Fabricación de celdas solares basadas en Sb_2S_3: Un análisis teórico a través de SCAPS-1D y validación experimental

M. Elias-García[a,b,*], R. Mis-Fernández[b], M. Loeza-Poot[b], E. Camacho-Espinosa[b], I. Riech[a], E. Flores[b].

[a]*Universidad Autónoma de Yucatán, Facultad de Ingeniería - Industrias No Contaminantes S/N, Sin Nombre de Col 27, 97302 Mérida, Yuc.*

[b]*Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional – Unidad Mérida Carretera Antigua a Progreso Km. 6, A.P. 73 Cordemex 97310 Mérida, Yucatán, México*.

Fecha de recepción: 18 de octubre de 2024 - Fecha de aceptación: 12 de mayo de 2025

Resumen

Los calcogenuros de antimonio, particularmente el sulfuro de antimonio (Sb_2S_3), son materiales prometedores gracias a sus excelentes propiedades optoelectrónicas, así como su baja toxicidad, bajo costo y disponibilidad. En este trabajo se ha modelado con el software SCAPS-1D una celda solar de Mo/Sb_2S_3/CdS/ZnO/ITO/Ag y posteriormente, se ha fabricado la celda solar con la misma estructura. A través de la optimización del espesor de las capas absorbente y ventana se consigue mediante SCAPS-1D una eficiencia del 19.9% con valores de resistencias en serie y shunt de 9.9 y 3×10^3 Ω, respectivamente. De igual forma, se observó que un metal con una función de trabajo de ~4eV funciona mejor como contacto frontal en la celda estudiada. Sin embargo, las simulaciones no mostraron mejores resultados en las propiedades eléctricas de la celda al utilizar Ag como contacto frontal. La optimización al modelo teórico permitió obtener un rendimiento fotovoltaico de 6.5 % de eficiencia. Todo este trabajo se complementó con la fabricación experimental de una celda solar basada en Sb_2S_3 en la que se consiguió un 0.1 % de eficiencia. Este resultado es prometedor para profundizar en la optimización experimental de las celdas solares basadas en Sb_2S_3.

Palabras claves: Simulación, Celda solar, Sb_2S_3, SCAPS-1D, Curvas JV.

Fabrication of Sb_2S_3 based solar cells: A theoretical analysis through SCAPS-1D and experimental validation

Abstract

Antimony chalcogenides, particularly antimony sulfide (Sb_2S_3), are promising materials due to their excellent optoelectronic properties, as well as their low toxicity, low cost and availability. In this work, a Mo/Sb_2S_3/CdS/ZnO/ITO/Ag solar cell has been modeled with SCAPS-1D software and subsequently, the solar cell with the same structure has been fabricated. By optimizing the thickness of the absorber and window layers, SCAPS-1D achieves a high efficiency of 19.9% with values for series and shunt resistances of 9.9 and 3×10^3 Ω, respectively. It was also observed that a metal with a work function of ~4eV works best as the front contact in the cell studied. However,

**mario.elias.g01@gmail.com*

Nota: Este artículo de investigación es parte de Ingeniería–Revista Académica de la Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Yucatán, Vol. 29, No. 3, 2025, ISSN: 2448-8364

simulations did not show better results in the electrical properties of the solar cell when using Ag as the front contact. The optimization to the theoretical model allowed obtaining a photovoltaic performance of 6.5 % efficiency. This work was complemented with the experimental fabrication of a solar cell based on Sb_2S_3 in which 0.1 % efficiency was achieved. This result is promising for further experimental optimization of Sb_2S_3-based solar cells.
Keywords: Simulation, Solar cell, Sb_2S_3, SCAPS-1D, JV curves.

Introducción

Con el crecimiento de la población y la existencia de los problemas medioambientales, la demanda de fuentes de energía limpia ha incrementado. Esto ha permitido que la tecnología fotovoltaica gane especial atención (Sharma et al., 2024). Dado el desarrollo que se ha tenido en esta área, la tecnología fotovoltaica puede dividirse en tres generaciones. La primera generación se basa en celdas de silicio cristalino, la segunda generación son las celdas de película delgada y la tercera generación es aquella basada en celdas de perovskita y celdas orgánicas principalmente (Soonmin et al., 2023).

De las celdas antes mencionadas, las pertenecientes a la segunda generación han destacado debido a la menor cantidad de material que se usa durante su fabricación, así mismo las altas eficiencias de fotoconversión obtenidas han permitido posicionar estos tipos de tecnología en el mercado. Sin embargo, estas celdas pueden estar compuestas por elementos como el cadmio y teluro, que son altamente tóxicos, así como por indio y galio elementos los cuales son escasos en la corteza terrestre, lo que eleva sus costos de obtención (Shah et al., 2021).

Con el objetivo de mitigar esta situación el sulfuro de antimonio (Sb_2S_3) surge como una alternativa prometedora. El Sb_2S_3 exhibe excelentes propiedades optoelectrónicas tales como, energía de bandgap entre 1.6 y 1.8 eV (Abraham et al., 2023), alto coeficiente de absorción (1.8×10^5 cm^{-1}) (Farhana et al., 2023), conductividad tipo *p* intrínseca (Islam & Thakur, 2023), alta estabilidad y sobre todo, está constituido por elementos disponibles en la corteza terrestre (Lan et al., 2018).

Las celdas solares basadas en Sb_2S_3 se han fabricado por diversas técnicas como evaporación térmica, depósito por baño químico, depósito de capas atómicas, spin coating, sputtering, entre otras, en las cuales han reportado diferentes valores de eficiencias (0.65-7.5%) (Choi et al., 2014; Liu et al., 2020; Luo et al., 2020; Wang et al., 2019). Sin embargo, estos resultados no son comparables con una celda de CdS/CdTe las cuales han alcanzado eficiencias superiores al 20% (Scarpulla et al., 2023). Aumentar la eficiencia de estas celdas solares implica resolver diversos retos como la interdifusión entre capas, recombinación radiativa, densidad de defectos, valores de resistencia en serie y paralelo, entre otros (Ahamed et al., 2023).

Con la finalidad de mejorar la eficiencia de las celdas solares basadas en Sb_2S_3 es necesario optimizar dichos parámetros. Diversos artículos teóricos han reportado eficiencias de fotoconversión para celdas solares basadas en Sb_2S_3 (Islam & Thakur, 2020; Mamta et al., 2021), donde su principal enfoque es la optimización de los espesores, así como de los defectos en cada una de las capas que componen las celdas.

En el presente trabajo, se modeló por SCAPS-1D una estructura de celda solar de Mo/Sb_2S_3/CdS/ZnO/ITO/Ag, donde el Sb_2S_3

es la capa tipo *p* y el CdS es la capa tipo *n*. El trabajo teórico se dividió en dos partes: en la primera parte se estudió el efecto de la variación de los espesores del Sb_2S_3 y CdS en los parámetros eléctricos de la celda, dando espesores óptimos de 2.00 µm y 0.13 µm, respectivamente. La segunda parte del trabajo teórico se centró en el efecto de los defectos volumétricos e interfaciales sobre la celda, prestando principal atención a la densidad total de defectos en la capa absorbente, viéndose una variación significativa de los parámetros eléctricos utilizando una densidad total de defectos de 1×10^{16} cm^{-3}. Además, este trabajo se realizó con el objetivo de estudiar los parámetros óptimos de la juntura, lo que ayudaría a comprender mejor las características que requiere la celda solar con el fin de mejorar la eficiencia de fotoconversión.

Metodología

Estructura del dispositivo fotovoltaico

En este trabajo se analizó una celda solar en configuración sustrato, es decir que la luz solar incide por el lado opuesto al sustrato (Martin et al., 2023). La estructura del dispositivo que se propuso para este estudio es Mo/Sb_2S_3/CdS/ZnO/ITO/Ag, conformada por seis capas de distintos materiales en forma de película delgada apiladas una sobre otra, tal como se muestra en la **Fig. 1**. El Mo fue seleccionado como contacto posterior, el semiconductor tipo *p* es el Sb_2S_3, que funciona como la capa absorbente, el CdS es un semiconductor tipo n y funge como la capa ventana, el ZnO es la capa barrera y el ITO (un óxido conductor transparente) y Ag como el contacto frontal de la celda. Inicialmente se realizó una estructura carente de ZnO, sin embargo, a través del desarrollo de la metodología experimental se observó que añadir esta capa buffer mejora la estabilidad de la celda; por lo que se añadió esta capa posteriormente en el análisis teórico.

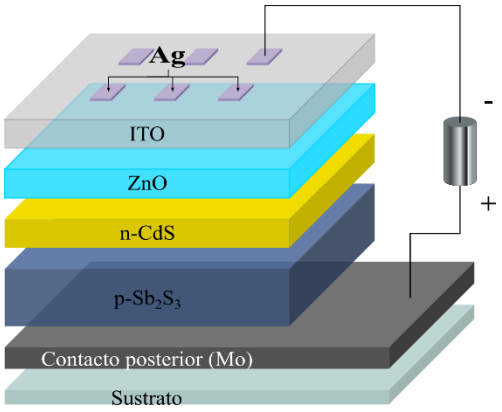

Fig. 1 Diagrama esquemático de la estructura de la celda solar analizada.

Simulación por SCAPS-1D

En este trabajo se ha empleado el Software de Capacitancia de Celdas Solares en una Dimensión SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Software, por sus siglas en inglés), para el modelado y optimización de los dispositivos fotovoltaicos; este software fue desarrollado en la Universidad de Gent, Bélgica (Burgelman et al., 2000) y emplea las ecuaciones elementales para analizar el comportamiento teórico de una celda solar. La ecuación de Poisson (1) que describe la relación entre la densidad de carga, la densidad de átomos y el potencial electrostático (Basore, 1990);

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{q}{\varepsilon}[p(x) - n(x) + N_D - N_A + \rho_p - \rho_n] \quad (1)$$

y las ecuaciones de continuidad [(2) y (3)] que describen el comportamiento de los portadores de carga en términos de generación y recombinación (Basore, 1990).

$$-\frac{1}{q}\frac{\partial J_n}{\partial x} - R_n(x) + G(x) = \frac{\partial n}{\partial t} \quad (2)$$

$$-\frac{1}{q}\frac{\partial J_p}{\partial x} - R_p(x) + G(x) = \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3)$$

Para las ecuaciones anteriores se tiene que q es la carga eléctrica, ε es la constante dieléctrica, N_A y N_D son las densidades de aceptores y donores, respectivamente, ψ el potencial electrostático, $n, p, \rho_n, \rho_p, J_n$ y J_p son las concentraciones, distribuciones electrónicas y densidad de corriente para electrones y huecos respectivamente. Adicionalmente, R y G son la red de recombinación y la razón de generación óptica que son funciones de la posición x.

Para poder modelar el rendimiento fotovoltaico de la estructura propuesta en SCAPS-1D, el software requiere de parámetros característicos para cada una de las capas que conforman la celda, como el bandgap, la afinidad electrónica, etc. En la **Tabla 1** se presentan los parámetros de los materiales utilizados: CdS (Barthwal et al., 2023; Basak & Singh, 2021; Li et al., 2020), Sb_2S_3 (Ahamed et al., 2023; Barthwal et al., 2023; Islam & Thakur, 2020; Mamta et al., 2021), ZnO (Mamta et al., 2021; Putra et al., 2021), ITO (Islam & Thakur, 2023; Kosarian et al., 2018; Kumari et al., 2023). La fuente de iluminación utilizada para la simulación numérica fue el espectro AM 1.5 equivalente a 1000 W/m^2.

SCAPS-1D permite modificar los espesores de las capas que conforman la celda. Para el estudio se realizaron variaciones en los espesores de las capas de la juntura, con la finalidad de conseguir una alta eficiencia.

Adicional a los parámetros iniciales de la simulación, SCAPS-1D permite modelar la celda solar con parámetros asociados a los principales defectos existentes en cada una de las capas que conforman el dispositivo. En la **Tabla 2** se presentan los defectos de volumen (Islam & Thakur, 2023) y de interfase (Barthwal et al., 2023) utilizados en la simulación para poder obtener los rendimientos de las celdas de una forma más próxima a los resultados experimentales.

Tabla 1. Parámetros de los materiales utilizados para el estudio de simulación.

Parámetro	CdS	Sb_2S_3	ZnO	ITO
Espesor (μm)	Variable	Variable	0.1	0.2
Bandgap (eV)	2.4	1.62	3.3	4.09
Afinidad electrónica (eV)	4.2	3.7	4.4	4.6
Permitividad dieléctrica (relativa)	10	7.08	9	8.9
CB Densidad efectiva de estados ($1/cm^3$)	2.2×10^{18}	2.0×10^{18}	2.2×10^{18}	5.2×10^{18}
VB Densidad efectiva de estados ($1/cm^3$)	1.8×10^{19}	1.0×10^{19}	1.8×10^{19}	1.0×10^{19}
Velocidad térmica de electrones (cm/s)	1×10^7	1×10^7	1×10^7	1×10^7
Velocidad térmica de huecos (cm/s)	1×10^7	1×10^7	1×10^7	1×10^7
Movilidad del electrón (cm^2/Vs)	100	9.8	25	10
Movilidad de hueco (cm^2/Vs)	25	10	100	10
Densidad de impurezas donoras ND ($1/cm^3$)	1.1×10^{18}	---	1.0×10^{18}	1×10^{21}
Densidad de impurezas aceptoras NA ($1/cm^3$)	---	5.71×10^{15}	---	---
Propiedades del contacto	**Mo**		**Ag**	
SVR electrón (cm/s)	10^5		10^7	
SRV hueco (cm/s)	10^7		10^5	
Función de trabajo (eV)	4.95		4.26	

Tabla 2. Parámetros de los defectos utilizados en la simulación.

Parámetro de defecto	Defectos de Volumen		Defectos de Interfase
	Sb_2S_3	CdS	Sb_2S_3/CdS
Tipo de defecto	Aceptor único (0/-)	Aceptor único (0/-)	Neutral
Área de captura de sección transversal de electrón/hueco (cm^2) σ_e/σ_h	$10^{-15}/10^{-17}$	$10^{-15}/10^{-17}$	$10^{-15}/10^{-15}$
Nivel de energía de defectos (eV)	0.78 (Sobre VBM)	0.6 (Sobre VBM)	0.85 (Sobre VBM)
Densidad total (cm^{-3}) N_t	10^{10} -10^{16}	10^{15}	10^{16}

Fabricación y caracterización de las celdas solares

Para completar este estudio se fabricó un dispositivo fotovoltaico con la estructura propuesta en la **Fig**. **1**, haciendo uso de las técnicas de depósito por sputtering en la mayoría de los casos, salvo el CdS el cual fue depositado por baño químico (CBD, por sus siglas en inglés). Las condiciones de depósito de cada uno de los materiales se presentan en la **Tabla 3.** Los depósitos se realizaron sobre sustratos de vidrio Corning de 2.54 x 2.54 cm. Los sustratos se limpiaron mediante 3 lavados sucesivos en baño ultrasónico en soluciones de agua y jabón, agua destilada y una mezcla de acetona/metanol (50/50 %) por 10 minutos cada uno. Luego se depositaron películas de Mo metálico por la técnica de RF-sputtering (blanco de Mo, Kurt J. Lesker, 99.95 % de pureza) como contacto posterior. Seguidamente, se sintetizó el Sb_2S_3 en dos pasos: primero, se obtuvo una película metálica de Sb depositada por sputtering (Kurt J. Lesker, 5N) sobre los sustratos de Vidrio/Mo; y posteriormente, se llevó a cabo un proceso denominado sulfurizado, el cual consiste en colocar la capa metálica de Sb y azufre en polvo (Sigma Aldrich, 99.95 %) dentro de una caja de grafito la cual se introdujo en un horno conformado por un tubo de cuarzo y lámparas de halógeno que calientan el sistema. Las mejores muestras de Sb_2S_3 se consiguieron calentando el sistema a 360 °C por 70 min en una atmósfera de Ar a 650 Torr. Con estas muestras se fabricaron las celdas solares depositando CdS mediante baño químico, utilizando tiourea (Sigma Aldrich, ≥99%) y cloruro de cadmio (Sigma Alrich, 79.5-81.0%) como precursores de iones de S^{2-} y Cd^{2+}, respectivamente, nitrato de amonio (Sigma Aldrich, ≥99%) e hidróxido de potasio (Sigma Aldrich, 85%) y) como agente complejante y regulador de pH, respectivamente. El siguiente paso fue depositar por RF-sputtering una delgada capa de ZnO depositada por RF-sputtering (blanco de Zn, Kurt J. Lesker, 99.99% de pureza) acompañada de una fina capa de ITO por RF-sputtering (blanco de ITO, Kurt J. Lesker, 99.99% de pureza). A continuación, las celdas solares fueron caracterizadas eléctricamente en un simulador solar con un programa de adquisición de datos diseñado en LabView e iluminadas por medio de una matriz de lámparas de halógeno calibradas para suministrar una irradiación de 100mW/cm^2.

Tabla 3. Parámetros de depósito para las capas que constituyen la celda.

Parámetro	**Material**					
	Mo	**Sb**	**Sb_2S_3**	**CdS**	**ZnO**	**ITO**
Espesor (nm)	~ 600	~ 700	~5000	~ 140	~100	~150
Técnica de depósito	RF-Sputtering		Sulfurización	CBD	RF-Sputtering	
Presión de trabajo (mTorr)	25/10	25/10	650x10^3	Ambiente	20	20
Potencia (W)	260	30	No aplica	No aplica	130	90
Tiempo (minutos)	10/50	10/30	70	30	50	30
Temperatura (°C)	Ambiente	Ambiente	360	80	200	200

Resultados y discusión

Efectos del espesor de la capa absorbente en el rendimiento de la celda solar

Los espesores de las capas que conforman la celda solar juegan un papel clave en el desempeño del dispositivo. Para determinar el valor óptimo de espesor en la capa absorbente del Sb_2S_3 se varió entre 0.5 y 5.0 µm, manteniendo el espesor de la capa ventana constante (0.05 µm inicialmente). El análisis numérico se centró en los cuatro parámetros fundamentales en el funcionamiento de una celda solar, los cuales son: el voltaje de circuito abierto (V_{OC}), la corriente de corto circuito (J_{SC}), el factor de llenado (FF) y la eficiencia (η) (Nykyruy et al., 2019), cuyos resultados se muestran en la **Fig**. **2**. Es posible observar que a medida que el espesor aumenta, los parámetros eléctricos mejoran.

Esto se debe a que para que la absorción de la energía solar pueda crear pares electrón-hueco y el transporte de portadores se requiere una capa lo suficientemente gruesa capaz de atrapar a los fotones (Xiao et al., 2020). Algo que señalar es que no se presenta una visible saturación, por lo que es importante definir un espesor "óptimo" el cual sea viable de forma tanto teórica como experimental. De la **Fig**. **2** se observa un comportamiento asintótico para espesores grandes, por lo tanto, se tomó como espesor óptimo el punto de inflexión de la curva localizado 2.0 µm de espesor. De forma que, pensando en la fabricación experimental, es un valor factible para utilizar.

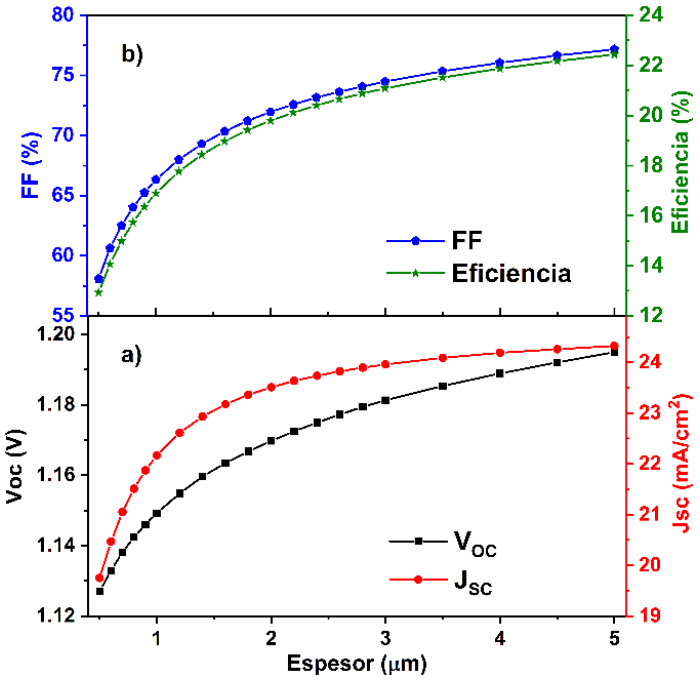

Fig. 2. Efectos del espesor de la capa de Sb_2S_3 en los parámetros eléctricos de la celda solar: a) V_{OC} y J_{SC}, b) FF y η.

Efectos del espesor de la capa ventana en el rendimiento de la celda solar

Análogo al comportamiento de la capa absorbente, un mayor espesor de la capa ventana aumenta los valores de los parámetros eléctricos, sin embargo, entre las funciones que debe cumplir la capa ventana además de formar parte de la juntura, es que debe de dejar pasar la mayor cantidad de luz hacia el absorbedor. Por ello, se modeló una variación de 0.05 – 0.20 µm en el espesor de la capa ventana. Esta diferencia en los espesores ocasiona poca variación en los parámetros fotovoltaicos. En la **Fig. 3**a se observa un ligero cambio en el V_{OC} y la J_{SC}. Para el FF (**Fig. 3**b) se presenta un pequeño crecimiento, aumentando en un 0.4 %; siendo un valor que no representa un cambio significativo en el rendimiento de la celda. Finalmente, para la eficiencia se observa un cambio de un 0.1 %. Esto indica que variar el espesor de la capa ventana no representa un problema al momento de generar la juntura, de forma que se decide utilizar 0.13 µm de espesor, pues este valor se ha utilizado de forma experimental en el laboratorio dando excelentes resultados (Rios-Flores et al., 2012).

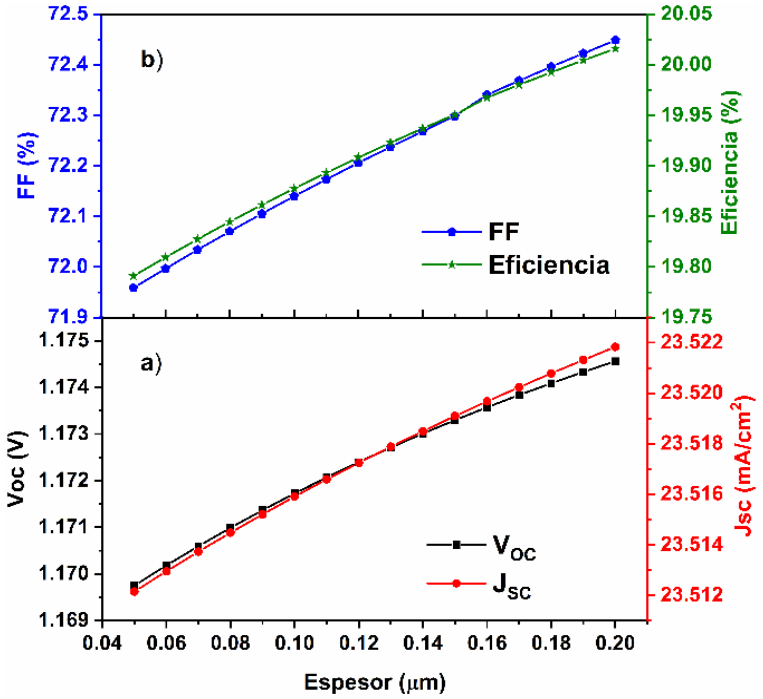

Fig. 3. Efectos del espesor del CdS sobre los parámetros eléctricos de la celda solar: a) V_{OC} y J_{SC}, b) FF y η.

Tras haber encontrado la eficiencia más alta en este trabajo, a través de la modificación de los espesores; se simuló la primera celda fotovoltaica en el estado ideal, es decir, sin presencia de defectos ni resistencias (**Fig. 4**). Esta celda presentó una eficiencia de fotoconversión del 19.92 %, con un V_{OC} de 1.17 V y una J_{SC} de 23.51 mA/cm^2. Indicando que entre el Sb_2S_3 y el CdS se forma una juntura *p-n* y que los parámetros obtenidos son valores competitivos para llevar a cabo la fabricación de la celda.

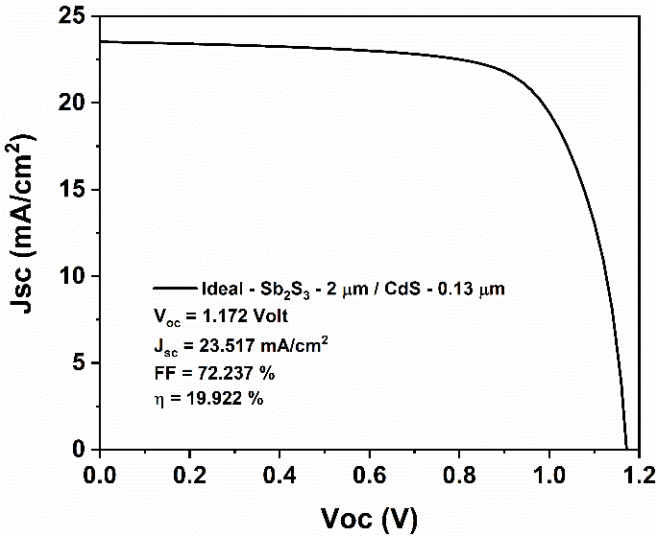

Fig. ***4.*** Curva JV para la celda propuesta con espesores idóneos.

Efectos de la densidad total de defectos en el rendimiento de la celda solar.

Habiendo identificado los espesores para las capas absorbente y ventana de la celda solar ajustados para obtener el mejor rendimiento, se llevó a cabo la adición de defectos para las capas absorbente y ventana, los defectos de interfase Sb_2S_3/CdS y los valores estándar de resistencias en serie y shunt. Para analizar cómo afectan estos parámetros, se realizó una variación en la densidad total de defectos (N_t) del Sb_2S_3, de 1×10^{10} – 1×10^{16} cm^{-3}. Este parámetro se encarga de indicar la cantidad total de defectos que pueden actuar como centros de recombinación en un material semiconductor (Barthwal et al., 2023).

En la **Fig**. **5** se observa como los parámetros eléctricos de la celda solar varían en función de N_t, los cuales presentan un comportamiento estable hasta una $N_t = 1 \times 10^{14}$ cm^3 (Li et al., 2020). Al aumentar en un orden de magnitud la densidad de defectos se percibe una ligera disminución en los parámetros eléctricos de la celda. Estos resultados son similares a los obtenidos por Basak y Singh (Basak & Singh, 2021), e indican que es posible aumentar la cantidad volumétrica de defectos hasta este punto sin afectar el rendimiento de la celda.

A partir de una densidad de defectos de 1×10^{16} cm^3, es cuando se observa un cambio considerable en la curva JV y de forma más perceptible, una disminución drástica en los parámetros eléctricos de la celda, lo que implica que los portadores de carga se recombinan antes de alcanzar los contactos (Ahamed et al., 2023). Por esta razón se selecciona una $N_t = 1 \times 10^{16}$ cm^3 para aproximarse a un comportamiento más cercano a la realidad.

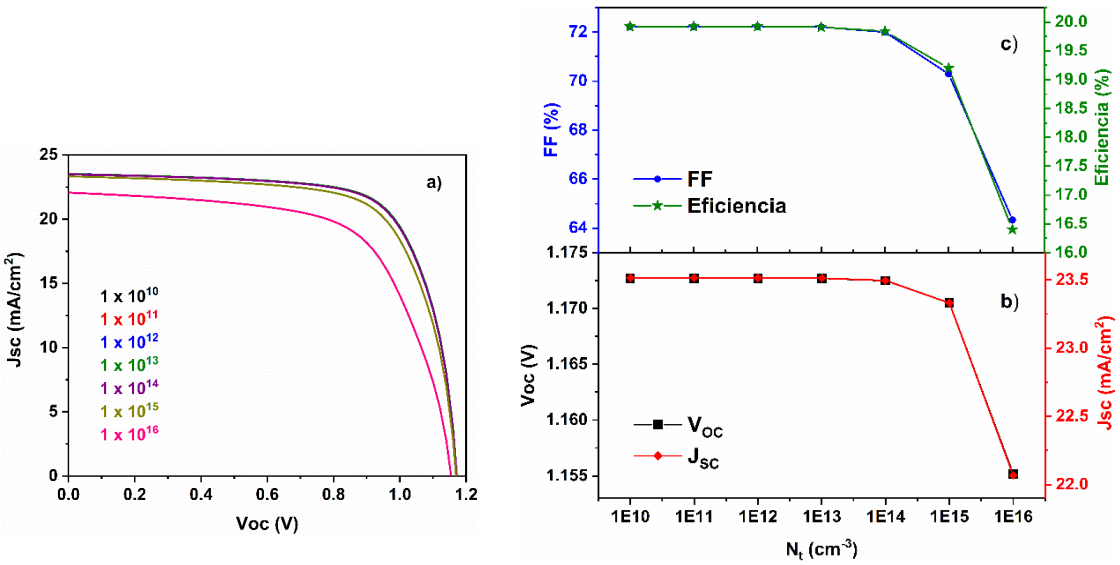

Fig. 5. Influencia de la densidad total de defectos en los parámetros eléctricos de la celda solar: a) Curvas JV, b) V_{OC}, J_{SC} y c) FF,

Tras este análisis se realizó una vez más la simulación obteniendo una nueva curva JV, la cual se presenta en la **Fig. 6**. De lo anterior es posible visualizar cómo los parámetros han disminuido considerablemente en comparación con la celda en estado ideal (ver **Fig. 4**. Curva JV para la celda propuesta con espesores idóneos.), no obstante, se obtuvo una η de 6.5 % con un V_{OC} de 0.65 V y una J_{SC} de 18.5 mA/cm^2. Pese a que este resultado es considerablemente bajo, es un valor prometedor para conseguir en una celda de forma experimental.

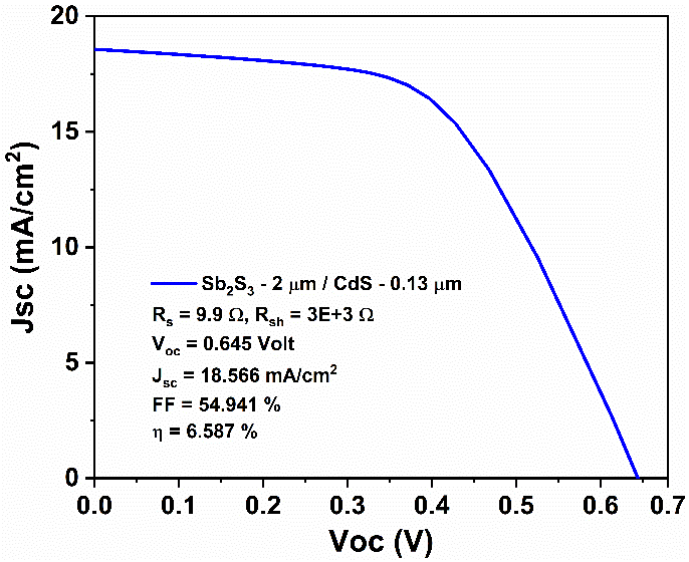

Fig. 6. Curva JV para la celda propuesta con espesores optimizados, defectos en las capas y de interfase.

Efecto del contacto frontal y capa buffer en el rendimiento de la celda solar

Hasta este punto en la simulación de la celda ha utilizado únicamente ITO como contacto frontal (se utilizó ITO como capa y posteriormente *Flat Bands -contacto óhmico ideal sin barreras-* para la parte del contacto frontal). Sin embargo, es sabido que adicionar un metal como contacto reduce la resistencia en serie en la celda, de forma que mejora la conductividad. Por ello, se modificó el contacto frontal, colocando los parámetros correspondientes a la función de trabajo de la Ag. En la **Fig**. **7**a se presenta la curva JV con contactos de plata. Se puede observar que este cambio no genera modificación alguna en los resultados obtenidos. Esto puede deberse a múltiples factores relacionados con el modelo matemático que trabaja SCAPS-1D; por ejemplo, la cercanía en los valores de la función de trabajo de la Ag con la afinidad electrónica del ITO, que resulta similar a utilizar *Flat Bands.*

Finalmente, se realizó la adición de la capa buffer, utilizando una fina capa de ZnO entre el CdS y el ITO. Tras este análisis se realizó una vez más la simulación obteniendo una nueva curva JV, la cual se presenta en la **Fig. 7**b. De lo anterior se puede concluir que añadir esta capa en SCAPS-1D ocasiona una ligera disminución en la J_{SC} y η de la celda a cambio de una mejora en el FF, esto producto de la disminución en la recombinación de portadores en la interfase del CdS/ITO.

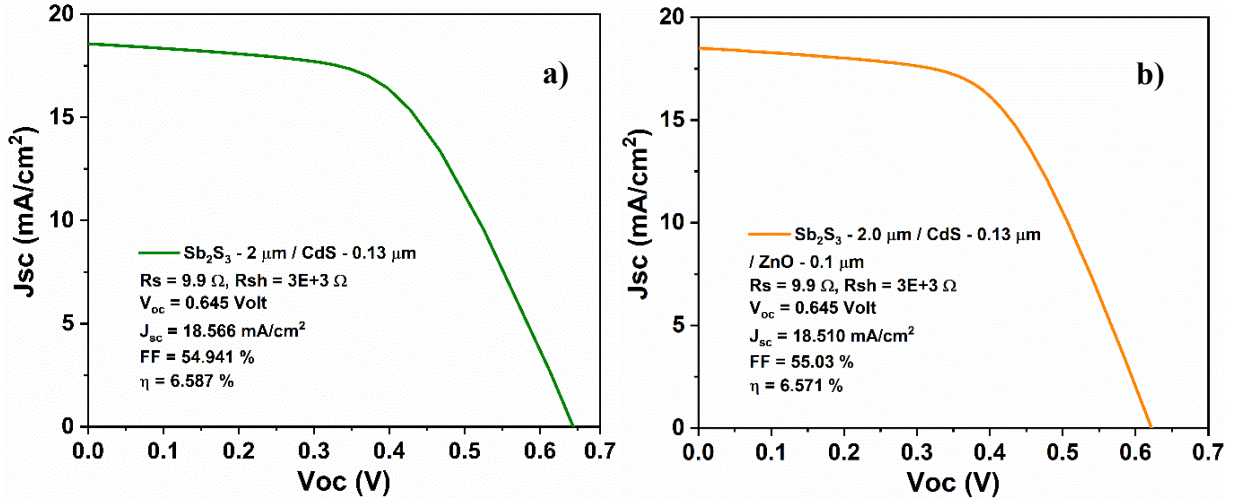

Fig. 7. Curva JV para la celda modelada de a) Mo/Sb_2S_3/CdS/ITO/Ag y b) Mo/Sb_2S_3/CdS/ZnO/ITO/Ag.

Medición del efecto fotovoltaico

Los resultados obtenidos en la simulación confirman que la juntura Sb_2S_3/CdS es prometedora para ser aplicada en una celda solar basada en Sb_2S_3, por lo que se realizó la fabricación de la estructura de la celda solar de forma experimental, usando dos configuraciones: Vidrio/Mo/Sb_2S_3/CdS/ITO y Vidrio/Mo/Sb_2S_3/CdS/**ZnO**/ITO/**Ag**. En la **Fig**. **8** se presentan las curvas JV de las celdas solares obtenidas.

La celda de Vidrio/Mo/Sb_2S_3/CdS/ITO/Ag presentó un V_{OC} de 0.14 V con una J_{SC} de 0.75 mA/cm^2 (**Tabla 4**), estos bajos valores probablemente estén asociados a la alta

resistencia en serie aunado a su baja resistencia shunt, ambas contribuyendo a la caída del voltaje y a pérdidas de corriente por las posibles vías de recombinación (Abd Rashid et al., 2024), la combinación de estos factores provocan que la eficiencia de la celda sea de apenas un 0.03 %, un valor muy por debajo de lo reportado en la literatura. Sin embargo, tal y como se planteó en la simulación, al añadir una fina capa de ZnO el rendimiento fotovoltaico de la celda mejora, entregando un V_{OC} de 0.35 V y una J_{SC} de 0.98 mA/cm^2 (**Tabla 4**). Esto se debe a que el ZnO tiene la capacidad para facilitar el transporte de electrones reduciendo la recombinación de los portadores de carga (Wibowo et al., 2020). Adicionalmente la resistencia shunt presenta un valor cercano al propuesto en la simulación, de forma que se obtiene un aumento considerable en la eficiencia de 0.03% a 0.1 %.

Esta mejora en la resistencia shunt, puede deberse principalmente a una mejora en la juntura *p-n*, ya que añadir una capa de ZnO protege al CdS de la difusión de átomos de indio provenientes del ITO (Nagaraja et al., 2021; Zapata-Torres et al., 2015).

A pesar de obtener un rendimiento considerablemente inferior a lo reportado, estos resultados indican que la juntura funciona, sin embargo, existen diversos aspectos experimentales que deben mejorarse en la fabricación de la celda solar: 1) mejorar la unión *p-n* optimizando los espesores tanto para la capa absorbente como para la capa ventana, 2) evitar la oxidación en el contacto posterior para reducir la resistencia en serie y 3) mejorar la adherencia de la Ag como contacto frontal para aumentar la eficiencia de la celda.

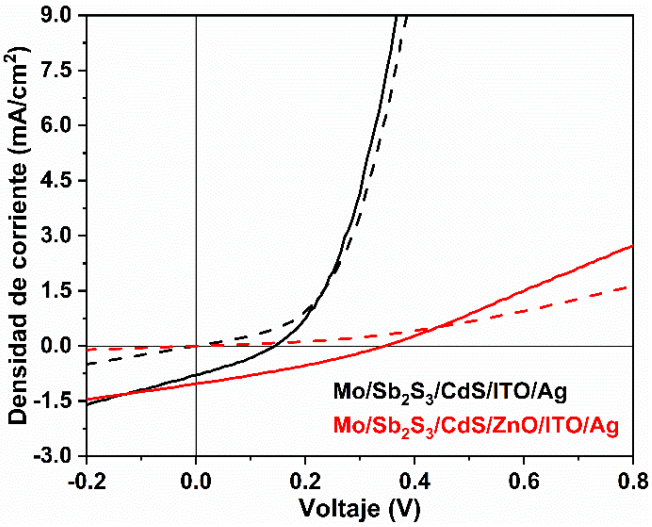

Fig. 8. Curvas JV de las celdas experimentales. Línea solida: iluminación, línea punteada: oscuridad.

Tabla 4. Rendimientos fotovoltaicos experimentales de las celdas basadas en Sb_2S_3.

Celda	Parámetro eléctrico					
	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm^2)	FF (%)	η (%)	R_s (Ω)	R_{sh} (Ω)
Mo/Sb_2S_3/CdS/ITO/Ag	0.146	0.75	31.36	0.034	828.90	1884.28
Mo/Sb_2S_3/CdS/ZnO/ITO/Ag	0.349	0.98	30.41	0.104	1692.98	3773.08

Conclusiones

En este trabajo teórico-experimental se modeló el comportamiento fotovoltaico de una estructura de celda solar Mo/Sb_2S_3/CdS/ZnO/ITO/Ag utilizando el software SCAPS-1D y posteriormente se compararon los resultados de forma experimental. Se observó teóricamente que con un espesor de 2 μm y 0.13 μm para las capas absorbente y ventana, respectivamente, es posible alcanzar una eficiencia de fotoconversión del 19.9% en un estado ideal. La cual disminuye hasta 6.5 % debido a la incorporación de los defectos en la interfase de la unión p-n y de la densidad de defectos en la capa absorbente, siendo significativos para valores de 1×10^{16} cm^{-3}.

De igual forma se observó que la adición de Ag en la simulación teórica no mostró cambios significativos en las curvas JV; sin embargo, experimentalmente tanto la incorporación de la Ag como el ZnO contribuyen a mejorar el rendimiento de la celda. Dando como resultado parámetros eléctricos experimentales con un V_{OC} máximo de 0.35 V, una J_{SC} de 0.95 mA/cm^2 y una eficiencia del 0.1 %.

De esta forma se confirma que el Sb_2S_3 obtenido por el método de dos pasos es funcional como capa absorbente en celdas solares de película delgada. Sin embargo, debido a la diferencia que existe en los resultados teóricos y experimentales, nos indica que aún es necesario optimizar cada uno de los materiales, enfocándose en la morfología de las capas, las condiciones de depósito y crecimiento para mejorar la homogeneidad de las capas, entre otros aspectos eléctricos que permitan alcanzar resultados con valores cercanos a los obtenidos teóricamente, lo cual se desarrollará en trabajos futuros.

Agradecimientos

Los autores agradecen a LANNBio CINVESTAV-Mérida, bajo el apoyo del proyecto FOMIX-Yucatán (Subvención No. 2008-108160) por los análisis realizados en sus instalaciones.

Referencias

Abd Rashid, W. N., Sapeli, M. M. I., Putthisigamany, Y., Rahman, K. S., Ahmad Ludin, N., Ibrahim, M. A., & Chelvanathan, P. (2024). Comparative analysis of substrate and superstrate configurations in Sb2S3 thin-film solar cells by numerical modelling. *Journal of Materials Science*, *59*(32), 15347–15364. https://doi.org/10.1007/s10853-024-10090-z

Abraham, P., Shaji, S., Avellaneda, D. A., Aguilar-Martínez, J. A., & Krishnan, B. (2023). Sb2S3 thin films: From first principles to in situ crystalline thin film growth by ultrasonic spray pyrolysis. *Materials Science in Semiconductor Processing*, *156*, 107269. https://doi.org/10.1016/j.mssp.2022.107269

Ahamed, Sk. T., Basak, A., & Mondal, A. (2023). Device modeling and investigation of Sb-based low-cost heterojunction solar cells using SCAPS-1D. *Results in Optics*, *10*, 100364. https://doi.org/10.1016/j.rio.2023.100364

Barthwal, S., Gupta, R., Kumar, A., Ramesh, K., Pathak, S., & Karak, S. (2023). Band offset engineering in antimony sulfide (Sb2S3) solar cells, using SCAPS simulation: A route toward PCE > 10%. *Optik*, *282*, 170868. https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2023.170868

Basak, A., & Singh, U. P. (2021). Numerical modelling and analysis of earth abundant Sb2S3 and Sb2Se3 based solar cells using SCAPS-1D. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, *230*, 111184. https://doi.org/10.1016/j.solmat.2021.111184

Basore, P. A. (1990). Numerical modeling of textured silicon solar cells using PC-1D. *IEEE Transactions on Electron Devices*, *37*(2), 337–343. https://doi.org/10.1109/16.46362

Burgelman, M., Nollet, P., & Degrave, S. (2000). Modelling polycrystalline semiconductor solar cells. *Thin Solid Films*, *361–362*, 527–532. https://doi.org/10.1016/S0040-6090(99)00825-1

Choi, Y. C., Lee, D. U., Noh, J. H., Kim, E. K., & Seok, S. I. (2014). Highly Improved Sb_2S_3 Sensitized-Inorganic–Organic Heterojunction Solar Cells and Quantification of Traps by Deep-Level Transient Spectroscopy. *Advanced Functional Materials*, *24*(23), 3587–3592. https://doi.org/10.1002/adfm.201304238

Farhana, M. A., Manjceevan, A., & Bandara, J. (2023). Recent advances and new research trends in Sb2S3 thin film based solar cells. *Journal of Science: Advanced Materials and Devices*, *8*(1), 100533. https://doi.org/10.1016/j.jsamd.2023.100533

Hosen, R., Sikder, S., Uddin, S., Haque, M., Mamur, H., & Bhuiyan, M. R. A. (s/f). *Effect of various layers on improving the photovoltaic efficiency of Al/ZnO/CdS/CdTe/Cu2O/Ni solar cells*.

Islam, M. T., & Thakur, A. K. (2020). Two stage modelling of solar photovoltaic cells based on Sb2S3 absorber with three distinct buffer combinations. *Solar Energy*, *202*, 304–315. https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.03.058

Islam, M. T., & Thakur, A. K. (2023). Effect of design modification on efficiency enhancement in Sb2S3 absorber based solar cell. *Current Applied Physics*, *49*, 25–34. https://doi.org/10.1016/j.cap.2023.02.007

Kosarian, A., Shakiba, M., & Farshidi, E. (2018). Role of sputtering power on the microstructural and electro-optical properties of ITO thin films deposited using DC sputtering technique. *IEEJ Transactions on Electrical and Electronic Engineering*, *13*(1), 27–31. https://doi.org/10.1002/tee.22494

Kumari, R., Mamta, Kumar, R., & Singh, V. N. (2023). Simulation Study of an Antimony Selenide Solar Cell with Graphene Oxide as Hole Transport Material. *ACS Applied Electronic Materials*, *5*(7), 3949–3956. https://doi.org/10.1021/acsaelm.3c00631

Lan, C., Luo, J., Lan, H., Fan, B., Peng, H., Zhao, J., Sun, H., Zheng, Z., Liang, G., & Fan, P. (2018). Enhanced Charge Extraction of Li-Doped TiO2 for Efficient Thermal-Evaporated Sb2S3 Thin Film Solar Cells. *Materials*, *11*(3), 355. https://doi.org/10.3390/ma11030355

Li, Z.-Q., Ni, M., & Feng, X.-D. (2020). Simulation of the Sb_2Se_3 solar cell with a hole transport layer. *Materials Research Express*, *7*(1), 016416. https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab5fa7

Liu, L., Zhang, S.-L., Wu, J.-Y., Wang, W.-H., Liu, W., Wu, L., & Zhang, Y. (2020). Current improvement in substrate structured Sb_2S_3 solar cells with $MoSe_2$ interlayer*. *Chinese Physics B*, *29*(5), 058801. https://doi.org/10.1088/1674-1056/ab8220

Luo, J., Xiong, W., Liang, G., Liu, Y., Yang, H., Zheng, Z., Zhang, X., Fan, P., & Chen, S. (2020). Fabrication of Sb2S3 thin films by magnetron sputtering and post-sulfurization/selenization for substrate structured solar cells. *Journal of Alloys and Compounds*, *826*, 154235. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.154235

Mamta, Maurya, K. K., & Singh, V. N. (2021). Sb2Se3 versus Sb2S3 solar cell: A numerical simulation. *Solar Energy*, *228*, 540–549. https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.09.080

Martin, I. T., Crowley, K., & Hepp, A. F. (2023). Thin-film materials for space power applications. En *Photovoltaics for Space* (pp. 215–263). Elsevier. https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823300-9.00015-7

Nagaraja, M., Raghu, P., Mahesh, H. M., & Pattar, J. (2021). Structural, optical and Urbach energy properties of ITO/CdS and ITO/ZnO/CdS bi-layer thin films. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, *32*(7), 8976–8982. https://doi.org/10.1007/s10854-021-05568-4

Nykyruy, L. I., Yavorskyi, R. S., Zapukhlyak, Z. R., Wisz, G., & Potera, P. (2019). Evaluation of CdS/CdTe thin film solar cells: SCAPS thickness simulation and analysis of optical properties. *Optical Materials*, *92*, 319–329. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2019.04.029

Putra, N. M. D., Sugianto, Marwoto, P., Murtafiatin, R., & Permadis, D. (2021). The SCAPS-1D modeling of ZnO/CdS/CdTe thin film: Analysis of thickness and stoichiometric fraction of absorber layer on solar cell performance. *Journal of Physics: Conference Series*, *1918*(2), 022029. https://doi.org/10.1088/1742-6596/1918/2/022029

Rios-Flores, A., Arés, O., Camacho, J. M., Rejon, V., & Peña, J. L. (2012). Procedure to obtain higher than 14% efficient thin film CdS/CdTe solar cells activated with HCF2Cl gas. *Solar Energy*, *86*(2), 780–785. https://doi.org/10.1016/j.solener.2011.12.002

Scarpulla, M. A., McCandless, B., Phillips, A. B., Yan, Y., Heben, M. J., Wolden, C., Xiong, G., Metzger, W. K., Mao, D., Krasikov, D., Sankin, I., Grover, S., Munshi, A., Sampath, W., Sites, J. R., Bothwell, A., Albin, D., Reese, M. O., Romeo, A., … Hayes, S. M. (2023). CdTe-based thin film photovoltaics: Recent advances, current challenges and future prospects. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, *255*, 112289. https://doi.org/10.1016/j.solmat.2023.112289

Shah, U. A., Chen, S., Khalaf, G. M. G., Jin, Z., & Song, H. (2021). Wide Bandgap Sb_2S_3 Solar Cells. *Advanced Functional Materials*, *31*(27), 2100265. https://doi.org/10.1002/adfm.202100265

Sharma, I., Pawar, P. S., Yadav, R. K., Kim, Y. T., Bisht, N., Patil, P. R., & Heo, J. (2024). Vapor-transport-deposited Sb2S3 thin-film solar cells: Tailoring photovoltaic properties through deposition temperature. *Journal of Power Sources Advances*, *26*, 100143. https://doi.org/10.1016/j.powera.2024.100143

Shuai, X., & Shen, W. (2012). A facile chemical conversion synthesis of Sb2S3 nanotubes and the visible light-driven photocatalytic activities. *Nanoscale Research Letters*, *7*(1), 199. https://doi.org/10.1186/1556-276X-7-199

Soonmin, H., Hardani, Nandi, P., Mwankemwa, B. S., Malevu, T. D., & Malik, M. I. (2023). Overview on Different Types of Solar Cells: An Update. *Applied Sciences*, *13*(4), 2051. https://doi.org/10.3390/app13042051

Wang, Q., Chen, Z., Wang, J., Xu, Y., Wei, Y., Wei, Y., Qiu, L., Lu, H., Ding, Y., & Zhu, J. (2019). Sb $_2$ S $_3$ solar cells: Functional layer preparation and device performance. *Inorganic Chemistry Frontiers*, *6*(12), 3381–3397. https://doi.org/10.1039/C9QI00800D

Wibowo, A., Marsudi, M. A., Amal, M. I., Ananda, M. B., Stephanie, R., Ardy, H., & Diguna, L. J. (2020). ZnO nanostructured materials for emerging solar cell applications. *RSC Advances*, *10*(70), 42838–42859. https://doi.org/10.1039/D0RA07689A

Xiao, Y., Wang, H., & Kuang, H. (2020). Numerical simulation and performance optimization of Sb2S3 solar cell with a hole transport layer. *Optical Materials*, *108*, 110414. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2020.110414

Zapata-Torres, M., Fernández-Torres, J. L., Hernández-Rodríguez, E., Mis-Fernández, R., Rejon, V., Peña, J. L., Valaguez-Velazquez, E., & Márquez Herrera, A. (2015). *Study on the ITO/ZnO interface and its effect on CdS/CdTe solar cell performance. 28*(2), 61–65.