×10^{13} ($1/\text{cm}^3$) se consideró la densidad reportada en la literatura de 2.6×10^{14} ($1/\text{cm}^3$) [22] con el fin de tener una simulación más apegada a lo experimental.

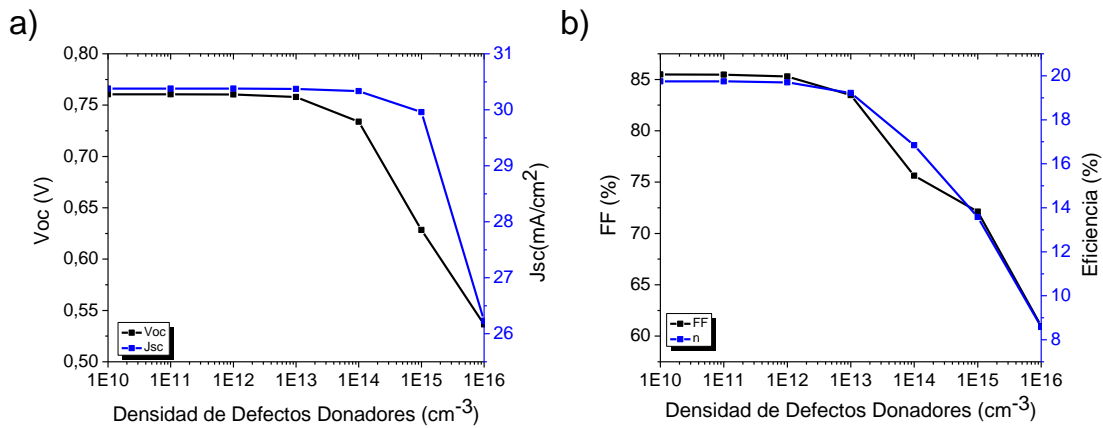


Figura 4.8. Densidad de defectos donadores vs a) V_{oc} y J_{sc} b) FF y η .

En la Figura 4.9 a) se observa la curva J – V de la celda solar ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au con el defecto aceptor de CdS y el defecto donador y aceptor del Sb₂Se₃ mostrando una reducción en el V_{oc} , el FF y la eficiencia, sin embargo, la J_{sc} permanece constante, obteniendo los valores de $V_{oc} = 0.69$ V, $J_{sc} = 30.23$ mA/cm², FF=73.41% y $\eta = 15.32\%$. En la Figura 4.9 b) se observa una comparación de las curvas J-V de las diferentes celdas solares que se han realizado. En este caso se puede observar cómo se mantiene la J_{sc} entre la celda solar con 80% de transmitancia hasta la celda solar con los defectos de ambos materiales, sin embargo, es evidente observar que el V_{oc} decrece al momento de agregar ambos defectos lo cual conlleva a reducir de la misma manera el FF y la eficiencia.

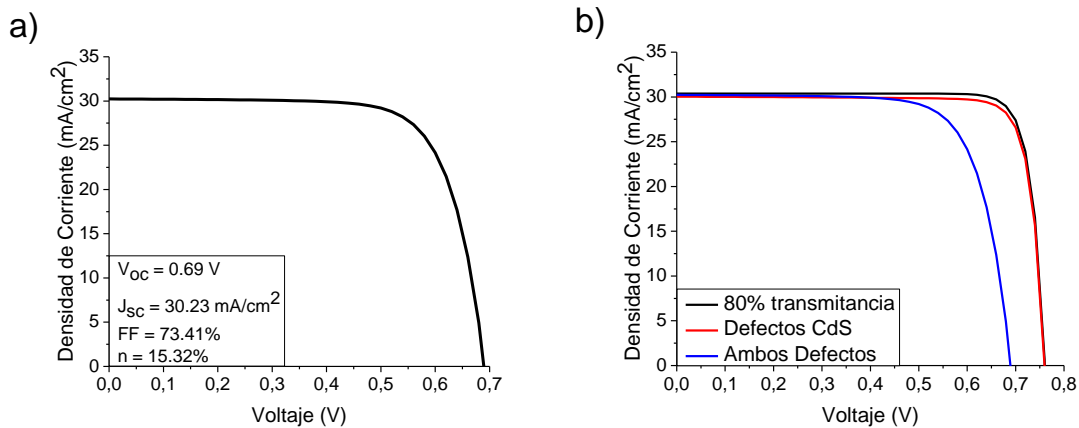


Figura 4.9. a) Curva J-V de la celda solar ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au con los defectos en ambos materiales b) Comparación de las curvas J-V

4.2.4 Densidad de defectos en la interfaz CdS/Sb₂Se₃

El último parámetro por agregar es la densidad de defectos en la interfaz del CdS/Sb₂Se₃ tal como se muestra en la Tabla 4.3. Al agregar el defecto en la interfaz se observa una ligera reducción de la J_{sc} lo cual indica una perturbación en el trayecto de los electrones

hacia el contacto. El V_{oc} decrece de 0.69 V a 0.426 V lo cual denota una mayor tasa de recombinación en la interface provocando así una reducción de la eficiencia del dispositivo. La disminución del V_{oc} se ve reflejado en la forma cuadrada ideal de FF provocando que su porcentaje también disminuya de 73.41 a 59.69%. En la Figura 4.10 a) se observa la curva J-V junto con los valores de los 4 parámetros característicos de la celda solar al agregar el defecto de la interfaz. Además, en la Figura 4.10 b) se realiza una comparación entre la curva J-V experimental y la simulada cuyos valores se colocados en la Tabla 4.4.

Tabla 4.3 Defectos en la interfaz CdS/Sb₂Se₃

Concepto	Valor
Sección transversal de captura de electrones (cm ²)	7.50×10^{-18}
Sección transversal de captura de huecos (cm ²)	2.30×10^{-17}
Distribución de Energía	Simple
Referencia del nivel de energía del defecto	E_v
Nivel de Energía (eV)	0.880
Densidad de defectos aceptores (1/cm ²)	$7.6 \times 10^{+15}$

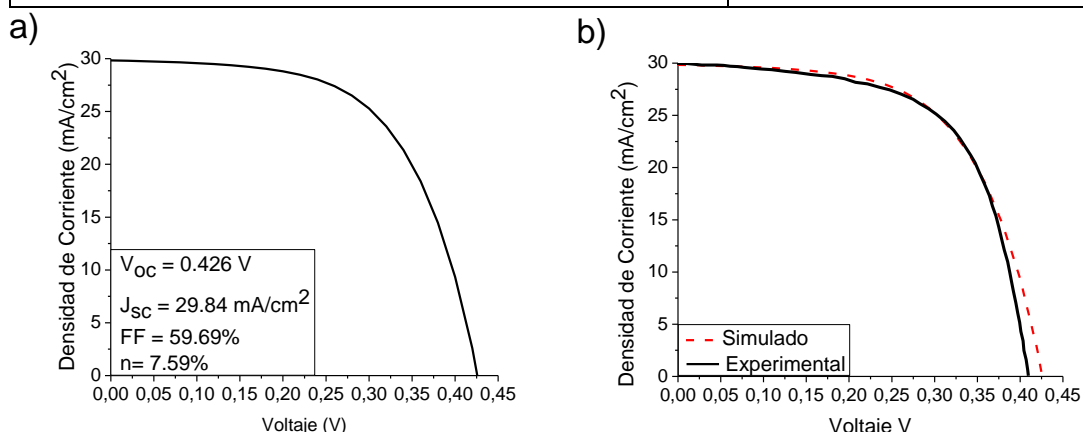


Figura 4.10. a) Curva J-V de celda solar simulada b) Comparación de las curvas J-V entre celda solar simulada y experimental.

Tabla 4.4 Comparación de V_{oc} , J_{sc} , FF y η entre celda solar simulada y experimental

Celda Solar	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
Experimental	0.42	29.9	60.4	7.6
Simulación	0.426	29.84	59.69	7.59

4.2.5 Diagrama de Bandas de la estructura ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au

En la Figura 4.11 se muestra el diagrama de bandas de la estructura ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au en equilibrio en donde la distancia está en función del espesor de

cada una de las capas del dispositivo, siendo de 900 nm el espesor del Sb_2Se_3 , 70 nm la capa de CdS, 225 nm la capa del ITO y de aproximadamente 70 nm la región de carga espacial. De acuerdo con la teoría revisada en el capítulo 3 se puede observar un alineamiento tipo II o “tipo acantilado” en la interface $\text{Sb}_2\text{Se}_3/\text{CdS}$ indicando que la banda de conducción de la capa ventana se encuentra cercana la banda de valencia del absorbente lo cual genera una zona de recombinación marcada en color azul en donde los electrones de la capa ventana se recombinan con los huecos del absorbente a través de los estados de la interface, afectando así el voltaje de circuito abierto del dispositivo. Además, se puede observar un alineamiento tipo I o “tipo pico” en la interface entre CdS/ITO de 0.1 eV el cual, aunque pequeño, puede afectar el recorrido de los electrones en su camino hacia el contacto afectando así la densidad de corriente de corto circuito y la eficiencia del dispositivo.

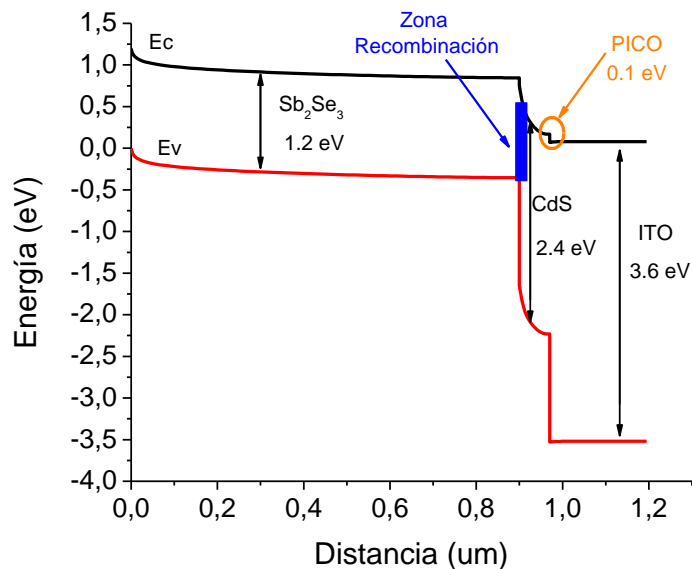


Figura 4.11. Diagrama de bandas de la estructura ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au

4.3 Evaluación de la estructura FTO/CdS/Sb₂Se₃/Au

Una vez obtenida la simulación de la celda solar experimental se realiza el cambio de la capa de óxido conductor transparente entre el ITO por el FTO. Aunque el ITO cuenta con propiedades que superan al FTO, la presencia del Indio en el ITO hace que el costo beneficio de este material no sea redituable, por otro lado, el FTO surge como un material de bajo costo, además de ser estable a altas temperaturas [88]. Es por lo que en el presente trabajo se hace el cambio de la capa de óxido conductor transparente utilizando los datos reportados en la Tabla 3.1.

En la Figura 4.12 se muestra una comparación de las curvas J-V entre las celdas solares con cambio de la capa de óxido conductor transparente en donde a pesar de tener diferentes valores en la afinidad electrónica y en la permitividad dieléctrica no se observa un cambio considerable en los cuatro parámetros de la celda solar de acuerdo con la Tabla 4.5, sin embargo, al utilizar el FTO hay incremento del 0.02% en la eficiencia del dispositivo.

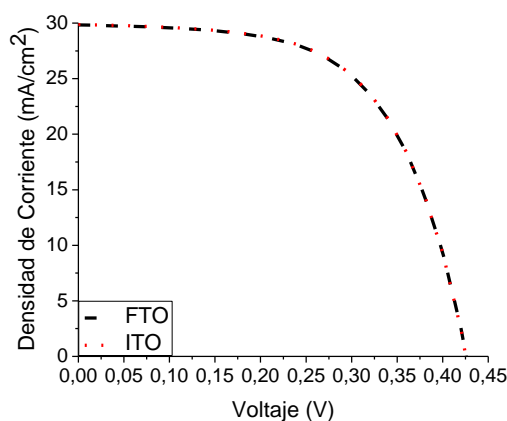


Figura 4.12. Comparación del cambio de capa de óxido conductor transparente entre ITO y FTO.

Tabla 4.5 Comparación de V_{oc} , J_{sc} , FF y η entre el cambio de la capa de óxido conductor transparente

TCO	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
ITO	0.4263	29.84	59.69	7.59
FTO	0.4260	29.88	59.81	7.61

4.3.1 Diagrama de bandas de la estructura FTO/CdS/Sb₂Se₃/Au

En la Figura 4.13 se muestra el diagrama de bandas de la estructura FTO/CdS/Sb₂Se₃/Au en donde se observa un alineamiento tipo II o “tipo acantilado” en la interface Sb₂Se₃/CdS, marcado en color azul, indicando que la banda de conducción de la capa ventana (CdS) se encuentra cerca de la banda de valencia del absorbente formando una zona de recombinación donde los electrones de la capa ventana se recombinan con los huecos de la capa absorbente a través de los estados de la interface reduciendo el voltaje de corto circuito. Por otra parte, al hacer una comparación entre la Figura 4.13 con la Figura 4.11 se observa que el cambio entre el ITO por el FTO remueve el alineamiento tipo I o “tipo pico” que anteriormente se encontraba en la interface CdS/ITO, es decir, se puede observar en la interface CdS/FTO simplemente se prolonga el alineamiento tipo II de la interface Sb₂Se₃/CdS. Cabe mencionar que el

cambio de estas capas genera un incremento del 0.02% en la eficiencia, así como un incremento en la densidad de corriente de corto circuito de 0.02 mA/cm² lo cual indica que al no tener el pico en la interface entre la capa ventana y la capa transparente de óxido se obtiene un mejor recorrido del electrón hacia el contacto.

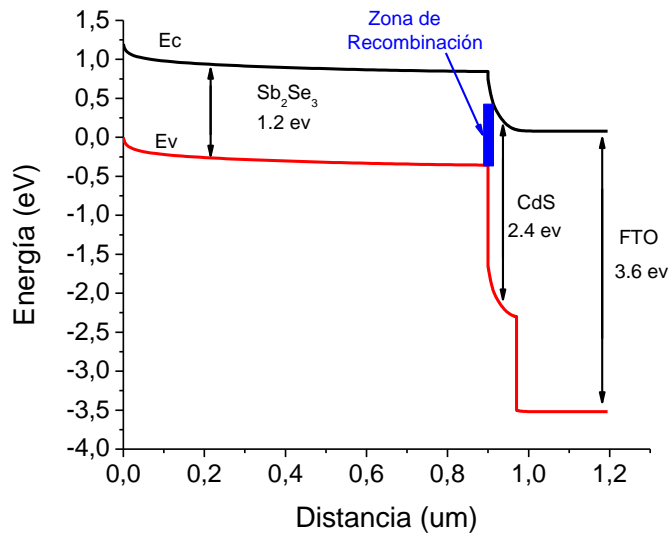


Figura 4.13. Diagrama de bandas de la estructura FTO/CdS/Sb₂Se₃/Au

4.4 Evaluación de la estructura FTO/WS₂/Sb₂Se₃/Au

A partir de los datos mostrados en la Tabla 3.1 se realiza el cambio de la capa ventana entre el CdS por el WS₂. En la Figura 4.14 a) se muestra la curva J-V con los valores de los cuatro parámetros esenciales de la celda solar; mientras que en la Figura 4.14 b) se muestra la comparación entre la celda solar FTO/CdS/Sb₂Se₃/Au y FTO/WS₂/Sb₂Se₃/Au observando una disminución del V_{oc} al utilizar el WS₂ como capa ventana, este mismo comportamiento se ve reflejado en la eficiencia del dispositivo pasando de 7.61 a 7.51%. La J_{sc} tiene un ligero incremento el cual es considerado como un comportamiento constante. La disminución del V_{oc} favorece la forma cuadrada ideal del factor de llenado (FF) haciendo que este incremente de 59.81 a 61.97%. La comparación de los cuatro parámetros de las estructuras se puede observar en la Tabla 4.6.

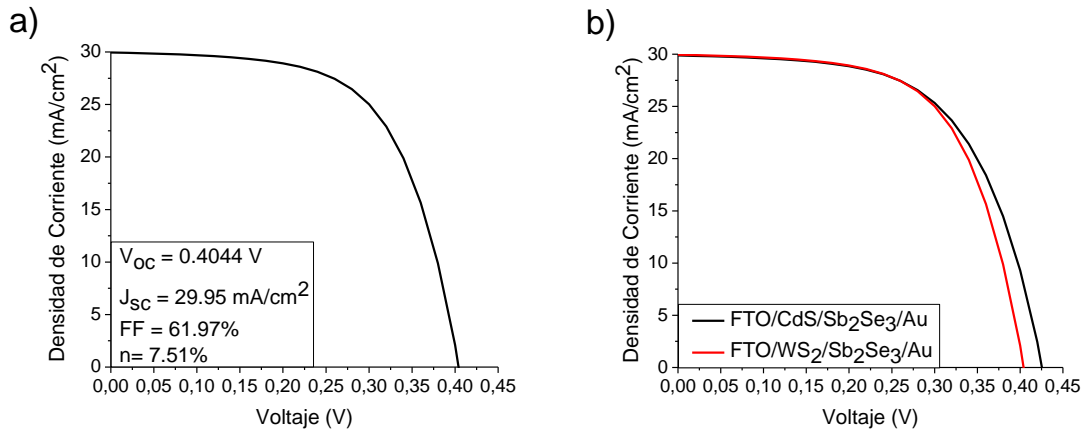


Figura 4.14. a) Gráfico J-V celda solar FTO/WS₂/Sb₂Se₃/Au b) comparación entre capas ventana.

Tabla 4.6 Comparación de V_{oc}, J_{sc}, FF y η entre el CdS y WS₂ como capa ventana

Estructura	V _{oc} (V)	J _{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
FTO/CdS/Sb ₂ Se ₃ /Au	0.4260	29.88	59.81	7.61
FTO/WS ₂ /Sb ₂ Se ₃ /Au	0.4044	29.95	61.97	7.51

4.4.1 Diagrama de Bandas de la estructura FTO/WS₂/Sb₂Se₃/Au

En la Figura 4.15 se observa el diagrama de bandas de la estructura FTO/WS₂/Sb₂Se₃/Au donde se muestra una alineación tipo II o “tipo acantilado” en la interface entre el Sb₂Se₃/WS₂ indicando la existencia de una zona de recombinación entre los electrones de la capa ventana y los huecos de la capa absorbente a través de los estados de la interface. Dado que generalmente este tipo de alineación se ve reflejado en una disminución del V_{oc} y observando que el cambio de la capa ventana entre el CdS por WS₂ denota una ligera disminución en el V_{oc} esto sugiere que hay una mayor aproximación entre banda de conducción de la capa ventana y la banda de valencia de la capa absorbente. Finalmente, el ligero cambio en la J_{sc} indica un mejor trayecto del electrón de la capa ventana hacia el contacto.

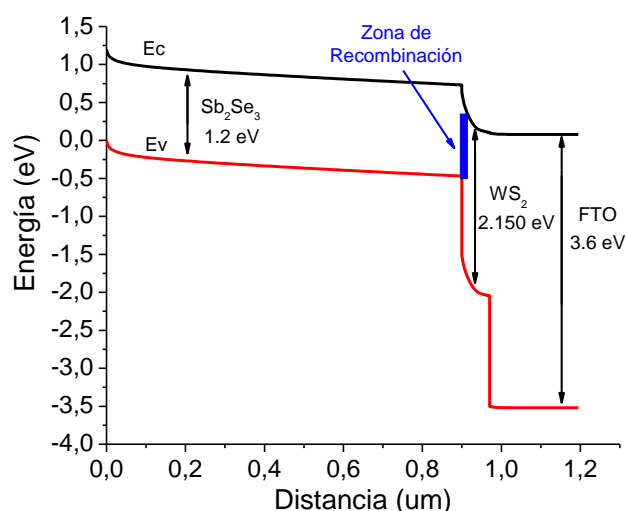


Figura 4.15. Diagrama de bandas de la estructura FTO/WS₂/Sb₂Se₃/Au

4.5 Análisis del desempeño de las capas de la celda solar FTO/WS₂/Sb₂Se₃/Au

4.5.1 Capa transparente conductora de óxido

Una vez obtenida la estructura base de la celda solar se prosigue con la optimización del dispositivo. En primer lugar, se realiza un barrido a diferentes espesores de la capa transparente de óxidos (FTO) entre 50 a 500 nm. A partir de este barrido se puede observar en la Figura 4.16 las curvas J-V a diferentes espesores de la capa FTO dentro de la cuál únicamente destaca la curva azul a 500 nm; esto es debido a que todos los gráficos se superponen, es decir, no se observa alguna variación importante en la J_{sc} o en el V_{oc} que provoquen un cambio en los parámetros del dispositivo. Por ende, se decidió tomar el grosor del FTO en 250 nm siendo un valor bastante común, además, de ser el grosor óptimo antes de disminuir una centésima de eficiencia.

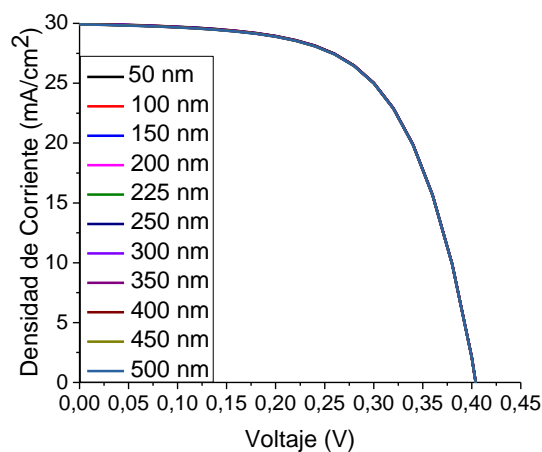


Figura 4.16. Curvas J-V a diferentes espesores.

4.5.2 Capa Ventana

4.5.2.1 Espesor de la capa WS₂

Posteriormente se optimizó la capa ventana comenzando por la variación del espesor entre 10 a 100 nm. En la Figura 4.17 a) se muestra el comportamiento del V_{oc} y la J_{sc} con respecto a la variación del espesor de la capa ventana, observando un comportamiento creciente en el rango de las diezmilésimas del voltaje de circuito abierto hasta llegar a un máximo de 0.4045 V, por otro lado, la densidad de corriente decrece en el rango de la centésimas a partir de espesores mayores a 50 nm, sin embargo, la poca variación del V_{oc} y J_{sc} se muestra en la Figura 4.17 b) ya que las curvas J-V a diferentes espesores se superponen, lo cual indica que la variación del espesor de la capa ventana entre 10 a 70 nm no afecta de manera importante la eficiencia del dispositivo, aunque cabe mencionar que a partir de espesores mayores a 70 nm la eficiencia empieza a decrecer de manera importante, por ende se decide tomar el espesor de la capa ventana a 70 nm obteniendo los siguientes valores: $V_{oc} = 0.4044$ V, $J_{sc} = 29.948$ mA/cm², FF = 61.97 % y $\eta = 7.51$ %.

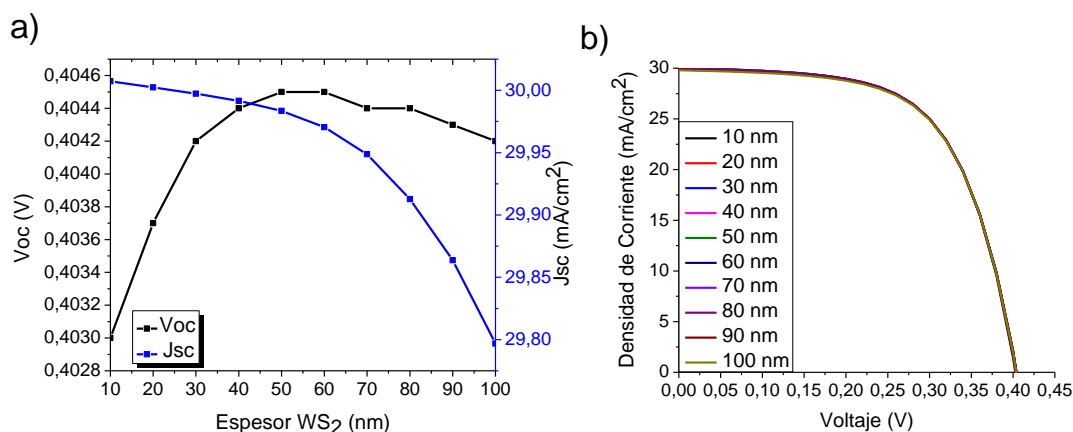


Figura 4.17. a) V_{oc} , J_{sc} vs Espesor de WS₂ b) Curvas J-V a diferentes espesores de WS₂

4.5.2.2 Concentración de donadores WS₂

La concentración de portadores es el siguiente parámetro por optimizar dentro del rango de 1×10^{12} a 1×10^{19} (1/cm³). En la Figura 4.18 a) y b) se muestra el comportamiento del V_{oc} , J_{sc} , FF y η con respecto a la variación de la concentración de donadores. Entre concentraciones de 1×10^{12} a 1×10^{15} (1/cm³) el V_{oc} , J_{sc} , FF y η se mantienen constantes, sin embargo, a mayores concentraciones de 1×10^{15} (1/cm³) comienzan cambios importantes en el dispositivo. La J_{sc} comienza a incrementar hasta llegar a un máximo de 29.97 (mA/cm²) a una concentración de 1×10^{18} (1/cm³) para después comenzar a decrecer. El V_{oc} comienza a decrecer de manera rápida indicando un incremento en la

recombinación a mayores concentraciones de portadores. El FF se ve beneficiado por los cambios del V_{oc} y J_{sc} ya que comienza a obtener su forma cuadrada ideal como se muestra en la Figura 4.18 c). La eficiencia también se ve beneficiada por el incremento de la J_{sc} de tal manera que continúa incrementándose a mayores concentraciones de donadores como se muestra en la Figura 4.18 b). Después de realizar esta variación se escoge la concentración de donadores de 1×10^{18} ($1/\text{cm}^3$) ya que se obtiene un valor máximo de la J_{sc} sin perder tanto V_{oc} obteniendo una eficiencia de 7.51% como se muestra en la Figura 4.18 d) junto con la curva J-V.

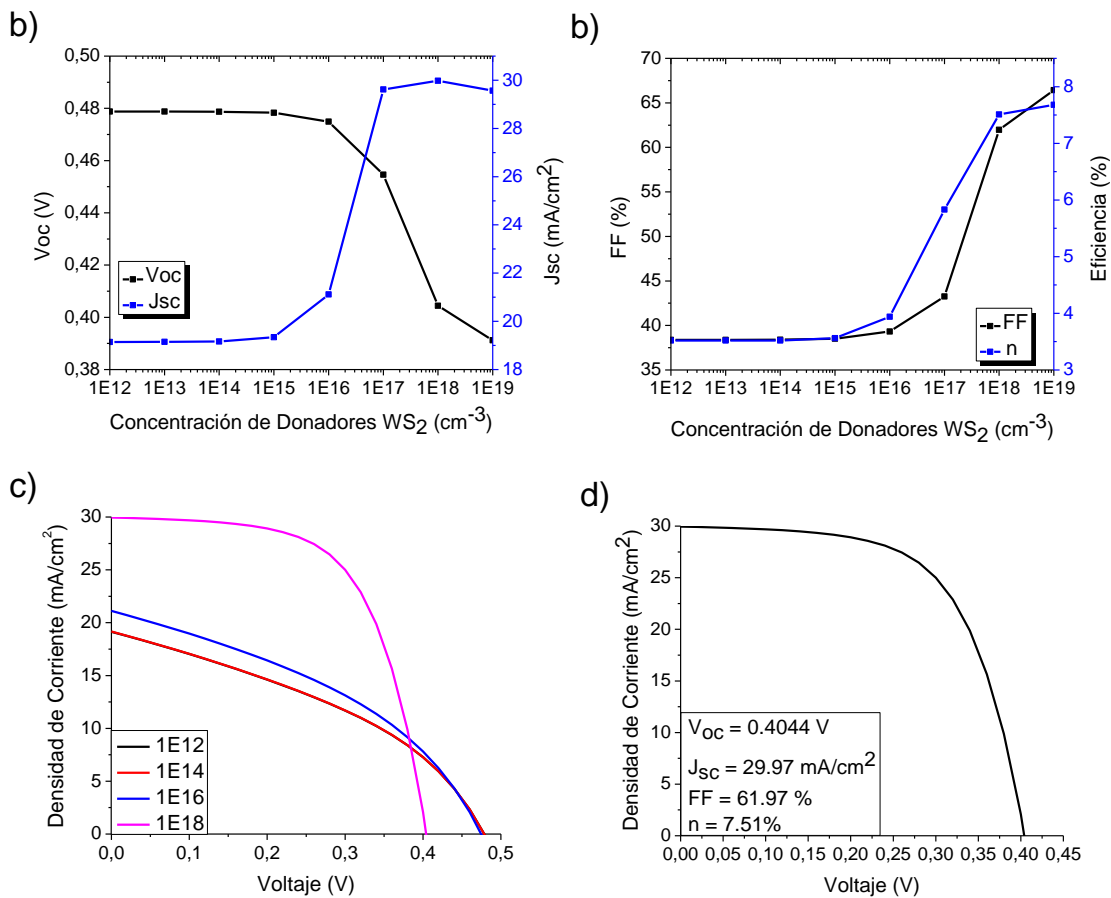


Figura 4.18. Concentración de donadores vs a) V_{oc} , J_{sc} b) FF, n . c) Curvas J-V a diferentes concentraciones de donadores d) Curva J-V a una concentración de 1×10^{18} ($1/\text{cm}^3$)

4.5.2.3 Densidad de defectos de WS_2

El último parámetro por optimizar de la capa ventana son los defectos aceptores los cuales se variaron entre 1×10^{10} hasta 1×10^{18} ($1/\text{cm}^3$). Los cuatro parámetros se mantienen constantes en densidades menores a 1×10^{17} ($1/\text{cm}^3$). La J_{sc} , el FF y la eficiencia decrecen a densidades mayores de 1×10^{17} ($1/\text{cm}^3$), mientras que el V_{oc} tiene un ligero incremento como se muestra en la Figura 4.19 a) y b). Este comportamiento

indica que la densidad de defectos en el rango de 1×10^{10} a 1×10^{18} ($1/\text{cm}^3$) de la capa ventana no tiene un gran impacto en la eficiencia final del dispositivo ya que a altas densidades de defectos como 1×10^{18} ($1/\text{cm}^3$) la eficiencia del dispositivo permanece en el mismo orden de magnitud.

En la Figura 4.19 c) se muestran la comparación de las curvas J-V a diferentes densidades de defectos observando dos curvas, un rosa y una verde indicando las densidades de defectos a 1×10^{17} y 1×10^{18} ($1/\text{cm}^3$) respectivamente; mostrando que las curvas a densidades de defectos menores a 1×10^{17} ($1/\text{cm}^3$) se superponen. Por ende, se decidió tomar la densidad de defectos del WS_2 de 1×10^{17} ($1/\text{cm}^3$) ya que es la mayor densidad de defectos que puede tener la capa ventana sin perder eficiencia e incrementando su V_{oc} .

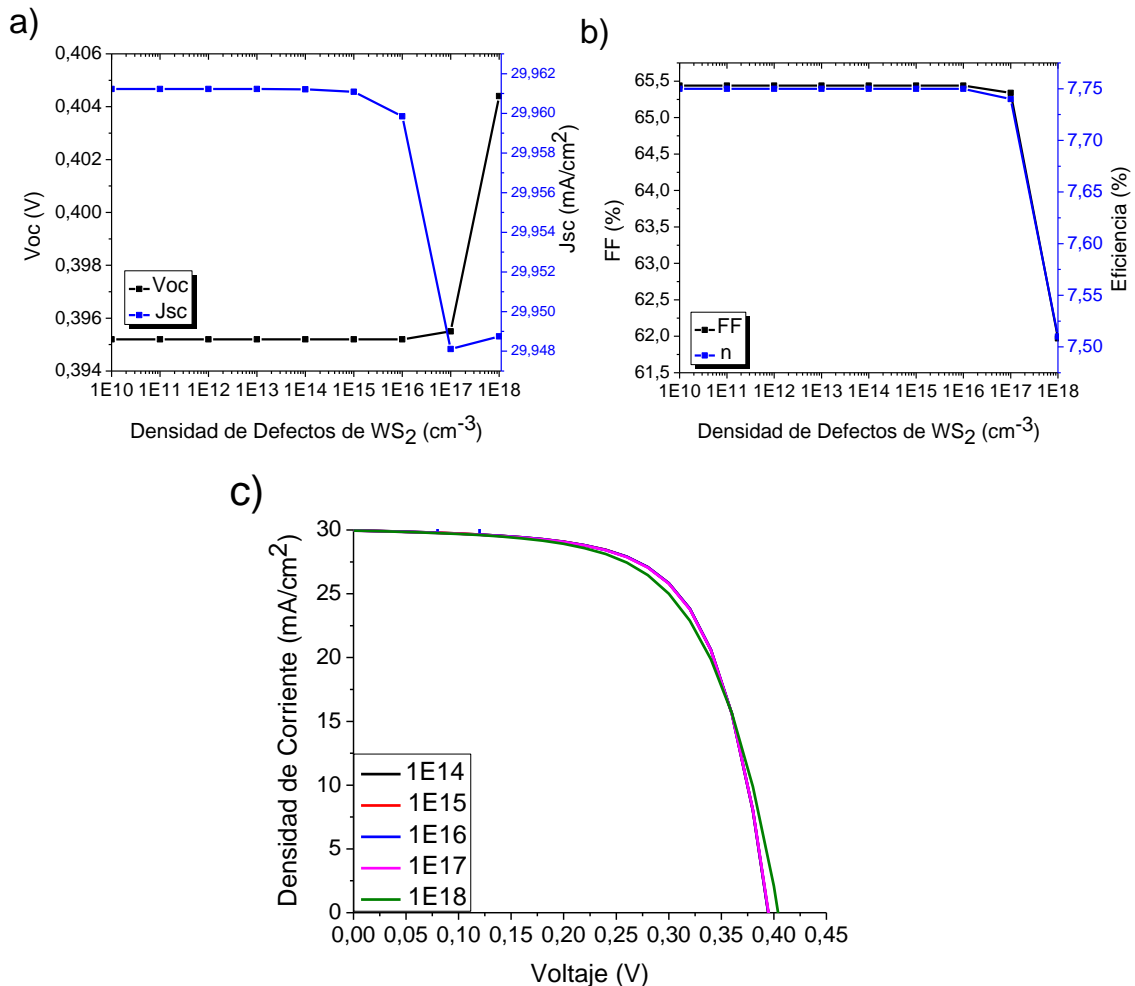
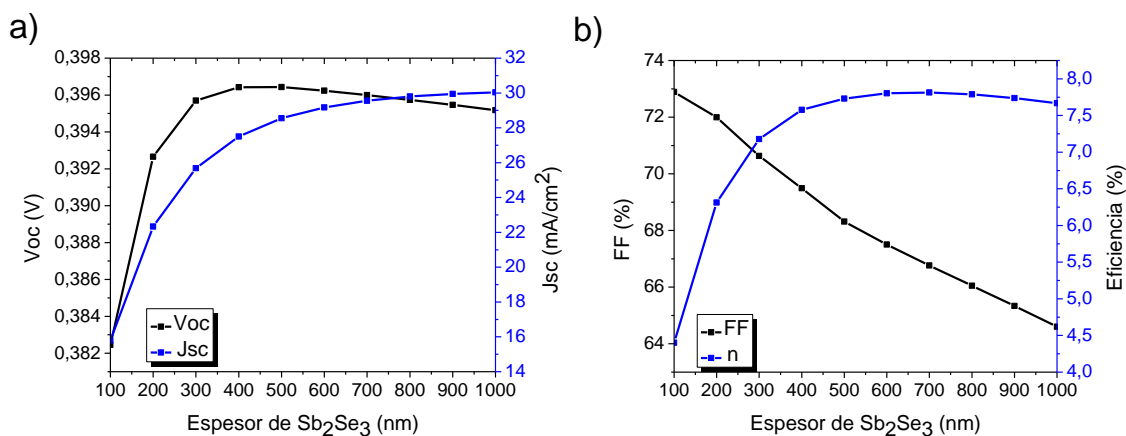


Figura 4.19. Densidad de defectos de WS_2 vs a) V_{oc} , J_{sc} b) FF, η , c) Comparación de curvas J-V a diferentes densidades de defectos.

4.5.3 Capa Absorbente

4.5.3.1 Espesor de Sb_2Se_3

La capa absorbente es el siguiente parámetro por optimizar comenzando con el espesor dentro del rango de 100 a 1000 nm. En la Figura 4.20 a) y b) se muestra el comportamiento de los cuatro parámetros ante la variación del espesor. La J_{sc} aumenta conforme se incrementa el espesor de la capa absorbente debido al mismo incremento de los pares electrón hueco. El V_{oc} tiene un ligero incremento hasta llegar a un máximo a un espesor de 400 nm para comenzar a decrecer debido a una mayor recombinación en el dispositivo. El FF es un parámetro que comienza a disminuir de manera muy pronunciada a medida que aumenta el espesor; en la Figura 4.20 c) se observa el cambio en la forma cuadrada ideal de FF a partir de las curvas J-V a diferentes espesores de Sb_2Se_3 . La eficiencia tiene un comportamiento parecido al V_{oc} , en donde comienza a incrementar conforme aumenta el espesor hasta llegar a un máximo a un espesor de 600 nm para luego tener una ligera disminución. La Figura 4.20 c) muestra como a espesores mayores a 700 nm las curvas J-V tienen una ligera superposición indicando un ligero aumento en la J_{sc} , por ende, se decidió tomar el espesor de la capa absorbente en 700 nm mostrando en la Figura 4.20 d) la curva J-V y los cuatro parámetros característicos de la celda solar a este espesor obteniendo una eficiencia de 7.81%.



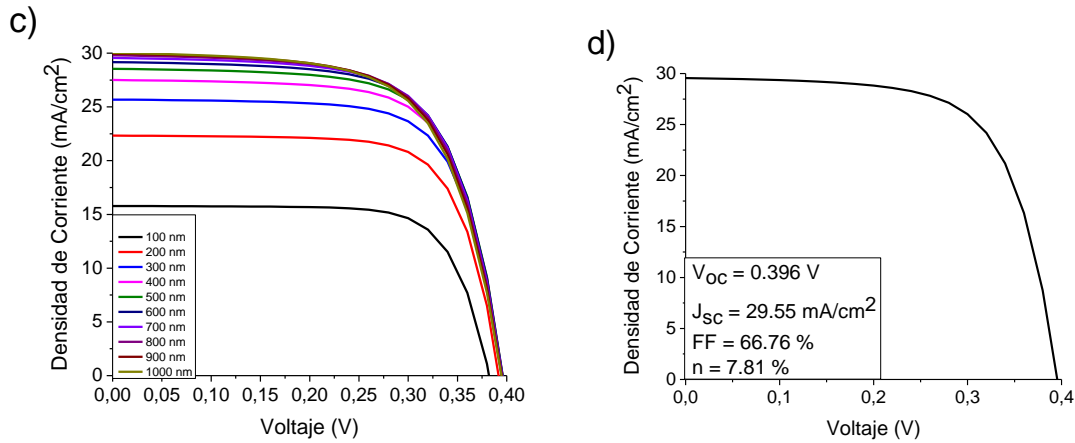


Figura 4.20 Espesor de WS₂ vs a) V_{oc} , J_{sc} b) FF y n , c) Curvas J-V a diferentes espesores, d) Curva J – V a 700 nm de espesor de Sb₂Se₃.

4.5.3.2 Concentración aceptores del Sb₂Se₃

La optimización de la concentración de aceptores del Sb₂Se₃ se realiza en el rango de 1×10^{12} a 1×10^{18} ($1/\text{cm}^3$). En la Figura 4.21 a) y b) se muestra el comportamiento del V_{oc} , J_{sc} , FF y la eficiencia conforme la variación de la concentración aceptores. El V_{oc} mantiene un comportamiento constante a concentraciones menores a 1×10^{17} ($1/\text{cm}^3$) aunque a concentraciones mayores muestra un gran incremento. La J_{sc} se mantiene constante hasta una concentración de 1×10^{15} ($1/\text{cm}^3$), sin embargo, a concentraciones mayores comienza a decrecer de manera importante debido a la gran cantidad de portadores minoritarios del dispositivo. Estos cambios en el V_{oc} y J_{sc} generan irregularidades en la forma ideal cuadrada del FF como se muestra en la Figura 4.21 c). La eficiencia tiene un comportamiento similar a la J_{sc} , ya que se mantiene constante hasta una concentración de 1×10^{14} ($1/\text{cm}^3$) pero comienza a decrecer a mayores concentraciones por la misma reducción de la J_{sc} . La Figura 4.21 c) muestra las curvas J-V a diferentes concentraciones de aceptores del Sb₂Se₃; en donde las primeras tres curvas, entre concentraciones de 1×10^{12} hasta 1×10^{14} ($1/\text{cm}^3$), se superponen indicando un comportamiento constante del V_{oc} y de la J_{sc} . Por ende, se tomó la concentración de 1×10^{13} ($1/\text{cm}^3$) ya que mantiene el V_{oc} , J_{sc} y la eficiencia constante sin perder la forma ideal cuadrada del FF. En la Figura 4.21 d) se muestra la curva J – V y los cuatro parámetros de la celda solar a una concentración de 1×10^{13} ($1/\text{cm}^3$) obteniendo una eficiencia de 7.82%.

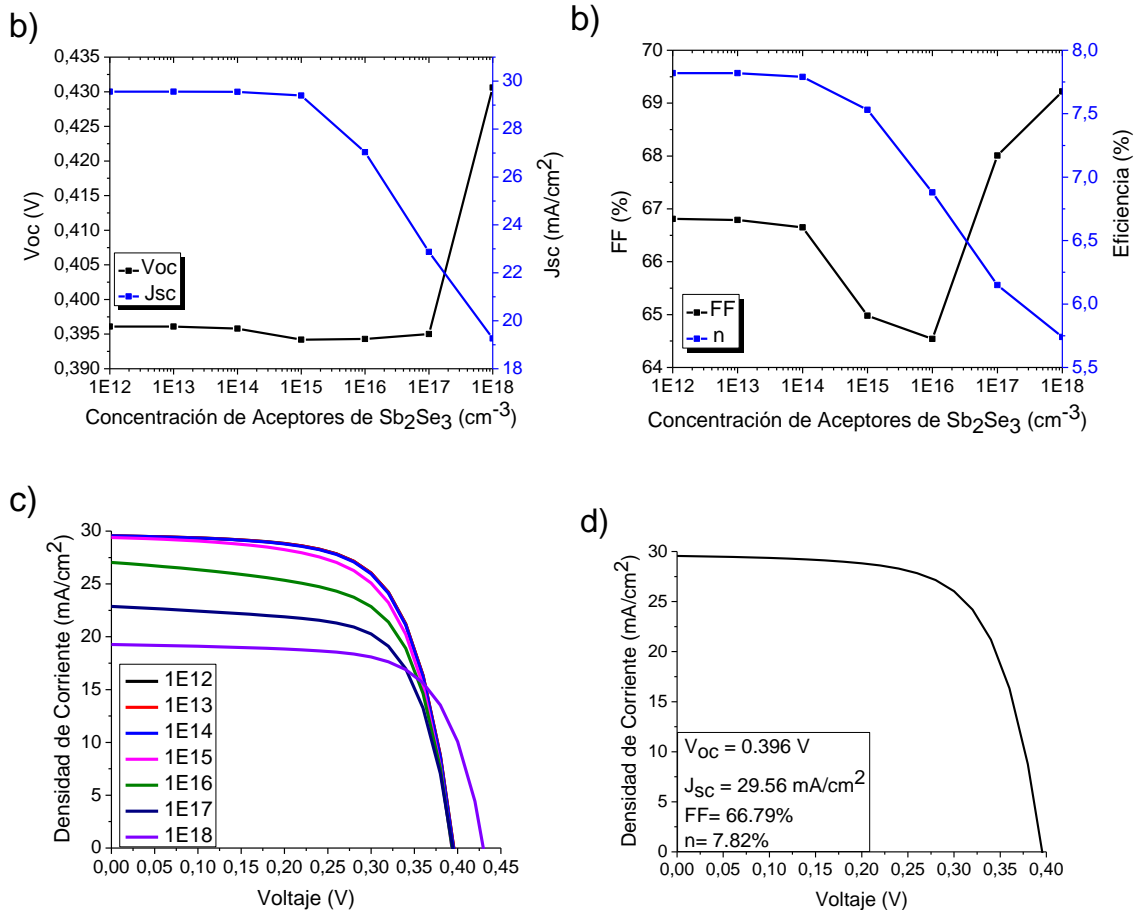


Figura 4.21. Concentración de aceptores vs a) V_{oc} , J_{sc} b) FF y η , c) Curvas J-V a diferentes concentraciones de aceptores d) Curva J-V a concentración de aceptores de 1×10^{13} ($1/cm^3$)

4.5.3.3 Densidad de defectos aceptores de Sb₂Se₃

La variación en la densidad de defectos aceptores entre 1×10^{10} a 1×10^{18} ($1/cm^3$) muestra que los cuatro parámetros tienen el mismo comportamiento, es decir, se mantienen constantes a densidades menores a 1×10^{15} ($1/cm^3$), sin embargo, a densidades mayores todos decrecen en la misma proporción como se muestra en la Figura 4.22 a) y b). En la Figura 4.22 c) se muestran las curvas J-V a diferentes densidades de defectos aceptores del Sb₂Se₃ mostrando el cambio en las curvas a partir de densidades de defectos mayores a 1×10^{15} ($1/cm^3$). Por ende, se escoge la densidad de defectos de 1×10^{14} ($1/cm^3$) ya que es límite de defectos aceptores que se puede tener sin que la eficiencia de 7.82% se vea afectada.

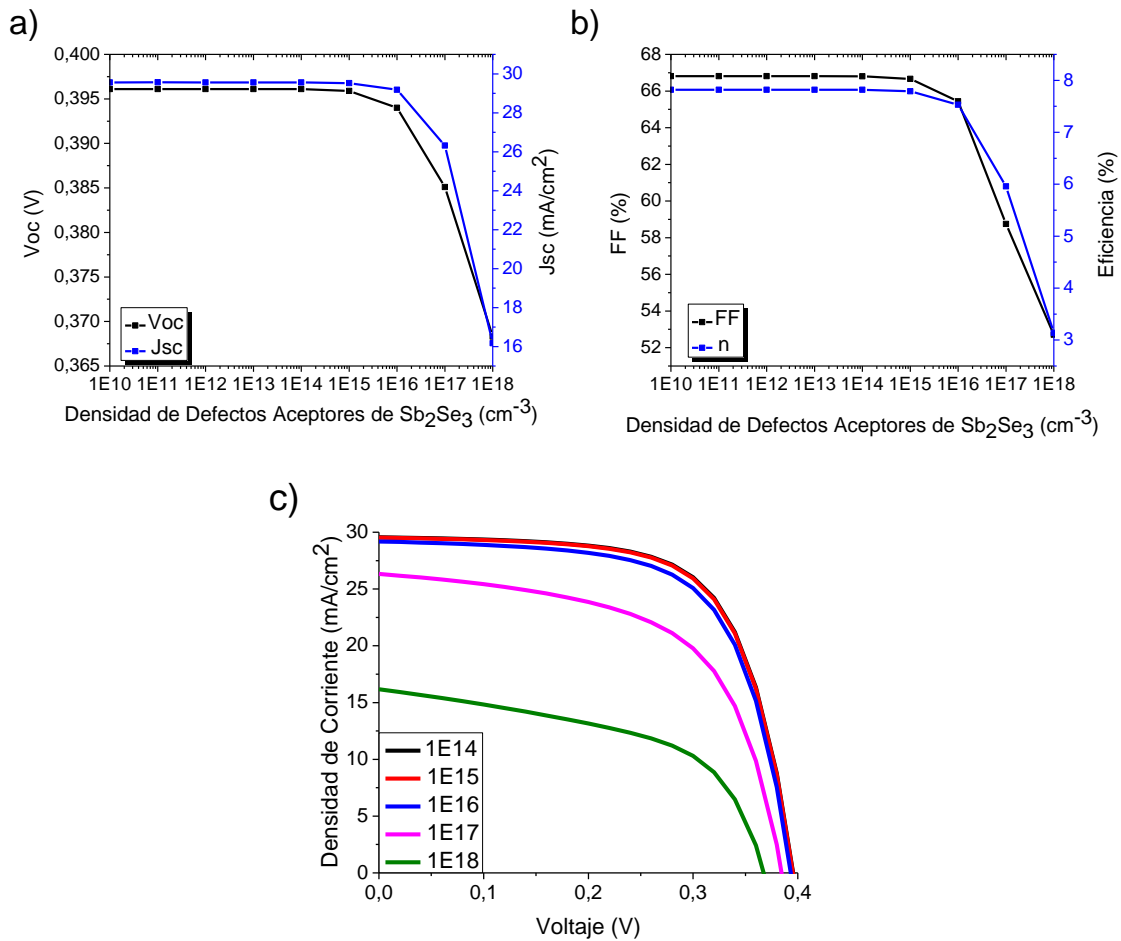


Figura 4.22. Densidad de defectos aceptores vs a) V_{oc} , J_{sc} b) FF y η , c) comparación de densidades de defectos aceptores en Gráfico J-V.

4.5.3.4 Densidad de defectos donadores de Sb_2Se_3

La densidad de defectos donadores se varió entre 1×10^{10} a 1×10^{15} ($1/\text{cm}^3$). En la Figura 4.23 a) y b) se observa el comportamiento del V_{oc} , la J_{sc} , el FF y la eficiencia con respecto a la variación de la densidad de defectos donadores. En donde los 4 parámetros se mantienen constantes a densidades menores de 1×10^{13} ($1/\text{cm}^3$), sin embargo, estos comienzan a disminuir de manera importante a densidades mayores. En la Figura 4.23 c) se muestran las curvas J-V a diferentes densidades de defectos donadores observando como a densidades mayores a 1×10^{13} ($1/\text{cm}^3$) comienzan a cambiar las curvas. Por ende, se toma la densidad de defectos donadores en 1×10^{13} ($1/\text{cm}^3$) debido a que es una densidad de defectos más cercana a la realidad pese que a menores densidad de defectos se obtienen mayores eficiencias.

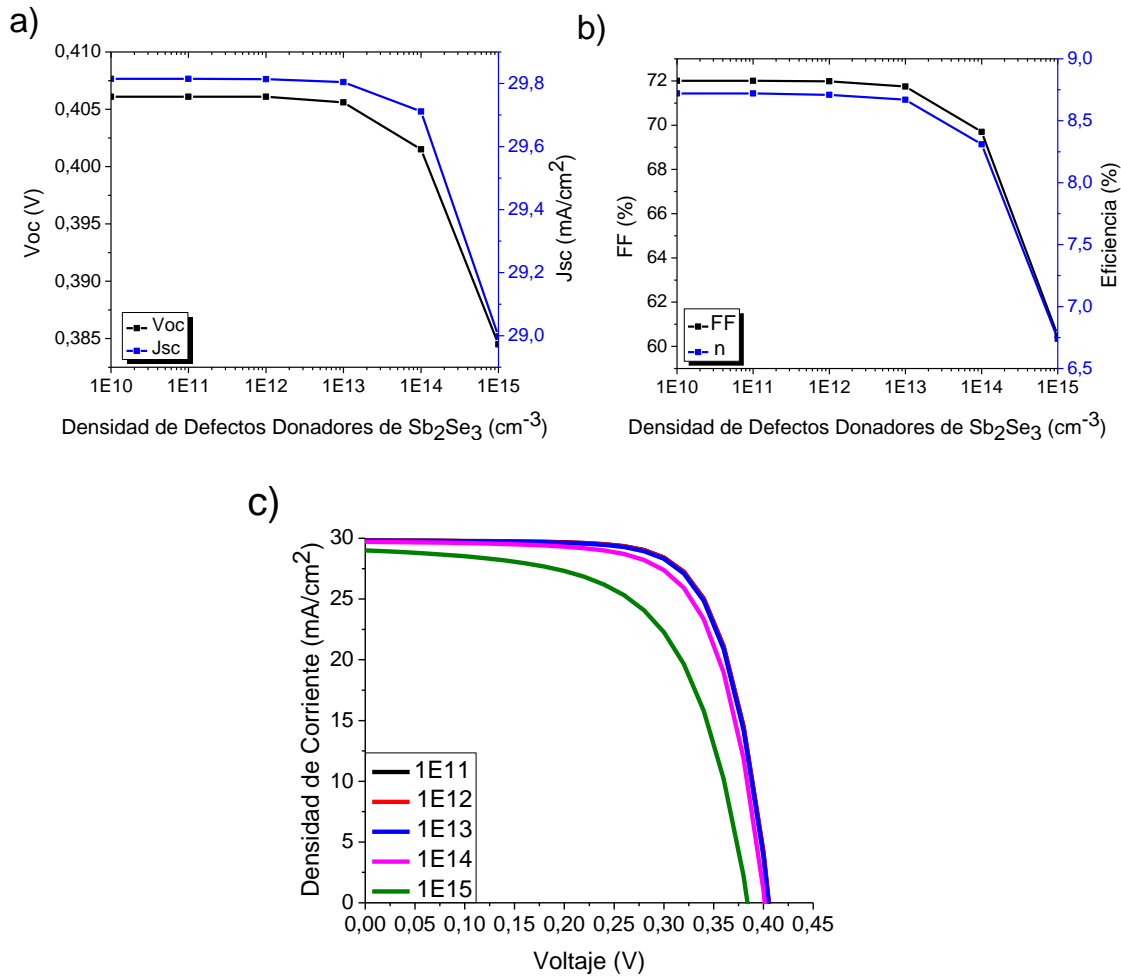


Figura 4.23. Densidad de defectos donadores vs a) V_{oc} , J_{sc} b) FF y η , c) Comparación de densidades de defectos donadores por gráfico J-V.

4.5.4 Interfaz

4.5.4.1 Densidad de defectos en la interfaz.

Finalmente, se realizó la optimización de los defectos en la interfaz entre 1×10^{10} a 1×10^{16} ($1/\text{cm}^2$). En la Figura 4.24 a) y b) se observa el comportamiento del V_{oc} , la J_{sc} , el FF y la eficiencia con respecto a la variación de la densidad de defectos en la interfaz. El V_{oc} y la eficiencia tienen un comportamiento similar ya que se mantienen constantes entre densidades de 1×10^{10} a 1×10^{11} ($1/\text{cm}^2$) sin embargo, a densidades mayores comienzan a decrecer de manera lineal. La variación del V_{oc} afecta de manera directa el comportamiento del FF el cual obtiene su máximo a una densidad de 1×10^{12} ($1/\text{cm}^2$), se puede observar en la Figura 4.24 c) las diferentes formas que obtiene el FF al incrementar la densidad de defectos en la interfaz. En la Figura 4.24 a) se observa una ligera variación en la J_{sc} , sin embargo, esta variación está en el orden de las centenas lo cual se confirma en la Figura 4.24 c) ya que todas las curvas J-V parecen llegar a una misma J_{sc} mostrando un comportamiento constante de J_{sc} conforme al incremento de la

densidad de defectos en la interfaz. A partir de estos resultados se decide escoger la densidad de defectos en la interfaz como 1×10^{12} ($1/\text{cm}^2$) debido a que tiene tanto la J_{sc} como el FF más alto que las otras densidades, además de ser un valor más cercano a la realidad a pesar de no tener la eficiencia más alta. En la Figura 4.24 d) se muestra la curva J-V junto con los valores de los parámetros esenciales de la celda solar FTO/ $\text{WS}_2/\text{Sb}_2\text{Se}_3/\text{Au}$ ya parametrizada obteniendo una eficiencia final de 16.11%.

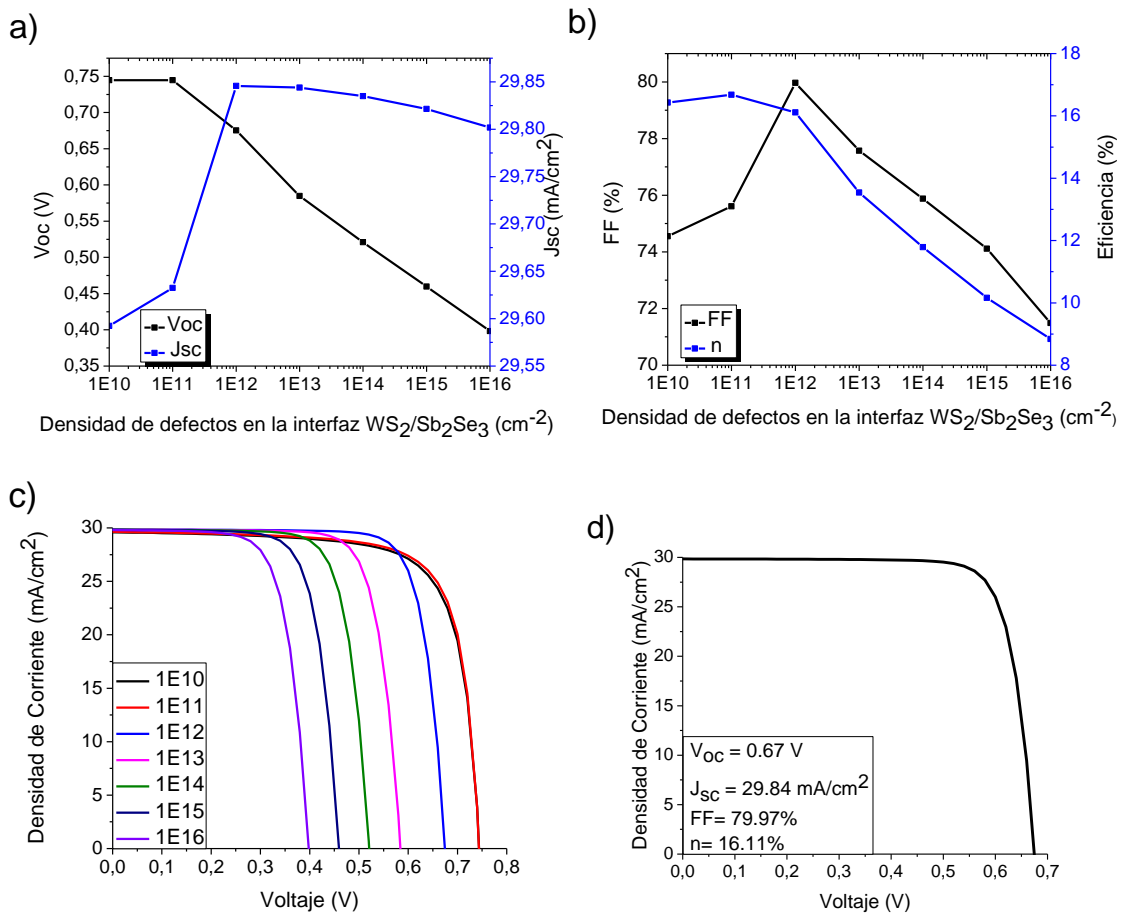


Figura 4.24. Densidad de defectos en la interfaz vs a) V_{oc} , J_{sc} b) FF y η . c) Curvas J-V a diferentes densidades de defecto en la interfaz d) Curva J-V Final.

Capítulo V. Conclusiones

En el presente trabajo se realizó la evaluación del desempeño de una celda solar con la estructura ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au mediante simulaciones con SCAPS-1D y se realizó la variación de diferentes parámetros con el fin de entender como influyen en la eficiencia final del dispositivo.

Partiendo de la idealidad de la estructura ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au, es decir, sin contemplar las densidades de defectos del material y de la interfaz, la celda solar alcanza una eficiencia del 24.88%. Sin embargo, la transmitancia del ITO provoca una disminución la J_{sc} debido a la disminución de pares electrón hueco fotogenerados, de tal manera que disminuye la del dispositivo a 19.75%.

El análisis de la densidad de defectos del CdS muestra que dentro del rango seleccionado en la simulación de 1×10^{12} a 1×10^{18} (1/cm³) no afecta de manera directa la eficiencia final del dispositivo.

La variación de la densidad de defectos aceptores del Sb₂Se₃ entre 1×10^{10} a 1×10^{16} (1/cm³) muestra que la densidad máxima de defectos aceptores es de 1×10^{13} (1/cm³) ya que a densidades mayores se incrementan la tasa de recombinación provocando una disminución rápida de la eficiencia del dispositivo. Por otro lado, la variación de la densidad de defectos donadores del Sb₂Se₃ entre 1×10^{10} a 1×10^{16} (1/cm³) muestra que la densidad máxima de defectos donadores es de 1×10^{13} (1/cm³).

Se realizó la comparación de los resultados experimentales reportados para una estructura ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au con aquellos obtenidos mediante simulación con SCAPS-1D. Partiendo de la variación de la presencia de defectos en las películas e interfaces, se logró ajustar una curva teórica con respecto a la reportada experimentalmente cuando la densidad de defectos en la interfaz correspondía a 7.6×10^{15} (1/cm³). A partir de esta simulación se observó que la densidad de defectos en la interfaz es la que define en gran medida la eficiencia final del dispositivo ya que esta densidad de defectos está altamente relacionada con el alineamiento de bandas de los materiales que a su vez depende las brechas energéticas, así como de las afinidades electrónicas. Entre mejor sea el alineamiento de bandas menor densidad de defectos tendrá en la interface viéndose reflejado en una buena eficiencia del dispositivo.

Una vez obtenida la simulación de la celda solar con la estructura ITO/CdS/Sb₂Se₃/Au se cambió la capa de óxidos conductora transparente de ITO por el FTO en donde se obtuvo un ligero incremento del 0.02% de la eficiencia, así como un incremento de 0.02 mA/cm² de la J_{sc} el cual se debe a su diferencia en la afinidad

electrónica siendo de 4.1 y 4.0 eV respectivamente. Esta ligera diferencia se ve reflejada en la aparición de un pico en la interface CdS/ITO el cuál perturba el adecuado flujo de electrones de la capa ventana hacia el contacto, disminuyendo la eficiencia y la J_{sc} del dispositivo. Por ende, el uso de FTO como capa de óxido conductor transparente del dispositivo es una de las maneras para evitar la formación de un pico en la interface y así obtener un ligero incremento de la eficiencia del dispositivo.

Se realizó el estudio y evaluación de una celda solar con la estructura FTO/WS₂/Sb₂Se₃/Au realizando el reemplazo del CdS por el WS₂ como capa ventana. Una vez que se obtuvo la estructura propuesta se variaron parámetros como los espesores de la capa ventana y la capa absorbente, la concentración de donadores y aceptores y la densidad de defectos aceptores, donadores y en el interfaz con el fin de optimizar el dispositivo. En la estructura propuesta se presentó una disminución de la eficiencia y del Voc lo cual se atribuye a la diferencia de brechas energéticas, ya que el WS₂ tiene una menor brecha de energía lo cual al realizarse el alineamiento de bandas y obtener un alineamiento tipo II o “tipo acantilado” se obtiene una distancia más estrecha entre la banda de conducción del WS₂ y la banda de valencia del Sb₂Se₃ provocando así una mayor recombinación de los electrones del WS₂ con los huecos el Sb₂Se₃.

Al optimizar la celda solar de interés con la estructura FTO/WS₂/Sb₂Se₃/Au se observa que el espesor de la TCO entre 50 a 500 nm no afecta de manera directa la eficiencia final del dispositivo. La optimización de la capa de ventana de WS₂ muestra que la variación del espesor dentro del rango de 10 a 100 nm así como la densidad de defectos del WS₂ dentro del rango 1×10^{12} a $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ no afecta de manera directa la eficiencia final del dispositivo. Por otra parte, cuando se emplean concentraciones de donadores mayores de $1 \times 10^{18} (1/\text{cm}^3)$ en el WS₂, se obtienen eficiencias más altas, pero reduce el V_{oc} .

La optimización de la capa absorbente refleja un cambio importante en la eficiencia final del dispositivo. La variación del espesor de esta capa entre 100 a 1000 nm mostró se vio reflejado en un incremento de la eficiencia, el V_{oc} y J_{sc} por el aumento de la generación de pares electrón-hueco, sin embargo, alcanza un punto de saturación en 700 nm en donde estos parámetros comienzan a decrecer favoreciendo una mayor tasa de recombinación.

Con concentraciones de aceptores del Sb₂Se₃ mayores a $1 \times 10^{13} (1/\text{cm}^3)$ la eficiencia del dispositivo comienza a decrecer de manera importante debido al aumento de portadores minoritarios en el dispositivo, por ende, el dopaje de este material con

otro tipo de elementos puede favorecer la formación de diferentes especies que pueden fungir como centros de recombinación los cuales decrecen la eficiencia final del dispositivo.

Las densidades de defectos aceptores del Sb_2Se_3 mostraron no afectar de manera importante la eficiencia final del dispositivo hasta densidades mayores a 1×10^{15} ($1/\text{cm}^3$). En cambio, la densidad de defectos donadores del Sb_2Se_3 resultó tener mayor impacto en la eficiencia ya que a densidades de 1×10^{13} ($1/\text{cm}^3$) la eficiencia del dispositivo comienza a decaer de manera abrupta. Por último, la densidad de defectos en la interfaz mostró ser el parámetro que tiene mayor importancia en la eficiencia final del dispositivo relacionado con el alineamiento de bandas de los dos materiales. Una mayor densidad de defectos en la interfaz se ve reflejado en un incremento de la recombinación de los electrones de la capa ventana con los huecos de la capa absorbente debido a la cercanía de éstas por el tipo de unión que tienen los materiales en la interfaz $\text{Sb}_2\text{Se}_3/\text{WS}_2$.

Finalmente, este trabajo muestra que tras la optimización de la celda solar $\text{FTO}/\text{WS}_2/\text{Sb}_2\text{Se}_3/\text{Au}$ es posible utilizar el WS_2 como sustituto de CdS como capa ventana en el desarrollo de celdas solares de Sb_2Se_3 . Este trabajo pretende ser una guía para otros investigadores para destacar la importancia sobre el análisis numérico y la posibilidad de desarrollar celdas solares empleando WS_2 como capa ventana.

Trabajo Futuro

Como parte de las alternativas para continuar desarrollando el presente trabajo se propone lo siguiente:

- Analizar y evaluar mediante SCAPS-1D el desempeño de diferentes estructuras de celdas solares basadas en películas de Sb_2Se_3 como capa absorbente de radiación IR.
- Comparar otros resultados experimentales de celdas solares basadas en Sb_2Se_3 con los obtenidos en el presente trabajo.
- Proponer y analizar mediante el uso de SCAPS-1D diferentes estructuras de celdas solares usando WS_2 como capa ventana.
- Obtener experimentalmente las celdas solares propuestas en el presente trabajo empleando sistemas de depósito en vacío y compararlas con los resultados obtenidos con las simulaciones por SCAPS-1D.

Referencias

- [1] Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología. (20 de abril de 2021). *Efecto ambiental y socioeconómico de la producción de energía eléctrica*. <https://www.cyd.conacyt.gob.mx/?p=articulo&id=482#:~:text=En%20M%C3%A9xico%2C%20la%20generaci%C3%B3n%20de,afectan%20la%20calidad%20del%20aire>.
- [2] Secretaria de Economía. (20 de abril de 2021). *Energías renovables*. https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/76391/DS_Energias_Renovables_ES.pdf
- [3] Secretaria de Energía. (20 de abril de 2021). *Prospectiva de energías renovables 2016 – 2030*. https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/177622/Prospectiva_de_Energias_Renovables_2016-2030.pdf
- [4] Neamen, D. A. (2003). *Semiconductors Physics and Devices Basic Principles*. (3rd ed). New Mexico: McGraw-Hill.
- [5] Fonash, S. (2010). *Solar cell device physics*. (2nd ed). United States of America. ELSEVIER
- [6] D. M. Chapin, C. S. Fuller. *A new silicon p-n junction photocell for converting solar radiation into electrical power*. Journal of applied physics. (1954); doi:10.1063/1.1721711
- [7] X. Wang, Z. M. Wang. (2010). *High-efficiency solar cells physics, materials and devices*. Springer.
- [8] X. Hu, J. Tao, G. Weng, J. Jiang, S. Chen, Z. Zhu, J. Chu. *Investigation of electrically-active defects in Sb₂Se₃ thin film solar cells with up to 5.91% efficiency via admittance spectroscopy*. Solar energy materials and solar cells. 186. (2018). 324 – 329.
- [9] T. Kashyap. *Which solar cell will prove to be a sustainable future asset?: a complete review*. International Journal of social science and economic research. Vol 06. (2021). 2780 – 2798.
- [10] J. Britt, C. Ferekides. *Thin-film CdS/CdTe solar cell with 15.8% efficiency*. Applied physics letters. Vol 62. (1993).
- [11] M. Leng, M. Luo, C. Chen, S. Qin, J. Chen, J. Zhong, J. Tang. *Selenization of Sb₂Se₃ absorber layer: An efficient step to improve device performance of CdS/Sb₂Se₃ solar cells*. Applied Physics Letters. 105. (2014). 1-5.
- [12] NREL. Best research-cell efficiencies. National Renewable Energy Laboratory. <https://www.nrel.gov/pv/assets/pdfs/cell-pv-eff-thinfilm-rev210726.pdf>
- [13] H. Maghraoui-Meherzi, T. B. Nasr, M. Dachraoui. *Synthesis, structure and optical properties of Sb₂Se₃*. Materials science in semiconductor processing. 16. (2013). 179 – 184.
- [14] K.Y. Rajure, C.D. Lokhande, C.H. Bhosale. *A comparative study of the properties of spray-deposited Sb₂Se₃ thin films prepared from aqueous and nonaqueous media*. Materials Research Bulletin 34. (1999). 1079 – 1087.
- [15] Y. Yu, R. H. Wang, Q. Chen, L. M. Peng. *High-quality ultralong Sb₂Se₃ and Sb₂S₃ nanoribbons on a large scale via a simple chemical route*. The journal of physical chemistry b. 100. (2006). 13415 – 13419.
- [16] L. J. Phillips, C. N. Savory, O. S. Hutter, P. J. Yares, H. Shiel, S. Mariotti, L. Bowen, M. Birkett, K. Durose, D. O. Scanlon, J. D. Major. *Current enhancement via a TiO₂ window layer for CSS Sb₂Se₃ solar cells: performance limits and high Voc*. IEEE Journal of photovoltaics, vol 9. (2009). 544 – 551.

- [17] Kaushalya, S.L. Patel, A. Purohit, S. Chander, M. S. Dhaka, *Thermal annealing evolution to physical properties of ZnS thin films as buffer layer for solar cell applications*. Physica E: Low-dimensional systems and nanostructures. Vol 101. (2018). 174 – 177.
- [18] A. Jager-Waldau, M. Ch. Lux-Steiner, G. Jager-Waldau, E. Bucher. *WS2 thin film prepared by sulphurization*. Applied Surface Science. (1993). 731 – 736.
- [19] M. Huang, P. Xu, D. Han, J. Tang, S. Chen. *Complicated and unconventional defect properties of the quasi-one-dimensional photovoltaic semiconductor Sb₂Se₃*. ACS Appl. Mater. Interfaces. 11. (2019). 15564 – 15572.
- [20] A. Mavlonov, T. Razykov, F. Raziq, J. Gan, J. Chantana, Y. Kawano, T. Nishimura, H. Wei, A. Zakutayev, T. Minemoto, X. Zu, S. Li, L. Qiao. *A review of Sb₂Se₃ photovoltaic absorber materials and thin film solar cells*. Solar energy. 201. (2020). 227 – 246.
- [21] Z. Li, X. Liang, G. Li, H. Liu, H. Zhang, J. Guo, J. Chen, K. Shen, X. San, W. Yu, R. E. I. Schropp, Y. Mai. *9.2%-efficient core-shell structured antimony selenide nanorod array solar cells*. Nature communications. (2019). 1 – 9.
- [22] X. Wen, C. Chen, S. Lu, K. Li, R. Kondrotas, Y. Zhao, W. Chen, L. Gao, C. Wang, J. Zhang, G. Niu, J. Tang. *Vapor transport deposition of antimony selenide thin film solar cells with 7.6% efficiency*. Nature communications. 9. (2018).1 – 10.
- [23] E. Makovicky. *Crystal structures of sulfides and other chalcogenides*. Reviews in mineralogy and geochemistry. 61. (2006). 7 – 125.
- [24] K. Madal, S. Ghose, M. Mandal, D. Majumber, S. Talukdar, I. Chakraborty, S. K. Panda. *Chapter 2 -Notes on useful materials and synthesis through various chemical solution techniques*. Chemical solution sunthesis for materials desing and thin film deide applications, elsevier. (2021). 29 – 78.
- [25] T. L. Chu, S. Chu. *Thin films II-VI photovoltaics*”. Solid-State Electronics. Vol 38. (1995). 533 – 549.
- [26] W. Luo, J. J. Gaumet, P. Magri, S. Diliberto. F. Li. P. Franchetti, J. Ghanbaja, L. Mai. *Fast, green microwave-assisted synthesis of single crystalline Sb₂Se₃ nanowires towards promising lithium storage*. Journal of energy chemistry. 30. (2019). 27 – 33.
- [27] C. Liu, Y. Yuan, L. Cheng, J. Su, X. Zhang, X. Li, H. Zhang, M. Xu, J. Li. *A study on optical properties of Sb₂Se₃ thin films and resistive switching behavior in Ag/Sb₂Se₃/W heterojunctions*. Physics. 13. (2019).102228.
- [28] N. W. Tideswell, F. H. Kruse, J. D. McCullough. *The crystal structure of antimony selenide, Sb₂Se₃*. Acta crystallographica. 10. (1957). 99 - 102.
- [29] V. A. Majidzade. *Sb₂Se₃ Based solar cells: Obtaining and properties*. Chemical Problems. 2. (2020). 181 - 198.
- [30] R. Vadapoo, S. Krishnan, H. Yilmaz, C. Marin. *Electronic structure of antimony selenide (Sb₂Se₃) from GW calculations*. Physica status solidi b. 3. (2011). 700 – 705.
- [31] R. Kondrotas, C. Chen, J. Tang. *Sb₂Se₃ solar cells*. Joule. 2. (2018). 857 – 878.
- [32] A. M. Ganose, C. N. Savory, D. O. Scanlon. *Beyond methylammonium lead iodide: prospects for the emergent field of ns₂ containing solar absorbers*. Chemical communications. 53 (1). (2017). 20 – 44.

- [33] R. Caracas, X. Gonze. *First-principles study of the electronic properties of A₂B₃ minerals, with A=Bi, Sb and B= S, Se*. Physics and chemistry of minerals. 32. (2005). 295 – 300.
- [34] X. Liu, J. Chen, M. Luo, M. Leng, Z. Xia, Y. Zhou, S. Qin, D. J. Xue, L. Lv, H. Huang, D. Niu, J. Tang. *Thermal evaporation and characterization of Sb₂Se₃ thin films for substrate Sb₂Se₃/CdS solar cells*. ACS applied materials and interfaces. 13. (2014). 10687 – 10695.
- [35] K. Zeng, D. J. Xue, J. Tang. *Antimony selenide thin-film solar cells*. *Semiconductor science and technology*. 31. (2016). 1 – 13.
- [36] C. Chen, W. Li, C. Chen, M. Luo, X. Liu, K. Zeng, B. Yang, C. Zhang, J. Han, J. Tang. *Optical properties of amorphous and polycrystalline Sb₂Se₃ thin films prepared by thermal evaporation*. Applied physics letters. 107. (2015). 043905 – 1 – 043905 – 5.
- [37] T. Surek. *Crystal growth and materials research in photovoltaics: progress and challenges*. Journal of crystal growth. 275. (2005). 292 – 304.
- [38] Nelson, J. (2003). *The physics of solar cells*. UK: Imperial college press.
- [39] P. Kumar. (2017). *Organic solar cells Device Physics, processing, degradation and prevention*. Tayloy & Francis Group.
- [40] R. N. Bhattacharya, P. Pramanik. *A photoelectrochemical cell based on chemically deposited sb₂se₃ thin film electrode and dependence of deposition on various parameters*. Materials Science Solar Energy. 6.(1982). 317 – 322.
- [41] Y. Zhou, M. Leng, Z. Xia, J. Zhong, H. Song, Z. Liu, B. Yang, J. Zhang, J. Chen, K. Zhou, J. Han, Y. Cheng, J. Tang. *Solution-processed antimony selenide heterojunction solar cells*. Advanced energy materials. (2014). 1 – 8.
- [42] C. Chen, L. Wang, L. Gao, D. Nam, D. Li, K. Li, Y. Zhao, C. Ge, H. Cheong, H. Liu, H. Song, J. Tang. *6.5% certified efficiency Sb₂Se₃ solar cells using PbS colloidal Quantum Dot film as hole transporting layer*. American Chemical Society. (2017). 2125 – 2132.
- [43] O. S. Hutter, L. J. Phillips, K. Durose, J. D. Major. *6.6% efficient antimony selenide solar cells using grain structure control and an organic contact layer*. Solar energy materials and solar cells. (2018). 177 – 181.
- [44] L. Lin, L. Jiang, Y. Qiu, B. Fan. *Analysis of Sb₂Se₃/CdS based photovoltaic cell: A numerical simulation approach*. Journal of physics and chemistry of solids. 122. (2018). 19 – 24.
- [45] F. Baig, Y. H. Khattak, S. Beg, B. M. Soucase. *Numerical analysis of a novel CNT/Cu₂O/Sb₂Se₃/In₂S₃/ITO antimony selenide solar cell*. Optik – International journal for light and electron optics. 197. (2019). 1 – 8.
- [46] Ayala-Mato, F, Vigil-Galán O, Courel M, Nicolás-Marín MM. *Analysis of the efficiency in sb₂se₃ thin-film solar cells using alternative buffer layer in n-p and n-i-p structures by numerical simulation*. Research Square. (2021). 1 – 17.
- [47] A. T. Ngoupo, S. Ouédraogo, F. Zougmore, J. M. B. Ndjaka. *Numerical análisis of ultrathin Sb₂Se₃-based solar cells by SCAPS-1D numerical simulator device*. Chinese Journal of physics. 70. (2021). 1 – 13.
- [48] I. Gharibshahian, A. A. Orouji, S. Sharbati. *Towards high efficiency Cd-Free Sb₂Se₃ solar cells by the band alignment optimization*. Solar energy materials and solar cells. 212. (2020). 1 – 12.

- [49] F. Ayala-Mató, O. Vigil-Galán, D. Seuret-Jiménez, M. Courel, S. Fernández. *Evaluation of Cd1-xZnxS as electron transport layer in superstrate and inverted configurations of Sb2Se3 solar cells with n-i-p structure*. Semiconductor Science and Tecnology. 36. (2021). 1 – 19.
- [50] Z.Q. Li, M. Nim Z.D. Feng. *Simulation of the Sb2Se3 solar cell with a hole transport layer*. Materials Research Express. 7. (2020). 1 – 9.
- [51] F. Baig, Y. H. Khattak, A. Shuja, K. Riaz, B. M- Soucase. *Performance investigation of sb2se3 based solar cell by device optimization, band offset engineering and hole transport layer in SCAPS-1D*. Current applied physics. 20. (2020). 973 – 981.
- [52] A. Sunny, S. R. A. Ahmed. *Numerical simulation and performance evaluation of highly efficient Sb2Se3 solar cell with tin sulfide as hole transport layer*. Physica status solidi. 258. (2021). 1 – 14.
- [53] K. L. Chopra, P. D. Paulson, V. Dutta. *Thin-film solar cells: An Overview*. Progress in photovoltaics: research and applications. 12. (2004). 69-92.
- [54] H. Moualkia, S. Hariech, M. S. Aida. *Structural and optical properties of CdS thin films grown by chemical bath deposition*. Thin Solid Films. 518. (2009). 1259 – 1262.
- [55] T. Georgiou, H. Yang, R. Jalil, J. Chapman, K. S. Novoselov, A. Mishchenko. *Electrial and optical characterization of atomically thin WS2*. Dalton Transactions. 43. (2014). 10388 – 10391.
- [56] D. Jariwala, A. R. Davoyan, J. Wong, H. A. Atwater. *Van der Waals materials for atomically thin photovoltaics: promise and outlook*. ACS Photonics. (2017). 1-18.
- [57] F. Withers, O. Del Pozo-Zamudio, A. Mishchenko, A. P. Rooney, A. Gholina, K. Watanabe, T. Taniguchi, S. J. Haigh, A. K. Geim, A. I. Tartakovskii, K. S. Novoselov. *Light-emitting diodes by band-structure engineering in van der Waals heterostructures*. Nature materials. (2015). 1-6.
- [58] D. Ovchinnikov, A. Allain, Y.S. Huang, D. Dumcenco, A. Kis. *Electrical Transport properties of single-layer WS2*. ACS Nano. 8. (2014). 8174- 8181.
- [59] A. Verkdemir, H. R. Gutiérrez, A. R. B. Méndez, N. P. López, A. L. Elías, C. I. Chia, B. Wang, V. H. Crespi, F. L. Urías, J. C. Charlier, H. Terrones, M. Terrones. *Identification of individual and few layers of WS2 using Raman Spectroscopy*. Scientific reports. 3. (2013). 1- 8.
- [60] Md. K. S. B. Rafiq, N. Amin, H. F. Alharbi, M. Luqman, A. Ayob, Y. S. Alharthi, N. H. Alharthi, B. Bais, Md. Akhtaruzzaman. *WS2: A new window layer material for solar cell application*. Scientific reports. 10. (2020). 1 – 10.
- [61] J. Gusakova, X. Wang, L. L. Shiau, A. Krivosheeva, V. Shapashnikov, V. Borisenko. V. Gusakov, B. K. Tay. *Electronic properties of bulk and monolayer TMDCs: theoretical study within DFT framework (GVJ -2e Method)*. Physica status solidi a. (2017). 1 – 7.
- [62] L. Fan, I. I. Suni. *Electrodeposition and Capacitance measurements of WS2 thin films*. Journal of the electrochemical society. 164. (2017). D681 – D686.
- [63] J. W. Chung, Z. R. Dai, F. S. Ohuchi. *WS2 thin films by metal organic chemical vapor depositon*. Journal of crystal growth. 186. (1998). 137 – 150.
- [64] M. Genut, L. Margulis, G. Hodes, R. Tenne. *Preparation and microstructure WS2 thin films*. Thin solid films. 217. (1992). 91 – 97.
- [65] K. Sobayel, M. Akhtaruzzaman, K. S. Rahman, M. T. Ferdaous, Z. A. A. Mutairi, H. F. Alharbi, N. H. Alharthi, M. R. Karim, S. Hasmady. N. Amin. *A comprehensive defect study of*

tungsten disulfide (WS₂) as electron transport layer in perovskite solar cells by numerical simulation. Results in physics. 12. (2019). 1097 – 1103.

[66] A. Kumar, S. Singh. *Numerical modeling of lead-free perovskite solar cell using inorganic charge transport materials*. Materials today: proceeding. 26. (2020). 2574 - 2581.

[67] R. Huang, M. Yu, Q. Yang, L. Zhang, Y. Wu, Q. Cheng. *Numerical simulation for optimization of an ultra-thin n-type WS₂/p-type c-Si heterojunction solar cells*. Computational materials science. 178. (2020). 1-10.

[68] K. Sobayel, M. Shahinuzzaman, N. Amin, M. R. Karim, M. A. Dar, R. Gul, M. A. Alghoul, K. Sopian, A. K. M. Hasan, Md. Akhtaruzzaman. *Efficiency enhancement of CIGS solar cell by WS₂ as window layer through numerical modelling tool*. Solar Energy. 207. (2020). 479-485.

[69] A. M. Islam, S. Islam, K. Sobayel, E. I. Emon, F. A. Jhuma, M. Shahiduzzaman, Md. Akhtaruzzaman, N. Amin, M. J. Rashid. *Performance analysis of tungsten disulfide (WS₂) as an alternative buffer layer for CdTe solar cell through numerical modelling*. Optical Materials. 120. (2021). 1 – 9.

[70] S. M. Sze, Kwok, K. Ng. (2007). *Physics of semiconductor devices*. (3rd ed). John Wiley & Sons, Inc.

[71] J. P. Mckelvy. (1996). *Física del estado sólido y de semiconductores*. Limusa.

[72] S. K. Wallace, K. T. Butler, Y. Hinuma, A. Walsh. *Finding a junction partner for candidate solar cell absorbers enargite and bournonite from electronic band and lattice matching*. Journal of applied physics. 125. (2019). 1 – 8.

[73] H. Shiel, O. S. Hutter, L. J. Phillips, J. E. N. Swallow, L. A. H. Jones, T. J. Featherstone, M. J. Smiles, P. K. Thakur, T. L. Lee, V. R. Dhanak, J. D. Major, T. D. Veal. *Natural band alignments and band offsets of Sb₂Se₃ solar cells*. ACS applied energy materials. 3. (2020). 11617 – 11626.

[74] M. Gloeckler, J. R. Sites. *Efficiency limitations for wide-band-gap chalcopyrite solar cells*. Thin solid films. (2005). 241 – 245.

[75] T. Song, A. Kanevce, J. R. Sites. *Emitter/absorber interface of CdTe solar cells*. Journal applied physics. 119. (2016). 1 - 8.

[76] R. A. Jabar, M. Hamad, Y. M. Mohanna. *Newton-Raphson solution of Poissons equation in a pn diode*. International journal of electrical engineering education. 44. (2007). 23 – 33.

[77] S. Ahmmed, A. Aktar, M. F. Rahman, J. Hossain, A. B. M. Ismail. *A numerical simulation of high efficiency CdS/CdTe based solar cell using NiO HTL and ZnO TCO*. Optik – International journal for light and electron optics. 223. (2020). 1 – 10.

[78] M. Burgelman, P. Nollet. S. Degraeve. *Modelling polycrystalline semiconductor solar cells*. Thin solid films. (2000). 527 – 532.

[79] H. T. Ganem, A. N. Saleh. *Enhancement of the efficiency of the CZTS/CdS/ZnO/ITO solar cell by back reflection and buffer layers using SCAPS-1D*. Iraqi journal of science. 62. (2021). 1144 – 1157.

[80] C. Mebarkia, D. Dib, H. Zerfaoui, R. Belghit. *Energy efficiency of a photovoltaic cell based thin films CZTS by SCAPS*. Journal of fundamental and applied sciences. 8. (2016). 363 – 371.

- [81] S. Adachi. (1999). *Optical constants of crystalline and amorphous semiconductors numerical data and graphical information*. (1st ed). Japan: Springer.
- [82] O. Madelung. (2004). *Semiconductors: Data Handbook*. (3er ed). Germany: Springer.
- [83] H. Huang, Y. Sheng, Y. Zhou, Q. Zhang, L. Hou, T. Chen, R. J. Chang, J. H. Warner. “2D-Layer dependent behavior in lateral Au/WS₂/Graphene photodiode devices with optical modulation of schottky barriers”. *ACS Applied nano materials*. 1. (2018). 6874 – 6881.
- [84] H. Kim, H. J. Choi. *Thickness dependence of work function, ionization energy, and electron affinity of Mo and W dichalcogenides from DFT and GW calculations*. *Physical review B*. 103. (2021). 1 - 9.
- [85] S. Roy, P. Bermel. *Electronic and optical properties of ultra-thin 2D tungsten disulfide for photovoltaic applications*. *Solar energy materials and solar cells*. 174. (2018). 370 – 379.
- [86] M. Gloeckler, A.L. Fahrenbruch, J. R. Sites. *Numerical modeling of CIGS and CdTe solar cells: setting the baseline*. 3er World conferencia on photovoltaic energy conversion. (2003). 1 – 4.
- [87] J. Tao, X. Hu, Y. Guo, J. Hong, K. Li, J. Jiang, S. Chen, C. Jing, F. Yue, P. Yang, C. Zhang, Z. Wu, J. Tang, J. Chu. *Solution-processed SnO₂ interfacial layer for highly efficient Sb₂Se₃ thin film solar cells*. *Nano energy*. 60. (2019). 802 – 809.
- [88] A. Wat, J. Luke, A. D. Evans, Z. Li, J. S. Kim, J. R. Durrant, H. K. H Lee, W.C. Tsoi. *Fluorine doped tin oxide as an alternative of indium tin oxide for bottom electrode of semi-transparent organic photovoltaic devices*. *AIP Advances*. 9. (2019). 1- 6