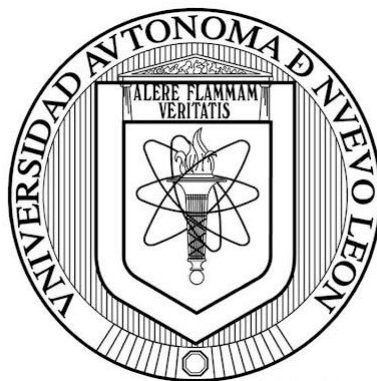


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS



ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE LA COMPOSICIÓN DEL
TERNARIO $Fe_xZn_{1-x}S$ EN LA EFICIENCIA DE
CONVERSIÓN DE ENERGÍA DE CELDAS
SOLARES HÍBRIDAS

Por

PEDRO DAMIÁN HERNÁNDEZ OLIVA

Como requisito parcial para obtener el grado de MAESTRÍA
EN CIENCIAS con Orientación en Química de los Materiales

Noviembre 2025

Estudio de la influencia de la composición del ternario
 $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ en la eficiencia de conversión de energía de celdas
solares híbridas.

Aprobación de la Tesis:

Dra. Thelma Elizabeth Serrano Quezada
Presidente

Dr. Yolanda Peña Méndez
Secretario

Dr. María Idalia del Consuelo Gómez de la Fuente
Vocal

Dra. María Elena Cantú Cárdenas
Subdirectora de Estudios de Posgrado

Estudio de la influencia de la composición del ternario $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ en la eficiencia de conversión de energía de celdas solares híbridas.

Los miembros del comité de tesis aprueban la tesis realizada por el alumno Pedro Damián Hernández Oliva con matrícula 2172357.

Revisión de la tesis:

Dra. Thelma Elizabeth Serrano Quezada

Director de tesis

Dra. María Fernanda Retana Betancourt

Codirector de tesis

Dra. María Idalia del Consuelo Gómez de la Fuente

Revisor

Dr. Rodrigo A. Chan Navarro

Revisor

Dra. Yolanda Peña Méndez

Revisor

Dra. María Elena Cantú Cárdenas

Subdirectora de Estudios de Posgrado

DEDICATORIA:

Esta tesis está dedicada especialmente a mi familia, por estar al borde del cañón alentándome y apoyándome siempre, los amo mucho.

AGRADECIMIENTOS:

Primeramente, me gustaría agradecer al SECIHTI (CONAHCYT) por la beca otorgada durante estos dos años de arduo trabajo, a la Universidad Autónoma de Nuevo León por permitirme la oportunidad de pertenecer a esta gran institución, y especialmente a la Facultad de Ciencias Químicas por brindarme el espacio y materiales necesarios para poder realizar este proyecto.

Quiero agradecer principalmente a mis padres, Pedro Gerardo Hernández Hernández y Olivia Oliva Ramírez, por todo el apoyo que me han brindado durante toda mi vida, por confiar en mí e impulsarme a siempre ser mejor y dar lo mejor de mí en todo lo que he realizado, a mi hermano Carlos Fabián Hernández Oliva por estar a mi lado estos dos años, ayudándome y apoyándome en los momentos en los cuales sentía que ya no podía más, a mis hermanas Claudia Olivia Sánchez Oliva y Ana Gabriela Sánchez Oliva por el apoyo incondicional que me brindaron.

Agradecer también a la Dra. Thelma Serrano Quezada y a la Dra. Fernanda Retana Betancourt, por darme la oportunidad de pertenecer a este gran grupo de investigación, por compartir sus conocimientos conmigo, por brindarme todo su apoyo para que este proyecto saliera adelante, por otorgarme su tiempo en cada revisión de tesis y de seminarios, de todo corazón muchas gracias.

Asimismo, agradecer al grupo de investigación por toda la ayuda, apoyo y conocimientos compartidos a lo largo de estos años, ya que sin ustedes no se hubiera logrado esto, gracias, Mario, Denek, Víctor, Eros, Gerardo.

A mis compañeros de la maestría, Gregorio, Juan Marcos, Lizbeth, Nestor, Valeria, Diego, Juan de Dios y Javier, que tras recorrer este camino durante dos años se han vuelto unos amigos increíbles, gracias por estar y apoyarme.

Sin dejar atrás, agradecer mis amigos, que a lo largo del tiempo se han convertido en mis hermanos, por brindarme esas palabras de aliento y estar en las buenas y malas, muchas gracias, Jesús Herrera, Jesús Saucedo, Rey David Fernández, Daniela Carrera, Kevin Ávila, Fabian Martínez, Kristelle Herrera, Ricardo Hernández, Olympia Flores, Armando Flores, Sarah Valencia.

Y, por último, me gustaría agradecer a la Psicóloga María Fernanda Alvares Acosta, por brindarme un gran apoyo en ese momento difícil en el cual sentía que todo se venía abajo, muchas gracias por acompañarme en todo este proceso.

¡Muchas gracias a todos aquellos que fueron cómplices en este proyecto!

Resumen

Pedro Damián Hernández Oliva

Fecha de Graduación: Noviembre 2025

Universidad Autónoma de Nuevo León

Facultad de Ciencias Químicas

Título del Estudio: Estudio de la influencia de la composición del ternario $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ en la eficiencia de conversión de energía de celdas solares híbridas.

Número de páginas: 99

Candidato para el grado de Maestría en Ciencias con Orientación en Química de los Materiales

Área del estudio:

Propósito y Método del Estudio: las celdas solares híbridas, son una mezcla de nanoestructuras de materiales orgánicos e inorgánicos, por lo que se combinan propiedades únicas de las nanopartículas semiconductoras inorgánicas con las propiedades de los materiales orgánicos/poliméricos. El enfoque de este estudio es la síntesis electroquímica de un material ternario $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ para su uso en celdas solares híbridas y así evaluar si la concentración de Fe en el material influye en la conversión de energía; para lo cual se sintetizó vía oxidación química Poli (3-hexiltiofeno). La caracterización utilizada en este estudio fueron técnicas espectrométricas, de análisis composicional y microscopía obteniendo resultados positivos. Se sintetizó el material ternario, a un voltaje de -1.2V, -1.5V y -1.7V a 600 s con una concentración 1:1, 2:1, 3:1 de Fe:Zn, las eficiencias de las celdas solares obtenidas fueron 1.4958%, 1.1277% y 0.9038% respectivamente.

Contribuciones y Conclusiones: este proyecto contribuyó con una alternativa en la construcción de celdas solares híbridas, empleando un compuesto ternario y dos polímeros, se concluye con resultados positivos más no los esperados, ya que la eficiencia máxima obtenida fue de 1.4958% correspondiente a la síntesis realizada a -1.2V a 600 s con una concentración 1:1 de Fe:Zn.

FIRMA DEL ASESOR

Tabla de contenido

CAPÍTULO 1	16
INTRODUCCIÓN.....	16
1.1 Justificación y propósito.....	16
1.2 Antecedentes:	21
1.3 Análisis crítico de la literatura.....	25
1.4 Aportación científica	26
1.5 Hipótesis.....	26
1.6 Objetivo general.....	26
1.7 Objetivos específicos:	26
CAPÍTULO 2	27
MARCO TEORICO	27
2.1 Celdas Solares	27
2.2 Tipos de celdas solares.....	29
2.2.1 Primera generación de celdas solares	29
2.2.2 Segunda generación de celdas solares	30
2.2.3 Tercera generación de celdas solares	31
2.2.4 Cuarta generación de celdas solares	33
2.3 Celdas solares híbridas.....	33
2.4 Eficiencia de una celda solar	35
2.4.1 Factores que afectan la eficiencia de las celdas solares	36
2.4.1.1 Propiedades del material	36
2.4.1.2 Recolección y generacion de carga.....	36
2.4.1.3 Pérdidas ópticas.....	37
2.5 Materiales para celda solar.....	37
2.5.1 Tipos de materiales.....	37
2.5.2 Semiconductores	38
2.5.3 Materiales ternarios.....	40
2.5.3.1 Aleaciones y semiconductores ternarios	40
2.5.4 Polímeros	42
2.5.5 Polímeros conductores	44
2.5.6 Politiofenos	46
2.5.6.1 Poli(3-hexiltiofeno)	46

2.7 Electroquímica	48
2.8 Técnicas basadas en una excitación de salto de potencial	51
2.8.1 Voltamperometría Cíclica	51
2.8.2 Cronoamperometría	53
2.9 Técnicas de caracterización	55
2.9.1 Espectroscopía UV-Vis	55
2.9.2 Fotoluminiscencia (PL)	56
2.9.3 Microscopía electrónica de barrido (SEM).....	56
2.9.4 Difracción de rayos X (XRD).....	57
2.9.5 Espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR).....	58
CAPÍTULO 3	60
3.1 Síntesis y deposición del material $Fe_xZn_{1-x}S$	60
3.2.1 Lavado de sustratos:	60
3.2.2 Síntesis del $Fe_xZn_{1-x}S$:.....	61
3.3 Síntesis del P3HT	61
3.4 Celdas solares:.....	62
3.4.1 Deposición por <i>Spin-coating</i> de la película P3HT.....	62
3.4.2 Deposición de la capa transportadora de huecos (PEDOT:PSS) por <i>spin-coating</i>	62
3.4.3 Deposición de electrodo de Au	63
3.4.4 Diseño de experimentos de celdas	63
3.5 Técnicas de caracterización	63
CAPÍTULO 4	65
4.1 Caracterización del ternario $Fe_xZn_{1-x}S$:	65
4.1.1 Cronoamperometría:	65
4.1.2 Caracterización composicional:	67
4.1.3 Difracción de Rayos X:.....	67
4.1.4 Caracterización morfológica	71
4.1.5 Espectroscopia por dispersión de energía (EDS)	76
4.1.6 Resultados de UV-Vis:	78
4.1.7 Resultados de Fotoluminiscencia:.....	81
4.2 Caracterización del Poli(3-hexiltiofeno) (P3HT)	82
4.2.1 Resultados de FTIR	83
4.2.2 Resultados de UV-Vis	84

4.2.3 Resultados de Fotoluminiscencia.....	85
4.3 Celdas solares híbridas.....	86
4.3.1 Caracterización de las celdas solares híbridas:	87
CAPÍTULO 5	91
5.1 Conclusiones y Recomendaciones	91
REFERENCIAS.....	95

Índice de Tablas

Tabla 1 DOE para la obtención de películas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ vía electroquímica	61
Tabla 2 DOE para la deposición de PEDOT:PSS como HTL.....	63
Tabla 3 Porcentajes atómicos y de peso para las muestras sintetizadas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$	77
Tabla 4 Parámetros de celda y eficiencias calculadas para las diferentes celdas.....	87

Índice de Figuras

Figura 1 Celda solar híbrida realizada por (Luan et al, 2017).....	22
Figura 2 Funcionamiento de una celda solar (Piña G., 2022)	29
Figura 3 Representación gráfica de las bandas de los materiales aislantes, semiconductores y conductores. (Piña G., 2022).....	38
Figura 4 Cronoamperograma del sistema $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ electrodepositado en ITO a un tiempo de deposición de 600 s a potenciales de deposición de -1.7 V, -1.5 V, -1.2 V con concentraciones de 1:1, 2:1, 3:1 de Fe:Zn.....	66
Figura 5 Películas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente donde a) -1.7 V, 600 s a una concentración 1:1 de Fe:Zn b) -1.5 V, 600 s a una concentración de 2:1 de Fe:Zn c) a -1.2 V, 600 s a una concentración 3:1 de Fe:Zn	67
Figura 6 Patrón de difracción de rayos X de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente a -1.7 V, 600 s a una concentración 1:1 de Fe:Zn	69
Figura 7 Patrón de difracción de rayos X $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente a -1.5 V, 600 s a una concentración de 2:1 de Fe:Zn	70
Figura 8 Patrón de difracción de rayos X $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente a -1.2 V, 600 s a una concentración 3:1 de Fe:Zn	71
Figura 9 Imágenes de SEM de las películas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente a -1.7 V, 600 s a una concentración 1:1 de Fe:Zn	72
Figura 10 Imágenes de SEM de las películas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente a -1.5 V, 600 s a una concentración de 2:1 de Fe:Zn	73
Figura 11 Imágenes de SEM de películas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente a -1.2 V, 600 s a una concentración 3:1 de Fe:Zn	74
Figura 12 Imágenes de SEM del espesor de películas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente donde a) -1.7 V, 600 s a una concentración 1:1 de Fe:Zn/b) -1.5 V, 600 s a una concentración de 2:1 de Fe:Zn/ c) a -1.2 V, 600 s a una concentración 3:1 de Fe:Zn	75
Figura 13 Espectro de absorbancia de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente donde a) -1.7 V, 600 s a una concentración 1:1 de Fe:Zn/b) -1.5 V, 600 s a una concentración de 2:1 de Fe:Zn/ c) a -1.2 V, 600 s a una concentración 3:1 de Fe:Zn	79
Figura 14 Tauc-plot para el cálculo del E_g para la muestra con concentraciones de Fe:Zn de 2 a 1 en la síntesis de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$	80
Figura 15 Espectro de fotoluminiscencia de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente donde a) -1.7 V, 600 s a una concentración 1:1 de Fe:Zn/b) -1.5 V, 600 s a una concentración de 2:1 de Fe:Zn/ c) a -1.2 V, 600 s a una concentración 3:1 de Fe:Zn	82
Figura 16 P3HT sintetizado.	83
Figura 17 Espectro infrarrojo del P3HT sintetizado	84
Figura 18 Espectro de absorción del P3HT	85
Figura 19 Espectro de fotoluminiscencia del P3HT.....	86
Figura 20 Celdas solares con configuración a) ITO/ $\text{Fe}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{S}$ /P3HT/NPAu b) ITO/ $\text{Fe}_{0.66}\text{Zn}_{0.33}\text{S}$ /P3HT/PEDOT:PSS/NPAu c) ITO/ $\text{Fe}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{S}$ /P3HT/PEDOT:PSS/NPAu	87
Figura 21 Curva I-V de la celda ITO/ $\text{Fe}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{S}$ /P3HT/NPAu	88
Figura 22 Curva I-V de la celda ITO/ $\text{Fe}_{0.66}\text{Zn}_{0.33}\text{S}$ /P3HT/PEDOT:PSS/NPAu	88
Figura 23 Curva I-V de la celda ITO/ $\text{Fe}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{S}$ /P3HT/PEDOT:PSS/NPAu	89

Simbología y Abreviaturas

Ac	Área superficial de la celda
Eg	Brecha de banda
cm ²	Centímetros cuadrados
Isc	Corriente de corto circuito
Im	Corriente en el punto máximo de potencia
η	Eficiencia de celda solar
eV	Electronvolts
<i>t</i>	Espesor
°	Grados
g	gramos
°C	Grados centígrados
h	Horas
ϕ	Irradiancia sobre la celda
mA	Miliamperes
mL	Mililitros
min	Minutos
mg	Miligramos
nm	Nanómetros
rpm	Revoluciones por minuto
m-Si	Silicio monocristalino
p-Si	Silicio policristalino
a-Si	Silicio amorfo
%P/V	Porcentaje peso volumen
V	Volts
Voc	Voltaje de circuito abierto
Vm	Voltaje en el punto máximo de potencia
FTIR	Espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier
XRD	Difracción de rayos X
EDS	Espectroscopia por dispersión de energía
SEM	Microscopia electrónica de barrido
PL	Espectroscopia de fotoluminiscencia
PANI	Polianilina
P3HT	Poli (3-hexitiofeno)
ITO	Oxido de estaño dopado con indio
PEDOT:PSS	Poli(3,4-etilendioxitiofeno)
PPy	Polipirrole
CV	Voltamperometría cíclica
DSSC	Celdas solares sensibilizadas con colorantes
CIGS	Celdas solares de película delgada de CdTe, seleniuro de galio y cobre
OSC	Celdas solares orgánicas
PSC	Celdas solares de perovskitas
QD	Puntos cuánticos

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Justificación y propósito

Las energías no renovables son aquellas que no se restauran a corto plazo y se agotan cuando se utilizan, algunas de estas fuentes de energía son: el carbón, el petróleo, el gas natural y el uranio (Altomonte *et al.* 2003). Se ha generado un incremento masivo en el consumo de recursos naturales y energéticos susceptibles de ocasionar impactos negativos (Incháustegui Moreno *et al.* 2019). Esto llevó al desarrollo de propuestas de generación de energía llamadas “energías renovables” o “energías limpias” a partir de recursos naturales que pudieran ser aprovechados de forma sustentable, entre las que podemos mencionar, energía solar, energía hidráulica, energía geotérmica (Villegas *et al.* 2021).

La energía solar es una fuente de energía renovable, sostenible y ampliamente distribuida. Como recurso renovable, la energía solar tiene la capacidad de remplazar los combustibles fósiles ampliamente utilizados en un futuro próximo (Pourasl *et al.* 2023). El uso de energía solar se está expandiendo rápidamente debido a los efectos negativos de las fuentes de energía convencionales basadas en combustibles fósiles en el medio ambiente. La energía solar es un recurso confiable y abundante, y las celdas solares son una forma útil y eficiente de capturarla. Con el tiempo se han construido varios tipos de celdas solares, cada una con materiales y mecanismos únicos (Oni *et al.* 2024).

Las celdas solares son dispositivos que convierten directamente la radiación solar a electricidad. Desde mediados del siglo XX, comenzó su desarrollo continuo, primeramente, para alimentar a los satélites. Actualmente alcanza una extensa variedad de aplicaciones, y contribuye en la generación masiva o aislada de energía eléctrica. Las primeras celdas solares de Si-c (silicio monocristalino) se fabricaron en 1954, con uniones n-p mediante la difusión térmica del boro en la oblea tipo n, el material que comúnmente se utiliza es el titanio (Ti) y plata (Ag) (Matsumoto Y. , 2011). En los últimos años se han hecho investigaciones en ciertos materiales para descubrir sus propiedades fotovoltaicas para su aplicación en celdas solares (Salas Noguera, 2017), y durante la última década estas han sido desarrolladas y enfocadas hacia los semiconductores aplicados en sistemas fotovoltaicos híbridos de películas delgadas. Estas celdas están basadas en películas delgadas de

óxidos semiconductores de ancho de banda prohibida amplia que actúan como aceptores de electrones y semiconductores inorgánicos como absorbedores (Pérez O., 2019).

La generación de distintas celdas fotovoltaicas cuenta esencialmente la historia de las etapas de su evolución. Hay cuatro categorías principales que se describen como las generaciones de tecnología fotovoltaica de las últimas décadas, desde la invención de las celdas solares (Pastuszak *et al.* 2022):

- **Primera generación:** esta categoría incluye tecnologías de celdas fotovoltaicas basadas en silicio monocristalino y policristalino, y arseniuro de galio (GaAs).
- **Segunda generación:** esta generación incluye el desarrollo de tecnología de celdas fotovoltaicas de primera generación, así como el desarrollo de tecnología de celdas fotovoltaicas de película delgada a partir de silicio monocristalino y silicio amorfo, celdas fotovoltaicas de cobre indio galio selenio (CIGS) y de telurio de cadmio/sulfuro de cadmio (CdTe/CdS).
- **Tercera generación:** esta generación cuenta con tecnologías fotovoltaicas que se basan en compuestos químicos más recientes. Además, también pertenecen a esta generación las tecnologías que utilizan “películas” nanocristalinas, puntos cuánticos, celdas solares sensibilizadas con colorantes (DSSC), celdas solares basadas en polímeros orgánicos, etc.

- **Cuarta generación:** esta generación incluye la baja flexibilidad o el bajo costo de los polímeros de película delgada junto con la durabilidad de “nanoestructuras inorgánicas innovadoras como óxidos y nanopartículas metálicos o de base orgánica”.

Los semiconductores son materiales que presentan propiedades eléctricas ya sea conductivas como aislantes, además pueden pasar corriente más fácilmente de una dirección a otra, mostrar una mayor resistencia y ser sensibles a la luz y al calor. Estos dispositivos son de gran interés práctico, debido a que constituyen una amplia variedad de dispositivos utilizados en electrónica, un ejemplo de estos es el disulfuro de hierro (FeS_2) (Cruz T., 2018). Las películas delgadas de este material atraen la atención de muchos investigadores debido al buen potencial para aplicaciones fotovoltaicas y fotoelectroquímicas, las cuales consisten en elementos abundantes y no tóxicos (Kassim *et al.* 2009).

Entre estos sistemas, las celdas solares híbridas implementan el uso de semiconductores orgánico-inorgánico con el fin de incorporar ambas propiedades en un único sistema. De manera general estas celdas están constituidas de un ánodo, cátodo y la capa fotoactiva, la cual está conformada de dichos materiales orgánicos e inorgánicos. Entre los materiales orgánicos más interesantes para ser utilizados, se encuentran los polímeros conductores. Los materiales inorgánicos complementan las propiedades de los polímeros conductores entre los cuales podemos encontrar a los óxidos metálicos, los calcogenuros, semiconductores de los grupos III-V, IV, III-I-VI que varían en

tamaño y morfología (por ejemplo, nanopartículas, nanoalambres, nanobarras, etc.) (Retana *et al.* 2016).

En algunos casos, los materiales utilizados para la fabricación de celdas solares tienen un desempeño muy pobre en la conversión de energía, por lo cual el dopaje es de gran ayuda ya que mediante esta técnica se pueden mejorar las características optoelectrónicas del material base a utilizar en la celda solar. El dopaje es la adición de un material a otro para así mejorar sus propiedades; debemos tener en cuenta que para ser llamado dopaje no se debe de exceder un valor permisible, dicho valor por lo general es de 2%, si este porcentaje se excede se dice que es un material ternario no estequiométrico.

El dopaje es una técnica utilizada para variar el número de electrones y huecos en semiconductores. En semiconductores de tipo n aumentan la conductividad mediante el aumento del número de electrones disponibles; en los semiconductores tipo p aumenta la conductividad al aumentar el número de huecos presentes (Honsberg *et al.* 2019). En particular, el dopaje de la pirita con Co ha sido objeto de algunos estudios. En el caso de cristales sintéticos preparados por CVD, se ha investigado su influencia en las propiedades eléctricas del material, obteniéndose pirita dopada de conductividad tipo n (Díaz Chao, 2009). Cuando se transporta FeS_2 en presencia de una fuente que contiene ZnS, se obtienen cristales de pirita dopada con Zn en la cámara de crecimiento. La mayor parte reacciona con sulfuro de hierro bajo la formación de $\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}$ el cual es un compuesto ternario no estequiométrico. Además,

esta solución de estado sólido actúa como eliminador de impurezas metálicas en la fuente de pirita (Buker *et al.* 1999).

Los polímeros conductores son polímeros insaturados que poseen cadenas conjugadas con electrones tipo π que se encuentran deslocalizados. Estos polímeros presentan propiedades semiconductoras con energías de banda de aproximadamente 1.5 eV (Bolaños Ch *et al.* 2018). El poli(3-hexiltiofeno) (P3HT) es muy útil en los campos de investigación de la electrónica orgánica, porque es un material representativo de los polímeros semiconductores orgánicos solubles. Normalmente, el rendimiento de un material electrónico es sensible a la calidad del material, la pureza y el peso molecular son factores importantes. Dentro de las ventajas del P3HT tenemos la alta regioregularidad (RR) >99 %, peso molecular promedio en número: $M_n = 27\,000 \sim 45\,000$ (Ozawa, 2019).

El propósito de esta tesis es el desarrollo y estudio de celdas solares híbridas basadas en $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ con P3HT a fin de evaluar la influencia que tiene la composición del material ternario y configuración de la misma para obtener una mayor eficiencia de conversión de energía.

1.2 Antecedentes:

La FeS_2 es un gran semiconductor ampliamente utilizado en dispositivos de recolección y almacenamiento de energía debido a su estrecha energía de banda prohibida (0.95 eV), alta absorción de la luz ($6 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$) y su estabilidad superior contra la fotocorrosión.

En 2017 Luan y colaboradores, prepararon celdas solares sólidas de pirita con estructura invertida con configuración:

FTO/TiO₂/P3HT:PCBM:NCs/PEDOT:PSS/Ag

Las nanocristales de pirita fueron añadidos a la capa activa en diferentes concentraciones sobre el polímero P3HT:PCBM ([6,6]fenil-C61-ácido butírico metil éster). La capa de dióxido de titanio actúa como la transportadora de electrones y la capa de poli(3,4-etilendioxitiofeno)-poli(estirenosulfonato) (PEDOT:PSS) es la que actúa como la capa de huecos (Figura 1). Los resultados mostraron que la presencia de pirita en relación 1.25 mg/mL en la capa activa podría mejorar el rendimiento de las celdas obteniendo una eficiencia del 3.0%. También esta celda con concentración de 1.25 mg/mL mantuvo una alta estabilidad del 83.3% de su eficacia inicial después de exponerse al aire durante 15 semanas (Luan *et al.* 2017). Esta configuración es la base que se utilizó para las celdas desarrolladas en este proyecto, modificandoles el material fotoactivo a fin de mejorar la eficiencia.

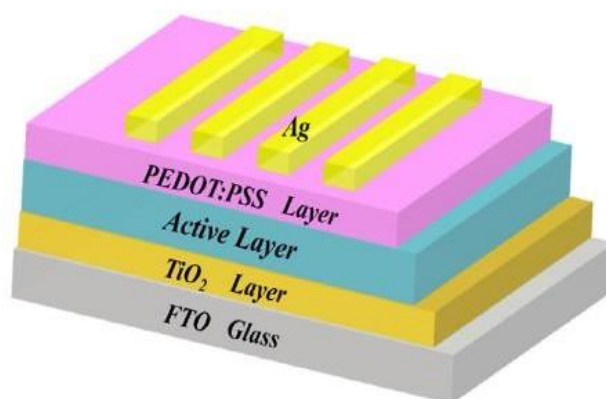


Figura 1 Celda solar híbrida realizada por (Luan *et al.* 2017)

El dopaje de la pirita con metales de transición ha sido objeto de algunos estudios, en las últimas décadas, el desarrollo y la caracterización de los calcogenuros ternarios ha aumentado debido a que estos se consideran materiales potenciales con respecto a un amplio espectro de aplicaciones optoelectrónicas, por ejemplo, en dispositivos fotovoltaicos, celdas fotoelectroquímicas, láseres y celdas solares (Nasir *et al.* 2015). Un ejemplo de este tipo de material ternario es el FeZnS el cual ha demostrado en trabajos previos que podría utilizarse como semiconductor directo. Además, presenta una banda de energía prohibida de 2.37–2.77 eV (Gayathri *et al.* 2019) y se encontró que su coeficiente de absorción varió de $0.2 \times 10^{-7} \text{ m}^{-1}$ a $2.3 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$ (Uhuegbu, 2011).

En 2019, G.D. Gayathri y colaboradores sintetizaron FeZnS₂ y se depositó mediante agitación en un baño químico por 2 h. La molécula se caracterizó por XDR y UV-Vis donde determinaron las reflexiones más intensas a 23.5°, 29.02°, 31.05° y 43.8° en 2θ correspondientes a los planos hkl en 001, 104, 106 y 1012, respectivamente. Además, determinaron una E_g de 2.37–2.77 eV con una absorción entre 293-301 nm. Los valores que obtuvieron servirán de referencia para el presente proyecto (Gayathri *et al.* 2019).

En el 2020, M. Retana *et al.* sintetizaron Fe_xZn_{1-x}S mediante un método de baño electroquímico por 10 min, donde determinaron la ventana de potencial de -1.19 a -1.74 V, también reportaron la importancia de la formación de un intermediario llamado disulfuro de formamidina, este es la fuente de iones S²⁻, y

por último determinaron que el material tiene una fuerte absorción en la región UV. Bajo condiciones similares se trabajará para la síntesis del material a utilizar con el propósito de caracterizar las propiedades morfológicas y optoelectrónicas del material al ser sintetizado por este método (Retana *et al.* 2020). En 2022 Piña *et al.* dan continuación a esta investigación y obtienen que las morfología superficial y microestructura de las películas delgadas tienen una variación según el potencial y el tiempo de deposición utilizados. A diferente potencial durante un tiempo de deposición de 300 s reportan una película no porosa sin una morfología definida, mientras que a un tiempo de 600 s se observa una película no porosa que presenta partículas con morfologías de esferas y cubos, las cuales se encuentran distribuidas aleatoriamente sobre la superficie del sustrato de ITO. (Piña G., 2022).

Considerando estos dos últimos antecedentes, se desea continuar con la investigación realizada por Retana y Piña, ya que estos trabajos sentaron las bases para la síntesis, abriendo la ventana de oportunidad de estudiar la composición de las fases generadas y verificar en cuál de las condiciones se obtiene una ternario abundante en Fe, a fin de incrementar la aportación de las propiedades optoelectrónicas del mismo. Además, se propone utilizar este material en celdas solares híbridas, las cuales tendrán al ternario como material inorgánico y al P3HT como semiconductor orgánico.

El P3HT se utiliza como un polímero base en las celdas solares híbridas debido a sus características como la movilidad de huecos, baja conductividad, foto estabilidad y un ancho de banda prohibida amplio. En 2018 Ansari *et al.*,

reportaron la naturaleza molecular del polímero sintetizado dada por FTIR, obteniendo señales características a 2925.2 cm^{-1} y 3400.9 cm^{-1} los cuales se deben a la vibración de C-H en las cadenas alifáticas de los grupos hexilo (Ansari *et al* 2018).

Finalmente, en 2019, V. Chaudhary *et al*, generaron películas delgadas de P3HT con diferentes solventes: diclorometano y cloroformo. Esto se realizó mediante la técnica de *spin-coating* a 2500 rpm durante 60 s, manteniendo el espesor de la película alrededor de los 30 nm. Posterior a eso, se les realizó tratamiento térmico a $60\text{ }^{\circ}\text{C}$ durante 10 min para eliminar el solvente remanente. Se caracterizaron las películas por UV-Vis para confirmar su actividad en el rango visible (Chaundhry *et al.* 2019). En el actual proyecto se siguió esta metodología para depositar el polímero a las películas del ternario sintetizado vía electroquímica, y así se generó la capa fotoactiva híbrida, base para la celda solar realizada.

1.3 Análisis crítico de la literatura

En base a la literatura reportada, las celdas solares han tenido un gran desarrollo en los últimos años, se han investigado diferentes materiales conductores y semiconductores para su desarrollo, dichos autores, han tenido buenos resultados utilizando el polímero P3HT, así como materiales dopados a base de pirita (FeS_2) como el reportado en 2020 por M. Retana *et al*, el cual menciona que la absorción UV del material ternario sintetizado es buena lo que nos indica es un buen material para la aplicación en celdas solares híbridas.

Hasta el momento, no se ha reportado una celda solar híbrida que utilice un sulfuro ternario de Fe y Zn, por lo que se propone realizar este estudio.

1.4 Aportación científica

Celdas solares híbridas basadas en diferentes composiciones del ternario $\text{Fe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ y P3HT para incrementar la eficiencia de conversión de energía.

1.5 Hipótesis

Las celdas solares híbridas de $\text{Fe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ y P3HT presentan eficiencias de conversión de energía superiores al 3%.

1.6 Objetivo general

Generar celdas solares híbridas de $\text{Fe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ y P3HT en diferentes configuraciones a fin de incrementar la eficiencia de conversión de energía.

1.7 Objetivos específicos:

1. Sintetizar $\text{Fe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ vía electroquímica.
2. Caracterizar el material ternario por XRD, UV-vis, PL, y FE-SEM.
3. Sintetizar poli(3-hexiltiofeno) vía de oxidación química.
4. Caracterizar el polímero con el semiconductor por FT-IR, UV-Vis, PL.
5. Elaborar celdas solares híbridas con ambos materiales variando la composición de los materiales en la celda.
6. Caracterizar las celdas solares mediante curvas I-V

CAPÍTULO 2

MARCO TEORICO

2.1 Celdas Solares

Las preocupaciones sobre el cambio climático y el aumento de la demanda de la electricidad debido, entre otras cosas, a una población en constante aumento, requieren esfuerzos para alejarse de los métodos convencionales de producción de energía. El aumento de los niveles de dióxido de carbono en la atmósfera provocado por el uso de combustibles fósiles es uno de los factores que provocan el cambio climático actual. El cambio a energías renovables producirá energía con una huella ambiental menor en comparación de combustibles fósiles. Podemos aprovechar todo el potencial de la energía solar para desarrollar las mejores tecnologías posibles de recolección de energía capaces de convertir la energía solar en electricidad (Wilson *et al.* 2020).

La energía solar utilizada actualmente es muy marginal: el 0.015% se utiliza para la producción de electricidad, el 0.3% para calefacción, el 11% se utiliza en la fotosíntesis natural de biomasa. En cambio, entre el 80% y 85% de las necesidades energéticas se satisfacen con combustibles fósiles (Singh *et al.* 2021).

Las celdas solares son fabricadas a partir de materiales semiconductores, usualmente silicio en sus formas cristalina, policristalina o amorfa. Por otra parte, se puede optar por utilizar compuestos formados por elementos de los grupos III, V, IIb, y IV. Los materiales de las celdas solares se seleccionan principalmente en base a sus características de absorción en relación con el espectro solar, y sus posibilidades y costos de fabricación, por esta razón destacan los materiales ternarios.

Para entender el funcionamiento de las celdas solares debemos saber cómo están compuestas, estas básicamente están constituidas de dos láminas delgadas tipo p o de menor carga de electrones y otro tipo n con una mayor carga de electrones, y contactos metálicos, uno superior y uno inferior. Entonces, cuando los fotones inciden sobre la celda solar, esta radiación energiza a los electrones y estos comienzan a moverse hasta llegar a la unión que separa las dos láminas, pasando a través de ella generando un flujo de electrones y así produciendo electricidad (Electrical4U, 2020) (Higuera Valenzuela, 2018). En la Figura 2 se muestra el proceso del funcionamiento de las celdas solares.

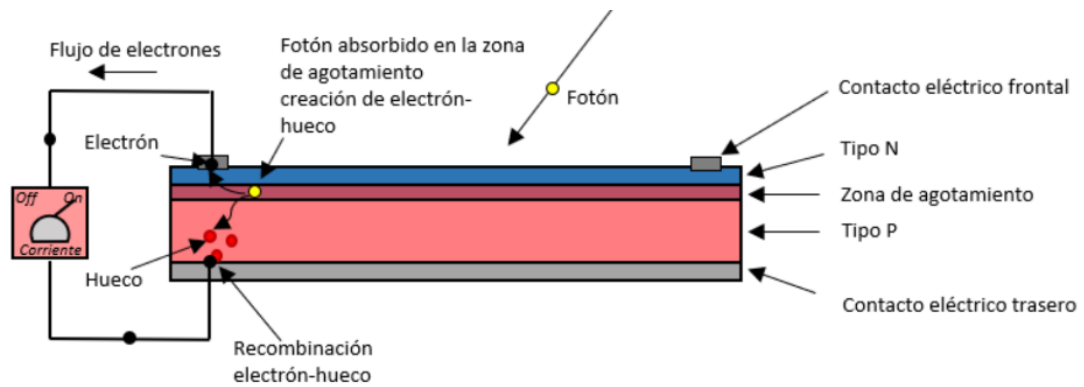


Figura 2 Funcionamiento de una celda solar (Piña G., 2022)

2.2 Tipos de celdas solares

2.2.1 Primera generación de celdas solares

Las celdas solares basadas en silicio fueron el primer sector de la energía fotovoltaica en ingresar al mercado, utilizando información de procesamiento y materias primas suministradas por la industria de la microelectrónica. Las celdas solares basadas en silicio ahora comprenden más del 80% de la capacidad instalada mundial y tiene una participación en el mercado del 90%. Debido a su eficiencia relativamente alta, son las celdas más utilizadas. La primera generación de celdas solares incluye materiales basados en capas cristalinas gruesas compuestas de silicio (Si). Esta generación se basa en silicio monocristalino, policristalino, multicristalino así como de uniones III-V (Pastuszak *et al.* 2022).

- Celdas solares basadas en silicio monocristalino (m-Si).

Eficiencia 15-24%; vida útil de 25 años. Ventajas: estabilidad, alto rendimiento, larga vida útil. Restricciones: alto costo de fabricación, mayor sensibilidad a la temperatura, problema de absorción, pérdida de material.

- Celdas solares basadas en silicio policristalino (p-Si). Eficiencia 10-18%; banda prohibida 1.7 eV; vida útil de 14 años. Ventajas: el procedimiento de fabricación es simple, rentable, disminuye el desperdicio de silicio, mayor absorción en comparación con m-Si. Restricciones: menor eficiencia, mayor sensibilidad a la temperatura.
- Celdas solares basadas en GaAs. Eficiencia 28-30%; vida útil de 18 años; ventajas: alta estabilidad, menor sensibilidad a la temperatura, mejor absorción que m-Si, alta eficiencia. Restricciones: extremadamente costosas

2.2.2 Segunda generación de celdas solares

Las celdas solares de película delgada de CdTe, seleniuro de galio y cobre (CIGS) o silicio amorfo se han diseñado para ser un reemplazo para las celdas de silicio monocristalino. Ofrecen propiedades mecánicas mejoradas que son ideales para aplicaciones flexibles, pero esto conlleva el riesgo de una eficiencia reducida. Mientras que la primera generación de celdas solares fue un ejemplo de la microelectrónica, la evolución de películas delgadas requirió nuevos métodos de crecimiento y abrió el sector a otras áreas, incluida la electroquímica (Pastuszak *et al* 2022).

- Celdas basadas en silicio amorfo (a-Si). Eficiencia 5-12%; banda prohibida 1.7 eV; vida útil de 15 años. Ventajas: menos costosas, disponibles en grandes cantidades, no tóxicas, alto coeficiente de absorción. Restricciones: menor eficiencia, dificultad para seleccionar materiales dopantes, poca vida útil de los portadores minoritarios.

- Celdas solares basadas en telurio de cadmio/sulfuro de cadmio (CdTe/CdS). Eficiencia 15-16%; banda prohibida 1.45 eV; vida útil de 20 años; ventajas: alta tasa de absorción, se requiere menos material para la producción. Restricciones: menor eficiencia, el Cd es extremadamente tóxico, el Te es limitado, más sensible a la temperatura.
- Celdas solares basadas en seleniuro de cobre, indio y galio (CIGS), eficiencia de 20%; banda prohibida 1.7 eV; vida útil de 12 años; ventajas: se requiere menos material para la producción. Restricciones: precio muy elevado, no estable, más sensible a la temperatura, muy poco fiable.

2.2.3 Tercera generación de celdas solares

La tercera generación de celdas solares (que incluye las celdas solares tándem, perovskitas, sensibilizadas con colorante, orgánicas y conceptos emergentes) representan una amplia gama de enfoques, desde sistemas económicos de baja eficiencia (celdas solares orgánicas sensibilizadas con colorante) hasta sistemas costosos de alta eficiencia (celdas multiunión III-V) para aplicaciones que van desde la integración de edificios hasta las aplicaciones espaciales. Las celdas fotovoltaicas de tercera generación a veces se denominan “conceptos emergentes” debido a su escasa penetración en el mercado, aunque algunas de ellas se han estudiado durante más de 25 años (Pastuszak *et al.* 2022).

Las últimas tendencias en el desarrollo de celdas fotovoltaicas de silicio son métodos que implican la generación de niveles adicionales de energía en la

estructura de la banda del semiconductor. Los estudios más avanzados de tecnología de fabricación y mejoras de eficiencia se concentran ahora en las celdas solares de tercera generación (Pastuszak *et al.* 2022).

Uno de los métodos actuales para aumentar la eficiencia de las celdas solares es la introducción de niveles adicionales de energía en la brecha de banda del semiconductor (celdas IBSC e IPV) y el uso creciente de la implantación de iones en el proceso de fabricación. Otras celdas innovadoras de tercera generación que son tecnologías “emergentes” comerciales menos conocidas incluyen (Pastuszak *et al.* 2022):

1. Celdas fotovoltaicas de materiales orgánicos (OSC).
2. Celdas fotovoltaicas sensibilizadas con colorante (DSSC).
3. Celdas fotovoltaicas de perovskitas (PSC).
4. Celdas fotovoltaicas de puntos cuánticos (QD).
5. Celdas fotovoltaicas de unión múltiple.

Comparación de celdas fotovoltaicas de tercera generación:

- Celdas solares sensibilizadas con colorante. eficiencia: 5 ÷ 20%; ventajas: menor costo, operación con poca luz y ángulo más amplio, operación a menor temperatura interna, robustez y vida útil prolongada. Restricciones: problemas con la estabilidad de la temperatura, sustancias venenosas y volátiles.

- Celdas solares basadas en puntos cuánticos. eficiencia: $11 \div 17\%$; ventajas: bajo costo de producción, bajo consumo de energía. Restricciones: alta toxicidad en la naturaleza, degradación.
- Celdas solares basadas en células fotovoltaicas orgánicas y poliméricas: eficiencia: $9 \div 11\%$; ventajas: bajo costo de procesamiento, menor peso, flexibilidad, estabilidad térmica. Restricciones: baja eficiencia.
- Celdas solares basadas en perovskita: eficiencia: 21% ; ventajas: bajo costo y estructura simplificada, peso ligero, flexibilidad, alta eficiencia, bajo costo de fabricación. Restricciones: inestable.
- Celdas solares multiunión: eficiencia: 36% y superior; ventajas: alto rendimiento. Restricciones: complejo, costoso

2.2.4 Cuarta generación de celdas solares

Las celdas fotovoltaicas de cuarta generación también se conocen como celdas inorgánicas híbridas porque combinan el bajo coste y la flexibilidad de las películas delgadas de polímeros con la estabilidad de las nanoestructuras orgánicas, como las nanopartículas y los óxidos metálicos, los nanotubos de carbono, el grafeno y sus derivados. Estos dispositivos, a los que a menudo se denomina "nanofotovoltaicos", podrían convertirse en el futuro prometedor de la energía fotovoltaica (Pastuszak *et al.* 2022).

2.3 Celdas solares híbridas

Las celdas solares híbridas son una mezcla de nanoestructuras de materiales orgánicos e inorgánicos. Por lo tanto, combinan las propiedades

únicas de las nanopartículas semiconductoras inorgánicas con las propiedades de los materiales orgánicos/poliméricos. Además de esto, la síntesis a bajo costo, la procesabilidad y la fabricación versátil de dispositivos de películas delgada los hacen atractivos.

En la literatura, las celdas solares híbridas se fabrican usando distintos conceptos, como celdas solares sensibilizadas (*dye-sensitized*) y celdas solares híbridas que utilizan el concepto de la heterounión masiva con diferentes nanopartículas (Günes *et al.* 2007).

La alternativa DSSC (*Dye Sensitized Solar Cells*) propuesta en 1991 por Gratzel implica la adsorción de un colorante sobre la superficie del semiconductor (óxido de titanio, TiO_2) que actúa como captador de energía solar. La excitación inducida por el fotón tiene lugar en el colorante que transfiere un electrón al semiconductor iniciando un ciclo de corriente. El TiO_2 sólo puede excitarse con radiación ultravioleta. El colorante extiende el rango de absorción hacia longitudes de onda mayores, hacia la zona del visible (Sanchez-de-Armas *et al.* 2015).

La integración de polímeros con nanomateriales ha dado lugar a sistemas híbridos que combinan las ventajas de los semiconductores orgánicos y las nanoestructuras inorgánicas. Estos sistemas aprovechan la absorción óptica ajustable de los polímeros y la superior movilidad de carga y estabilidad de los materiales.

Una configuración ampliamente estudiada implica la mezcla de polímeros conjugados, como el poli(3-hexiltiofeno) (P3HT), con dióxido de titanio (TiO₂) u óxido de zinc (ZnO) nanoestructurados. Estos nanomateriales promueven una separación de fases eficiente y mejoran la disociación de excitones y transporte de carga, mejorando así la eficiencia de conversión de energía (Xu *et al.* 2022)

2.4 Eficiencia de una celda solar

La eficiencia de conversión de una celda solar es el porcentaje de la energía solar que absorbe un dispositivo fotovoltaico y que se convierte en electricidad utilizable. Mejorar esta eficiencia de conversión es un objetivo clave de la investigación y ayuda a que las tecnologías fotovoltaicas sean competitivas en términos de costos con respecto a las fuentes de energía convencionales. La eficiencia se puede calcular de acuerdo con las ecuaciones 1 y 2 (Novoa Jerez *et al.* 2020) (Tlaxcaltecatl *et al.* 2021):

$$\eta = \frac{I_m * V_m}{\phi * Ac} * 100 \quad (1)$$

$$FF = \frac{I_m * V_m}{I_{sc} * V_{oc}} \quad (2)$$

Donde:

- η : eficiencia de la celda solar
- I_{sc} : Corriente de corto circuito
- V_{oc} : Voltaje de circuito abierto
- ϕ : Irradiancia a la que se somete la celda
- I_m : corriente en el punto máximo de potencia

- V_m : voltaje en el punto máximo de potencia
- A_c : área superficial de la celda

2.4.1 Factores que afectan la eficiencia de las celdas solares

Numerosos factores intrínsecos y extrínsecos influyen en la eficiencia, incluyendo la propiedad del material, la arquitectura del dispositivo, las condiciones ambientales y los procesos de fabricación.

2.4.1.1 Propiedades del material

La elección de los materiales fotoactivos afecta fundamentalmente la eficiencia de las celdas solares a través de los parámetros como la banda prohibida, la movilidad de los portadores, el coeficiente de absorción y la longitud de difusión de los excitones; un ejemplo es el silicio, utilizado en celdas solares tradicionales, ofrece una banda prohibida de 1.1 eV, lo que permite la absorción de amplio espectro (Green *et al.* 2015)

2.4.1.2 Recolección y generacion de carga

La generación, separación y recolección eficientes de portadores de carga son esenciales. Las pérdidas por recombinación ya sean radiactivas Shockley-Read-Hall o Auger, representan importantes cuellos de botella en la eficiencia (Kirchartz *et al.* 2018). Las capas de transporte de carga también deben garantizar la extracción selectiva de electrones y huecos, minimizando al mismo tiempo las pérdidas resistivas y el atrapamiento en la carga. En celdas solares nanoestructuradas e híbridas, las interfases entre diferentes materiales desempeñan un papel fundamental. Una ingeniería de interfaz deficiente puede

provocar estados de trampa y centros de recombinación reduciendo así la eficiencia (Yoo *et al.* 2020).

2.4.1.3 Pérdidas ópticas

Las pérdidas ópticas reflectantes y parásitas reducen el número de fotones que llegan a la capa activa. Los recubrimientos antirreflectantes, la texturización de la superficie y las nanopartículas plasmónicas se utilizan habitualmente para mitigar estas pérdidas y mejorar el atrapamiento de la luz (Atwater *et al.* 2010).

2.5 Materiales para celda solar

2.5.1 Tipos de materiales

Un conductor es un material que permite el flujo de carga cuando se le aplica el voltaje. Los conductores tienen una conductividad muy alta, por lo que pueden conducir corriente eléctrica fácilmente, no existe una brecha de energía o es muy baja entre la banda de conducción y de valencia. Un semiconductor es un material cuya conductividad se encuentra entre el conductor y el aislante. Tienen una conductividad intermedia, por lo cual pueden actuar como aislante y conductores a diferentes condiciones. La banda prohibida de un semiconductor es mayor a la de los conductores, pero más pequeña que la del aislante. Un aislante es un material que no permite el paso de corriente, tiene una conductividad muy baja, por lo que no permite un flujo de corriente. La banda prohibida en un aislante es relativamente grande a comparación de los conductores o semiconductores (Electrical Technology, 2019). En la Figura 3 se presenta las diferencias entre estos materiales:

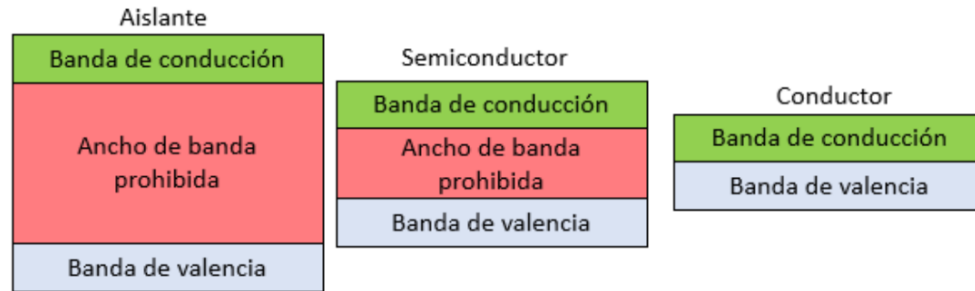


Figura 3 Representación gráfica de las bandas de los materiales aislantes, semiconductores y conductores. (Piña G., 2022)

2.5.2 Semiconductores

Como ya se mencionó, los semiconductores son sustancias con características a medio camino entre un conductor y un aislante. Los semiconductores son utilizados como base de transistores, diodos, circuitos integrados, celdas solares, y son esenciales para la electrónica moderna (Hossain *et al.* 2023).

Una característica muy importante de estos materiales es la posibilidad de modificar la cantidad de electrones en los materiales semiconductores, generando así dos tipos de semiconductores;

- Tipo p: tienen un exceso de electrones
- Tipo n: presenta una falta de electrones

Además de esta clasificación, los semiconductores pueden ser de distintos tipos: elementos binarios, ternarios, cuaternarios, orgánicos, inorgánicos, sólidos o líquidos, cristalinos o amorfos. Los semiconductores ternarios son ampliamente estudiados, particularmente los elementos pertenecientes a las familias I-III-VI₂ y II-IV-V₂ (Piña G., 2022).

Los procesos mediante los cuales se excitan portadores desde los niveles ocupados a los niveles vacíos son los llamados mecanismos de generación de portadores. La generación de portadores libres en un semiconductor puede deberse a causas internas (excitación térmica) o externas (radiación electromagnética, campos intensos, inyección desde otra zona del material, etc.). Los portadores libres excitados por estímulos externos no permanecen indefinidamente en ese estado, ya que existen diversos mecanismos que tienden a hacerlos volver al estado inicial. Son los llamados mecanismos de recombinación (Gilliland, 1996). Entre ellos podemos señalar:

- **Recombinación radiativa:** encuentro directo entre un electrón y un hueco que se recombinan emitiendo un fotón de energía igual a la banda prohibida (interacción entre dos partículas).
- **Recombinación auger:** la energía del electrón que se recombina es cedida como energía cinética a otro electrón de la banda de conducción (interacción entre tres partículas).
- **Recombinación por trampas:** el electrón es capturado por un nivel localizado (trampa), quedando, en un estado metaestable y cediendo el exceso de energía a la red, a través de la intervención de ésta y el estado localizado, interacción que es, en general intensa debido a que los niveles profundos producen una fuerte deformación de la red entorno a ellos. Posteriormente dicho nivel puede capturar un hueco de la banda de valencia, completándose así la recombinación, toda la energía en exceso se cede a la red (interacción entre una partícula y un centro).

2.5.3 Materiales ternarios

Los materiales ternarios son sistemas formados por tres componentes químicos diferentes, que pueden mejorar significativamente la funcionabilidad en comparación con los sistemas binarios. Su capacidad para combinar las propiedades de cada componente permite el diseño de materiales con un rendimiento mejorado en diversas aplicaciones, incluidas la electrónica, la catálisis y la ingeniería estructural (Pérez *et al.* 2016). Los materiales ternarios se pueden clasificar en varias categorías según su composición y estructura.

2.5.3.1 Aleaciones y semiconductores ternarios

Las aleaciones ternarias son aleaciones metálicas que contienen tres elementos, que mejoran las propiedades mecánicas y la resistencia a la corrosión. Algunos elementos son el latón (Cu-Zn-Pb) y las aleaciones de aluminio (Al-Cu-Mg) (Matsumoto *et al.* 2019).

Las aleaciones ternarias semiconductoras, que a menudo se les denomina aleaciones pseudobinarias, se pueden formar cuando combinamos compuestos $A^N C^{8-N}$ y $B^N C^{8-N}$ (anión común) lo que ha dado como resultado aleaciones $A_{x-1}B_xC$ donde x representa la fracción de átomos de B sustitucionales en la subred catiónica (Hernández-Calderón, 2013).

Los semiconductores ternarios, como el fosfuro de arsenio y galio (GaAsP) y el nitruro de indio y galio (InGaN), son fundamentales en las aplicaciones optoelectrónicas debido a sus brechas de banda ajustables (Johnson *et al.*, 2023).

Los materiales ternarios se caracterizan por sus propiedades físicas y químicas distintivas que surgen de sus composiciones únicas;

- Propiedades eléctricas: los semiconductores ternarios, a menudo exhiben una conductividad eléctrica mejorada y una movilidad de portador mejorada, esencial para las varias aplicaciones electrónicas (Johnson *et al.* 2023), esto es fundamental porque permiten una recolección más rápida y eficiente de la carga generada por la luz solar.
- Estabilidad térmica: los óxidos metálicos ternarios suelen mostrar una estabilidad térmica mejorada en comparación con sus contrapartes binarias, lo que los hace adecuados para aplicaciones de alta temperatura (Chen, *et al.* 2021), esto es importante debido a que al estar en ambientes donde las temperaturas sean más elevadas la celda solar pueda tener un rendimiento optimo.
- Propiedades mecánicas: la incorporación de un tercer componente puede mejorar significativamente la tenacidad y la resistencia, lo que da lugar a materiales más resistentes (Garcia, *et al.* 2021), lo que es importante ya que esto puede alargar la vida útil de la celda solar.

Los materiales ternarios encuentran aplicaciones en diversos dominios debido a sus propiedades versátiles:

- Catálisis: los catalizadores ternarios presentan mayores tasas de reacción y selectividad, lo que los hace efectivos para aplicaciones industriales y ambientales (Patel *et al.* 2023).

- Almacenamiento de energía: en la tecnología de baterías, los materiales ternarios mejoran la densidad de energía y la estabilidad del ciclo, lo que representa un avance significativo en las soluciones energéticas (Miller *et al.* 2023).
- Dispositivos optoelectrónicos: los semiconductores ternarios se utilizan ampliamente en los dispositivos LED y celdas solares, debido a sus propiedades ajustables que permiten una conversión eficiente de energía (Johnson *et al.* 2023).

2.5.4 Polímeros

Los polímeros desempeñan un papel crucial en la sociedad moderna debido a sus versátiles propiedades y aplicaciones. Definidos como sustancias con un alto peso molecular, los polímeros pueden ser naturales o sintéticos, y sus propiedades están influenciadas en gran medida por su estructura molecular (Freedman, 2003).

Los polímeros se clasifican generalmente en función de su estructura y síntesis. Los tipos principales incluyen:

- Polímeros de adición: formados a través de la polimerización de monómeros insaturados (p. ej.; polietileno)
- Polímeros de condensación: son polímeros formados mediante reacciones de condensación, en las cuales los monómeros se unen eliminando subproductos pequeños como el agua, metanol y ácido

clorhídrico; ejemplos comunes son el nailon y poliésteres como el PET (O dian, 2004) (Seymour *et al.* 2012)

La disposición de los monómeros puede dar lugar a diferentes tipos de polímeros, como estructuras lineales, ramificadas o reticuladas, lo que afecta significativamente sus propiedades (Bonin, 2013).

Las propiedades de los polímeros son diversas y dependen de su peso molecular, su estructura y la presencia de aditivos. Las propiedades incluyen:

- Propiedades mecánicas: resistencia a la tracción, elasticidad y resistencia al impacto, que determinan su utilidad en diversas aplicaciones (Rohatgi *et al.* 2012), importante que cuenten con estas características para soportar dobleces, estiramientos o impactos.
- Propiedades térmicas: la temperatura de la transición vítrea y la temperatura de fusión influyen en los métodos de procesamiento y las aplicaciones de uso final (Van Krevelen *et al.* 2009), es esencial que los polímeros mantengan su estabilidad térmica. Esto para evitar deformaciones o pérdida de rendimiento.
- Resistencia química: muchos polímeros presentan resistencia a los productos químicos lo que los hace adecuados para entornos hostiles (Miklas *et al.* 2016), importante para evitar degradacion de la celda y asi aumentar su vida útil.

2.5.5 Polímeros conductores

Los polímeros conductores, han despertado un gran interés debido a su potencial para revolucionar diversos campos, incluidos la electrónica, almacenamiento de energía y los sensores. A diferencia de los conductores tradicionales, estos polímeros ofrecen flexibilidad, propiedades de peso ligero y facilidad de procesamiento (Hwang *et al.* 2013).

Los polímeros conductores son típicamente conjugados, donde los enlaces simples y dobles alternados facilitan deslocalización de los electrones π . Los polímeros conductores más comunes incluyen:

- Polianilina (PANI) $[(C_6H_7N)_x]$: conocida por su alta conductividad y facilidad de síntesis (Heeger, 2001), este puede ser aplicado en dispositivos electrónicos, celdas solares, sensores químicos y biosensores, recubrimientos.
- Polipirrol (PPy) $[H(C_4H_2NH)_nH]$: notable por electroactividad y estabilidad en diversos entornos (Yuan *et al.* 2009), este puede ser aplicado en electrodos para supercapacitores, biosensores, celdas solares, películas antimicrobianas.
- Poli(3,4-etilendioxitiofeno) (PEDOT) $(C_6H_6O_2S)$: ampliamente utilizado en aplicaciones electrónicas debido a su excelente conductividad y transparencia (Rao *et al.* 2009), este puede ser aplicado en celdas solares orgánicas, electrodos transparentes, pantallas electrocrómicas.

Las propiedades de estos polímeros se ven significativamente influenciadas por su dopaje, que introduce portadores de carga y mejora la conductividad (Dresselhaus *et al.* 2007).

La conductividad de los polímeros surge de dos mecanismos principales:

- Conductividad intrínseca: resultante de la deslocalización de los electrones π en la estructura principal del polímero (Bredas *et al.* 2010).
- Dopaje: proceso de introducción de impurezas o dopantes que donan o aceptan electrones, creando portadores de carga libres (MacDiarmid, 2001). El dopaje se puede lograr química o electroquímicamente, lo que afecta la conductividad del polímero y el rendimiento general.

Los polímeros conductores tienen diversas aplicaciones en varios dominios:

- Electrónica: se utiliza en diodos orgánicos emisores de luz (OLED), celdas fotovoltaicas orgánicas, pantallas flexibles (Gao *et al.* 2015).
- Almacenamiento de energía: se emplean en supercondensadores y baterías, donde mejoran las capacidades de almacenamiento de carga (Zhang *et al.* 2017).
- Sensores: se utilizan en el desarrollo de sensores químicos y biosensores debido a su capacidad de cambiar la conductividad en respuesta a estímulos ambientales (Khan *et al.* 2016).

2.5.6 Politiofenos

El politiofeno y sus derivados se estudian ampliamente por su estabilidad ambiental, térmica y sus altas propiedades ópticas en comparación con otros polímeros conductores. Los politiofenos se utilizan ampliamente para fabricar dispositivos electrónicos no lineales, módulos fotocromáticos, LED poliméricos, recubrimientos anticorrosivos y se utilizan en dispositivos de almacenamiento de energía. El poli(3-hexiltiofeno) o P3HT es un derivado de los politiofenos y sus aplicaciones se centran en los campos electrónico y optoelectrónico. El P3HT es popular debido a su amplia disponibilidad, bajo costo, morfología conocida y fácil procesabilidad. El P3HT es un polímero semicristalino y su columna vertebral está formada por anillos aislados y cadenas laterales lineales. Esta disposición estructural permite la libertad de muestrear el espacio conformacional (Namsheer *et al.* 2021).

2.5.6.1 Poli(3-hexiltiofeno)

El poli(3-hexiltiofeno) es un polímero conjugado que se caracteriza por su excelente conductividad eléctrica y procesabilidad. Ha recibido una atención considerable debido a su idoneidad para aplicaciones flexibles (Sirringhaus, *et al* 1999).

El P3HT se puede sintetizar mediante diversos métodos, cada uno de los cuales afecta las propiedades del material. Los métodos más comunes para sintetizar P3HT incluyen:

- Acoplamiento de Stille: una técnica ampliamente utilizada que implica la reacción de 3-hexiltiofeno con organoestannos en presencia de un

catalizador de paladio. Este método permite un control preciso sobre el peso molecular y la polidispersidad (Liu, *et al* 2015).

- Polimerización oxidativa: este metodo utiliza agentes oxidantes para facilitar la polimerización, lo que da como resultado P3HT con diversos grados de conductividad (Gao, *et al* 2003).
- Polimerización electroquímica: esta técnica ofrece un enfoque simple para prodicir películas de P3HT con espesor y morfología controlados (Yuan, *et al* 2016).

El P3HT exhibe varias propiedades clave que contribuyen a su utilidad en la electrónica orgánica;

- Propiedades ópticas: el P3HT tiene una fuerte absorción en el rango visible, con un máximo alrededor de los 500 nm, lo que es crucial para las aplicaciones fotovoltaicas (Li, *et al* 2013). La banda prohibida óptica del polimero es de aproximadamente 1.9 eV, lo que permite una eficiente captación de luz.
- Propiedades eléctricas: el P3HT muestra una alta movilidad de portadores de carga, con valores reportados en el rango de 0.1 a 1 $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, dependiendo de la morfología de la película y las condiciones de procesamiento (Huang, *et al* 2020). Su naturaleza cristalina mejora el transporte de carga, lo que lo hace adecuado para diversas aplicaciones electrónicas.

2.7 Electroquímica

En una de las obras clave de la electroquímica moderna, Bockris y Reddy en 1980 dividen esta disciplina en dos partes: electroquímica iónica y electroquímica electródica. La electroquímica iónica es aquella parte de la electroquímica que trata del transporte de las especies cargadas en el seno de las disoluciones de electrolitos, y la electroquímica electródica es la que trata de las transformaciones químicas que sufren las sustancias como consecuencia del intercambio de cargas, electrones, a través de las interfaces *electrodo/disolución*. La electroquímica electródica es, sin ninguna duda, la parte o el aspecto más importante de la electroquímica, y a ella pertenecen tanto la química electroanalítica como el electroanálisis o el análisis instrumental electroquímica en un sentido más restringido (Pingarrón *et al.*).

Las reacciones electroquímicas son las responsables de las transformaciones químicas que sufren las sustancias cuando se las somete al proceso denominado “electrólisis”, como consecuencia del paso de corriente eléctrica a través de los electrodos, los conductores, y los instrumentos, y del transporte de especies cargadas o no entre los electrodos a través de las disoluciones electrolíticas en las que están sumergidas (Pingarrón *et al.*...).

Los sistemas electroquímicos, se ocupan de los procesos y factores que afectan el transporte de carga a través de la interfase entre las fases químicas, por ejemplo, entre un conductor electrónico (un electrodo) y un conductor iónico (un electrolito). La carga es transportada a través del electrodo por el movimiento de electrones (y huecos). Los materiales de electrodos típicos

incluyen materiales sólidos (p. ej., Pt, Au) metales líquidos (Hg, amalgamas), carbono (grafito) y semiconductores (óxido de indio y estaño, Si). En la fase electrolítica, la carga es transportada por el movimiento de iones. Los electrolitos que se usan con más frecuencia son soluciones líquidas que contienen especies iónicas como, H^+ , Na^+ , Cl^- , ya sea en agua o en un solvente no acuoso (Bard *et al.* 2001).

En general, se puede medir una diferencia de potencial eléctrico entre los electrodos de una celda electroquímica. Por lo general, esto se hace con un medio en voltios (V), donde $1V=1 \text{ Joule/Coulomb (J/C)}$, es una medida de la energía disponible para impulsar la carga externamente de los electrodos. Es una manifestación de las diferencias acumuladas en el potencial eléctrico entre todas las diversas fases de la celda (Bard *et al.* 2001).

La reacción química general que tiene lugar en una celda que se compone de dos semirreacciones independientes, que describen los cambios químicos reales en los dos electrodos. Cada media reacción (y, en consecuencia, la composición química del sistema cerca de los electrodos) responde a la diferencia de potencial interfacial en el electrodo correspondiente. La mayoría de las veces, uno está interesado en solo una de estas reacciones, y el electrodo en el que ocurre se llama electrodo de trabajo (o indicador). Para centrarse en esto, se estandariza la otra mitad de la celda mediante el uso de un electrodo (llamado electrodo de referencia) formado por fases que tienen una composición esencialmente constante (Bard *et al.* 2001).

Dos tipos de procesos ocurren en los electrodos. Un tipo es en el cual se transfieren cargas (electrones) a través de la interfase metal-solución. La transferencia de electrones hace que se produzca oxidación y reducción. Dado que tales reacciones se rigen por la ley de Faraday (es decir, la cantidad de reacción química causada por el flujo de corriente es proporcional a la cantidad de electricidad que pasa), se denominan faradaicos. Los electrodos en los que ocurren los procesos faradaicos a veces se denominan electrodos de transferencia de carga. Bajo algunas condiciones, una interfaz electrodo-solución dada mostrará un rango de potenciales donde no ocurren reacciones de transferencias de carga porque tales reacciones son termodinámicas o cinemáticamente desfavorables. Sin embargo, pueden ocurrir procesos como la adsorción y la desorción, y la estructura de la interfase electrodo-solución puede cambiar al cambiar el potencial o la composición de la solución. Estos procesos se denominan procesos no faradaicos (Bard *et al.* 2001).

La deposición electroquímica es un método clave para la síntesis de compuestos ternarios. Este proceso implica la reducción de iones metálicos en solución sobre un sustrato, donde la composición de la capa depositada se puede controlar de manera cuidadosa ajustando los parámetros electroquímicos, como la densidad de corriente, el potencial y la composición del electrolito (Chen *et al.* 2020).

La elección de materiales del electrolito y del electrodo tienen un papel muy importante en el éxito de la síntesis electroquímica. Los electrolitos proporcionan los iones necesarios para la reacción, mientras que los electrodos

actúan como sitios para la transferencia de electrones. La interacción entre la superficie del electrodo y los iones depositados es fundamental para lograr la composición ternaria deseada (Chang *et al.* 2017)

2.8 Técnicas basadas en una excitación de salto de potencial

Las técnicas basadas en la salida de salto potencial son herramientas fundamentales en la investigación electroquímica y ofrecen información valiosa sobre el comportamiento dinámico de los sistemas electroquímicos (Bard *et al.* 2001). Estas técnicas implican aplicar cambios repentinos de potencial a la celda electroquímica y observar la respuesta resultante, generalmente en términos de variaciones de corriente o potencial.

2.8.1 Voltamperometría Cíclica

La voltamperometría cíclica (CV) es una poderosa técnica electroquímica ampliamente utilizada en diversos campos como la química, la bioquímica, la ciencia de los materiales y la ciencia ambiental. Proporciona información valiosa sobre las propiedades redox de los compuestos químicos, lo que permite a los investigadores estudiar su comportamiento de oxidación-reducción y su cinética de transferencia de electrones (Bard *et al.* 2001) (Zoski *et al.* 2000). La voltamperometría cíclica desempeña un papel crucial en la comprensión del comportamiento electroquímico de especies orgánicas e inorgánicas, facilitando el desarrollo de nuevos materiales, métodos electroanalíticos y sensores electroquímicos (Kissinger *et al.* 1983). Al analizar los voltamogramas obtenidos de los experimentos de CV, los investigadores pueden determinar parámetros electroquímicos importantes, como los potenciales redox, los coeficientes de

difusión y los mecanismos de reacción (Compton *et al.* 2010). La voltamperometría cíclica implica barrer linealmente el potencial aplicado a una celda electroquímica con el tiempo mientras se mide la respuesta de corriente resultante (Elgrishi *et al.* 2018). El voltamograma obtenido normalmente consta de distintos picos correspondientes a procesos de oxidación y reducción. La forma y posición de estos picos proporcionan información sobre la naturaleza de las reacciones electroquímicas que ocurren en la superficie del electrodo (Heineman *et al.* 1996). En la ciencia de los materiales, la voltamperometría cíclica sirve como una herramienta valiosa para caracterizar las propiedades electroquímicas de materiales como electrodos, catalizadores y dispositivos de almacenamiento de energía (Conway, 1998).

En las celdas solares híbridas, la capa activa normalmente consta de una combinación de moléculas orgánicas, como polímeros o moléculas pequeñas, y semiconductores inorgánicos, como óxidos metálicos (Jiang *et al.* 2018).

Las interfaces entre los materiales orgánicos e inorgánicos desempeñan un papel clave en el rendimiento de las celdas solares híbridas. La voltamperometría cíclica se utiliza para estudiar los procesos de transferencia de carga en estas interfases, lo que proporciona información sobre la cinética de la inyección de electrones desde el material orgánico al semiconductor inorgánico y a la recombinación de cargas. Al comprender estos procesos, los investigadores pueden diseñar mejores capas de interfaz para minimizar la recombinación de carga y mejorar la eficiencia general de las celdas solares híbridas (Li *et al.* 2020).

2.8.2 Cronoamperometría

La cronoamperometría es una técnica ampliamente utilizada en la que se aplica un cambio gradual de potencial al electrodo de trabajo y la respuesta de corriente resultante se registra en función del tiempo (Heineman *et al.* 1996). Esta técnica permite el estudio de la cinética de los electrodos, los fenómenos de transporte de masa y el comportamiento de especies electroactivas en la superficie del electrodo. Tiene aplicaciones en campos como la electrocatálisis, el desarrollo de sensores y estudios de corrosión.

La eficiencia de la cronoamperometría en la síntesis de compuestos ternarios depende de varios parámetros clave, entre ellos el potencial aplicado, la duración del experimento, y la concentración de los iones en el electrolito. Estos parámetros deben optimizarse para garantizar que la reducción de los tres elementos se produzca simultáneamente y en las proporciones correctas (Santos *et al.* 2018).

Durante la cronoamperometría, el potencial aplicado determina la reducción de los iones metálicos específicos presentes en el electrolito. El mecanismo de deposición puede ser controlado por difusión o influenciado por procesos de nucleación. En el caso de los compuestos ternarios, el desafío radica en equilibrar las tasas de deposición de tres elementos diferentes, cada uno con su propio potencial de reducción estándar (Li *et al.* 2019).

Los procesos de nucleación en la cronoamperometría son fundamentales para determinar la morfología y la composición de fases de los compuestos ternarios que se sintetizan. La nucleación comienza típicamente en sitios

específicos en la superficie del electrodo, seguida de un crecimiento a medida que las especies depositadas se extienden y se fusionan formando una película. En los sistemas ternarios la nucleación se complica por la deposición simultánea de tres elementos diferentes, lo que requiere un control preciso de los parámetros electroquímicos para evitar la separación de fases o la segregación de elementos (Schlesinger, *et al.* 2010).

La deposición simultánea de múltiples elementos durante la cronoamperometría es un desafío debido a los diferentes comportamientos electroquímicos de cada especie iónica. El potencial aplicado debe elegirse cuidadosamente para que los tres elementos se reduzcan simultáneamente para formar un compuesto ternario homogéneo. La cronoamperometría, con su aplicación de potencial constante, proporciona un medio para lograr esto al estabilizar las tasas de deposición y permitir la nucleación y el crecimiento uniformes de todos los componentes (Li, *et al* 2019).

Una de las principales ventajas de la cronoamperometría en la síntesis de compuestos ternarios es la capacidad de controlar la estequiometría. Al ajustar el potencial aplicado y la concentración de cada elemento en el electrolito, es posible ajustar con precisión la proporción de elementos en el producto final. Esto es esencial para optimizar las propiedades del material, ya que las desviaciones de la estequiometría deseada pueden provocar defectos, separación de fases, o un rendimiento comprometido en las aplicaciones (Rao, *et al* 2020).

Los semiconductores ternarios, incluido el selenurio de cobre-indio-galio (CIGS), son fundamentales para las celdas solares de película delgada y otros dispositivos optoelectrónicos. La cronoamperometría ofrece un método escalable y rentable para producir estos materiales con un control preciso sobre su composición y propiedades electrónicas (Gür, *et al* 2019).

2.9 Técnicas de caracterización

2.9.1 Espectroscopía UV-Vis

La espectroscopía UV-Vis es una potente técnica analítica que se utiliza para estudiar la absorción de luz ultravioleta y visible por las moléculas (Skoog *et al* 2017). Esta técnica proporciona información valiosa sobre la estructura electrónica, la concentración y el entorno químico de los analitos, lo que la hace ampliamente aplicable en diversos campos, incluidos la química, la bioquímica, los productos farmacéuticos y las ciencias ambientales. La espectroscopia UV-Vis funciona según el principio de que las moléculas absorben luz en las regiones ultravioleta y visible del espectro electromagnético cuando se excitan sus niveles de energía electrónica (Haiss *et al* 2007). La absorción de luz provoca transiciones electrónicas entre diferentes estados energéticos, lo que da lugar a espectros de absorción característicos. Al medir la absorbancia de la luz en diferentes longitudes de onda, los investigadores pueden identificar analitos y cuantificar su concentración.

La cual se empleará para analizar la absorción de luz y estimar el ancho de banda prohibido, información clave para determinar la eficiencia de conversión.

2.9.2 Fotoluminiscencia (PL)

La espectroscopia de fotoluminiscencia es un método de no-contacto, no destructivo que permite sondear la estructura electrónica de los materiales, en esencia, la luz se dirige a una muestra, donde se absorbe y puede ocurrir un proceso de llamado foto-excitación. La foto-excitación hace que los átomos del material pasen de un estado electrónico superior, y entonces liberar energía, (fotones), al relajarse, vuelve a retroceder a un nivel de energía más bajo (S&S Ingeniería, 2020). La absorción de radiación electromagnética, cuando esta luz es absorbida por un semiconductor se crea un excitón: pareja electrón-hueco. Al cabo de un tiempo, dicho excitón se desintegrará (el electrón y hueco generados se recombinan), así liberando un nuevo fotón con una energía muy próxima al E_g (Universidad Computense Madrid)

La cual será empleada para el estudio de los mecanismos de recombinación de portadores y evaluar la calidad cristalina del material activo,

2.9.3 Microscopía electrónica de barrido (SEM)

La microscopía electrónica se fundamenta en la emisión de un barrido de haz de electrones sobre la muestra, los cuales interaccionan con la misma produciendo diferentes tipos de señales recogidas por detectores. Finalmente, la información obtenida en los detectores es transformada para dar lugar a una imagen de alta definición, con una resolución entre 0.4 a 20 nanómetros (Atria Innovation, 2020). Con ella podemos estudiar distintos tipos de materiales, tales como:

- Metales

- Cerámicos
- Polímeros
- Composites
- Orgánicos

Esta técnica nos permitirá examinar la morfología superficial, la homogeneidad y el espesor de las diferentes capas.

2.9.4 Difracción de rayos X (XRD)

El análisis de difracción de rayos X (XRD) es una técnica utilizada en la ciencia de materiales para determinar la estructura cristalográfica de un material. Este análisis funciona irradiando un material con rayos X incidentes y luego midiendo las intensidades y los ángulos de dispersión de los rayos X que abandonan el material. Un uso principal del análisis por rayos X es la identificación de materiales en función de su patrón de difracción. Además de la identificación de fases, los rayos X también proporcionan información sobre cómo la estructura real se desvía de la ideal debido a sus transiciones internas y defectos. Los átomos del cristal dispersan los rayos X incidentes, principalmente a través de la interacción con los electrones de los átomos. Este fenómeno se conoce como dispersión elástica; el electrón se conoce como dispersor. Una serie regular de dispersores produce una serie regular de ondas esféricas, en la mayoría de las direcciones estas se anulan entre si mediante interferencias destructivas, sin embargo, se suman constructivamente en algunas direcciones específicas como lo determina la ley de Bragg:

$$2d\sin\theta = n\lambda \quad (3)$$

Donde d es el espacio de los planos difractados, θ es el ángulo de incidencia, n es un numero entero y λ es la longitud de onda del haz (TWI Global, 2022).

La difracción de rayos X nos proporcionará sobre la estructura cristalina, fases presentes y grado de cristalinidad de las capas activas e interfaciales.

2.9.5 Espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR)

La espectroscopia infrarroja por transformada de fourier, o espectroscopia FTIR, es una técnica analítica utilizada para identificar materiales orgánicos, poliméricos y, en algunos casos, inorgánicos. El equipo de FTIR envía radiación infrarroja de aproximadamente 10000 a 100 cm^{-1} a través de una muestra, parte la cual se absorbe y otra parte pasa a través de ella. La radiación absorbida se convierte en energía rotacional y/o vibratoria mediante las moléculas de la muestra (RTI Laboratories). FTIR también es útil para la identificación de contaminantes y agentes químicos en contacto con piezas falladas, y enlaces químicos y secuencias resultantes de la degradación, como el calor, el agua, el oxígeno, etc. las aplicaciones de FTIR en investigaciones de análisis incluyen (ISASA Latam):

- Identificación de materiales
- Evaluación cualitativa de polímeros, copolímeros y mezclas
- Identificación y verificación de los ingredientes de la formulación de resinas
- Identificación de contaminantes en un material
- Determinación y cuantificación de degradación molecular

Será de utilidad, para identificar enlaces químicos y grupos funcionales, siendo especialmente útil en el estudio de materiales orgánicos o híbridos.

CAPÍTULO 3

3.1 Síntesis y deposición del material $Fe_xZn_{1-x}S$

La obtención de películas delgadas de $Fe_xZn_{1-x}S$ se llevó a cabo mediante un método electroquímico y un sistema de 3 electrodos, donde el electrodo de trabajo fue vidrio ITO, como contraelectrodo un alambre de platino y como electrodo de referencia Ag/AgCl. La técnica que se utilizó fue:

- Cronoamperometría: se utilizó como método de obtención de películas delgadas aplicando un potencial constante en el electrodo de trabajo produciendo la reacción redox y monitoreando la corriente resultante en función del tiempo. Además, se permite estudiar la cinética de deposición de las películas de $Fe_xZn_{1-x}S$.

3.2.1 Lavado de sustratos:

En los sustratos de ITO con resistencia de 20 Ω y dimensiones 2.5 x 2.5 cm, se realizó un decapado con espesor de 2 mm, con el fin de evitar cortocircuito. En una mezcla de HCl 6N y Zn se colocaron los sustratos durante 40 s y se enjuagó con agua desionizada para eliminar el ácido. Una vez enjuagados se colocaron los sustratos de forma secuencial en una disolución de detergente al 1%, acetona, agua destilada e isopropanol y en cada caso, se

llevó a un baño de ultrasonido por 15 min cada uno. Los sustratos se secaron al aire al finalizar la secuencia de lavado con solventes.

3.2.2 Síntesis del $Fe_xZn_{1-x}S$:

El baño electroquímico se preparó con 10 mL de $FeSO_4 \cdot 7H_2O$ (99.0%, J.T. Baker) 30 mM (99.0%, J.T. Baker), 10 mL de $ZnSO_4 \cdot 7H_2O$ 30 mM (99.3%, IMPEX Continental) y 20 mL de tiourea 30 mM (99.0%, CTR Scientific) y se aforaron a 100 mL con agua desionizada. El pH se ajustó a 2.5 con H_2SO_4 (98%, DEQ). La reacción se realizó a temperatura ambiente, durante un intervalo de tiempo de 600 s, variando el potencial de deposición y la relación molar de Fe:Zn como se observa en el diseño de experimentos (DOE) mostrado en la Tabla 1. La síntesis se llevó a cabo en un Potenciostato/Galvanostato AUTOLAB.

Tabla 1 DOE para la obtención de películas de $Fe_xZn_{1-x}S$ vía electroquímica

Potencial de Deposición (V)	Relación molar de Fe:Zn
-1.2	3:1
-1.5	2:1
-1.7	1:1

Para cada condición dada, se realizó el experimento por triplicado.

3.3 Síntesis del P3HT

El P3HT se preparó mediante acoplamiento oxidativo de 3-hexiltiofeno (99%, Aldrich) (monómero) en presencia de $FeCl_3$ (97%, SigmaAldrich). La relación de monómero y $FeCl_3$ se mantendrá en 1:4 en todos los casos. Como

procedimiento general, un matraz de reacción que contiene FeCl_3 anhidro suspendido en cloroformo (99.5%, CTR Scientific) (CHCl_3) se mantuvo en una atmósfera de nitrógeno. La concentración inicial de monómero en cloroformo se mantendrá en 0.05 M en general. Se añadió lentamente la solución de 3-hexiltiofeno en la suspensión de FeCl_3 con la ayuda de una jeringa. Las polimerizaciones se llevaron a cabo a temperatura ambiente durante 24 h en atmósfera de nitrógeno. La mezcla de reacción resultante se vertió en metanol para la precipitación del polímero. Posteriormente, se lavó los precipitados con metanol y el polímero se recogió después de la evaporación del disolvente a temperatura ambiente (Ansari *et al* 2018).

3.4 Celdas solares:

3.4.1 Deposición por *Spin-coating* de la película P3HT

El sustrato previamente lavado se colocó en el equipo especializado para la técnica de *Spin-coating*, el polímero P3HT se disolvió en CHCl_3 con una concentración de 0.5 mg/ml y se aplicó sobre el sustrato por goteo, se depositaron 40 gotas a 2500 rpm, se realizaron 4 capas en estas condiciones.

3.4.2 Deposición de la capa transportadora de huecos (PEDOT:PSS) por *spin-coating*

El PEDOT:PSS dispersado en agua al 1.3% P/V, que actúa como la capa transportadora de huecos, se depositó sobre el sustrato utilizando la técnica de *spin-coating* a 2000 rpm durante 30 s, esto se realizó tres veces bajo las mismas condiciones, para después dejar secar al aire el solvente.

3.4.3 Deposición de electrodo de Au

Para la deposición del electrodo de oro, se usó la técnica de *Sputtering* la cual nos ayudó a que la aplicación del baño de nanopartículas de oro (Au) sea homogéneo sobre el sustrato, dicha deposición se llevo a cabo durante 60 s a 60 mA.

3.4.4 Diseño de experimentos de celdas

El diseño de las celdas solares se puede observar en la Tabla 2, en dichas configuraciones, el espesor de las películas debe de ser el mismo, con este diseño se busca obtener una alta eficiencia de conversión.

Tabla 2 DOE para la deposición de PEDOT:PSS como HTL

Variable	Composiciones del $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$	Capa transportadora de huecos (HTL)
Alto	Alto contenido de Fe	Sí
Bajo	Bajo contenido de Fe	No

3.5 Técnicas de caracterización

Las técnicas de caracterización empleadas fueron las siguientes:

- Espectroscopia UV-Vis: esta técnica fue utilizada para obtener un espectro de absorción, así como la longitud de absorción máxima de absorción del material sintetizado. El equipo empleado fue un espectrofotómetro Shimadzu UV-1800 (Laboratorio de materiales I, FCQ, UANL)

- Espectroscopia de fotoluminiscencia (PL): se empleó para obtener el espectro de emisión y así determinar el valor del E_g del material sintetizado. Se empleo el equipo de fluorescencia Perkin Elmer LSS55 (Laboratorio de Materiales I, FCQ, UANL).
- Difracción de rayos X (XRD): se empleó para determinar los átomos presentes, la estructura cristalina y planos presentes en el material sintetizado. Se utilizo un difractómetro de rayos X PANalytical X'Pert Pro (Laboratorio de Estudios Profesionales, FCQ, UANL) con una radiación CuK α ($\lambda=1.54059 \text{ \AA}$) en un barrido de 5° a 90° para dicho análisis.
- Microscopia electrónica de barrido (SEM): se empleó para obtener imágenes de alta resolución, información morfológica y composición química del material sintetizado. Dicho análisis se llevó a cabo en un microscopio electrónico de barrido de emisión, JEOL JSM6701F (Laboratorio de Microscopia, FCQ, UANL)

CAPÍTULO 4

A continuación, se presentan los resultados obtenidos en las síntesis del material ternario, así como en la síntesis del polímero conductor:

El compuesto ternario $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ fue sintetizado vía electroquímica, dichas síntesis se llevaron a cabo bajo diferentes condiciones (Tabla 1, pág. 61), variando la concentración de Fe en el baño electroquímico y el potencial de deposición, esto para obtener un compuesto ternario con mayor cantidad de Fe.

4.1 Caracterización del ternario $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$:

4.1.1 Cronoamperometría:

El cronoamperograma de las síntesis de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ aplicando un potencial fijo de -1.7 V, -1.5 V y -1.2 V a 600 s se muestra en la Figura 4, apreciándose tres curvas, una en color negro correspondiente a la síntesis del material ternario a -1.7 V con una relación de concentración 1:1 de Fe:Zn; una en color rojo correspondiente a la síntesis del material ternario a -1.5 V con una relación de concentración 2:1 de Fe:Zn; y una en color azul correspondiente a la síntesis del material ternario a -1.7 V con una relación de concentración 3:1 de Fe:Zn. Esta técnica es la pauta para el crecimiento de las películas sobre el sustrato de

ITO. Se pueden distinguir 3 procesos en este método, el primero es la descarga de la doble capa eléctrica el cual se aprecia al inicio de la gráfica como un aumento significativo en el valor de voltaje en poco tiempo, seguido del aumento de corriente donde inicia el proceso de nucleación del material sobre la superficie del electrodo de trabajo, esto se puede apreciar en los primeros 50 segundos, que es donde la curva alcanza un punto máximo y finalmente la densidad de corriente se mantiene sin cambios indicando el crecimiento de la película sobre el sustrato, esto se puede observar desde los 50 segundos hasta los 600 segundos que es donde se detiene la deposición sobre el sustrato. Se puede observar que las gráficas comparten un comportamiento similar, estas al iniciar la síntesis denotan un aumento en la densidad de corriente hasta llegar a un punto máximo donde se comienza a dar el proceso de nucleación y así generar la película sobre el sustrato.

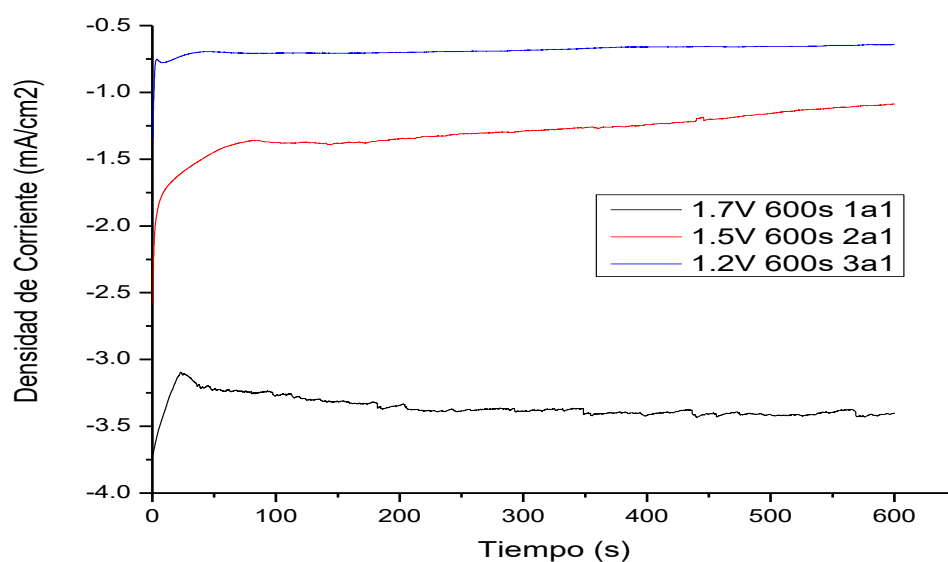


Figura 4 Cronoamperograma del sistema $Fe_xZn_{1-x}S$ electrodepositado en ITO a un tiempo de deposición de 600 s a potenciales de deposición de -1.7 V, -1.5 V, -1.2 V con concentraciones de 1:1, 2:1, 3:1 de Fe:Zn.

4.1.2 Caracterización composicional:

A continuación, en la Figura 5, se puede observar las películas sintetizadas vía electroquímica, las cuales poseen un área de 1 cm^2 , aproximadamente. Se puede apreciar que las tres películas tienen una deposición uniforme sobre el sustrato y que al incrementar la concentración de Fe en la celda de deposición el color del material sintetizado se torna más oscuro conforme la concentración de Fe aumenta. En algunos casos se puede apreciar una ligera coloración amarilla, eso debido al exceso de hierro, lo cual fue mucho mas evidente en la Figura 5c.

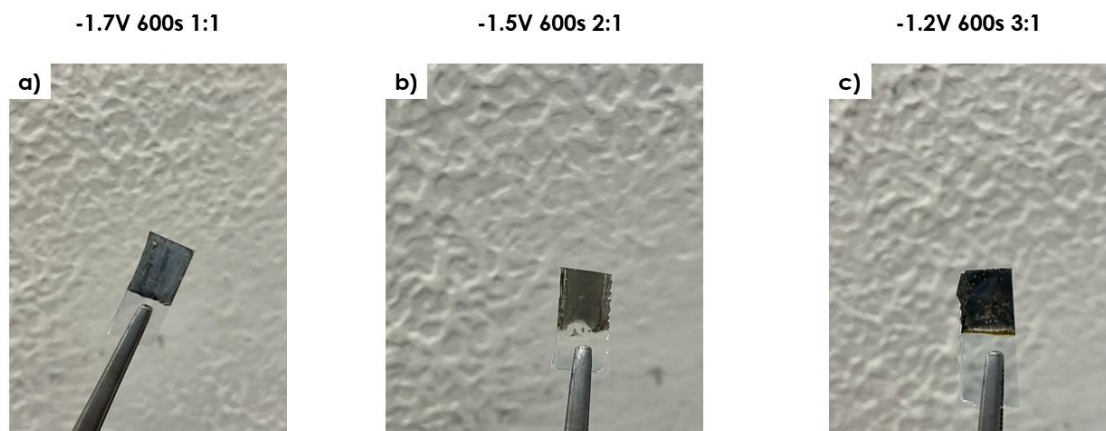


Figura 5 Películas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente donde a) -1.7 V , 600 s a una concentración $1:1$ de $\text{Fe}:\text{Zn}$ b) -1.5 V , 600 s a una concentración de $2:1$ de $\text{Fe}:\text{Zn}$ c) -1.2 V , 600 s a una concentración $3:1$ de $\text{Fe}:\text{Zn}$

4.1.3 Difracción de Rayos X:

Se llevó a cabo el análisis de XRD con el fin de analizar las propiedades estructurales del ternario sintetizado, el análisis se llevó a cabo en un rango de 5° a 90° en 2θ , los patrones obtenidos fueron comparados con el FeS hexagonal, la pirita (FeS_2) y la Wurzita (ZnS).

El patrón referente a la muestra sintetizada a -1.7 V a 600 s con una concentración 1:1 Fe:Zn, mostrada en la Figura 7, presenta señales características de dos compuestos, hay señales referentes a ZnS en fase Wurzita en $2\theta = 30.29^\circ$ (1 0 1), 50.84° (1 0 3) y 63.01° (2 0 2), las señales restantes pertenecen al FeS en su fase hexagonal, encontrándose en $2\theta = 22.15^\circ$ (1 1 1) y 35.02° (2 1 0); la presencia de estas señales nos indica, que el compuesto sintetizado consta en su mayoría de un compuesto rico Zn.

En la muestra sintetizada a -1.5 V a 600 s con una concentración 2:1 Fe:Zn mostrada en la Figura 8, la cual presenta señales características de pirita (FeS_2) en $2\theta = 33.7^\circ$ (2 0 0) y 37.11° (2 1 0), sulfuro de hierro (FeS) en $2\theta = 22.15^\circ$ (1 1 1), 35.02° (2 1 0) y 44.44° (2 2 0); y Wurzita (ZnS) en $2\theta = 30.29^\circ$ (1 0 1), 50.84° (1 0 3) y 63.01° (2 0 2); encontrar estas señales presentes es indicativo de que se tienen 3 compuestos metálicos en su mayoría compuestos de hierro.

En la muestra sintetizada a -1.2 V a 600 s con una concentración de 3:1 Fe:Zn, mostrada en la Figura 9, en la cual podemos observar señales características de pirita (FeS_2) en $2\theta = 37.11^\circ$ (2 1 0), de sulfuro de hierro (FeS) en $2\theta = 22.15^\circ$ (1 1 1), 35.02° (2 1 0) y 44.44° (2 2 0); y de la Wurzita (ZnS) en $2\theta = 30.29^\circ$ (1 0 1), 50.84° (1 0 3) y 63.01° (2 0 2); el que se presenten estas señales nos dice que existen compuestos de hierro en su mayoría.

Tras analizar los resultados de XRD se puede observar que el comportamiento en la síntesis no es el esperado, ya que, al aumentar la cantidad de Fe en el baño químico, se esperaba que se obtuviera un compuesto

rico en Fe, lo que solo sucedió en una de las tres condiciones empleadas en el proyecto; esto pudiera deberse al potencial de deposición utilizado. La condición con mayor cantidad de Fe fue la sintetizada a -1.5 V con una concentración 2:1 de Fe:Zn durante un tiempo de 600 s.

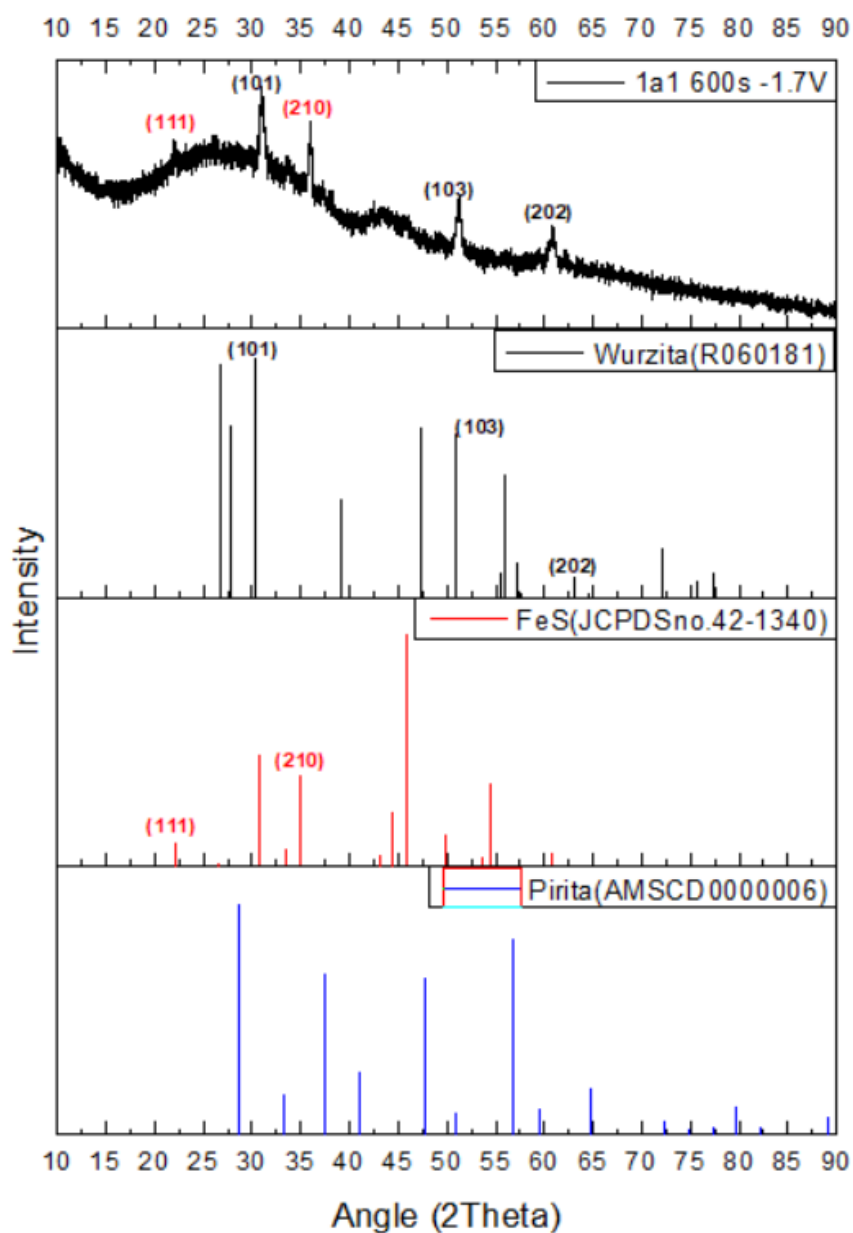


Figura 6 Patrón de difracción de rayos X de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente a -1.7 V, 600 s a una concentración 1:1 de Fe:Zn

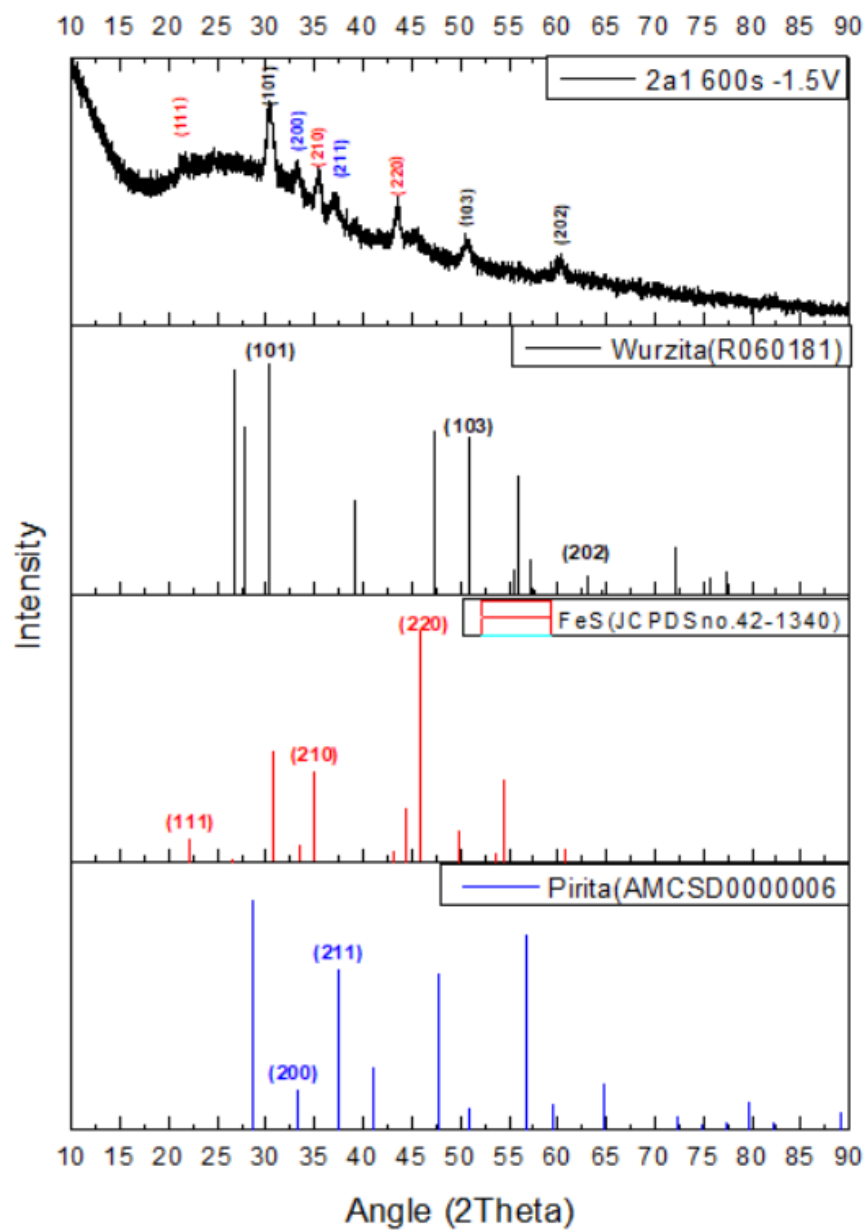


Figura 7 Patrón de difracción de rayos X $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente a -1.5 V, 600 s a una concentración de 2:1 de Fe:Zn

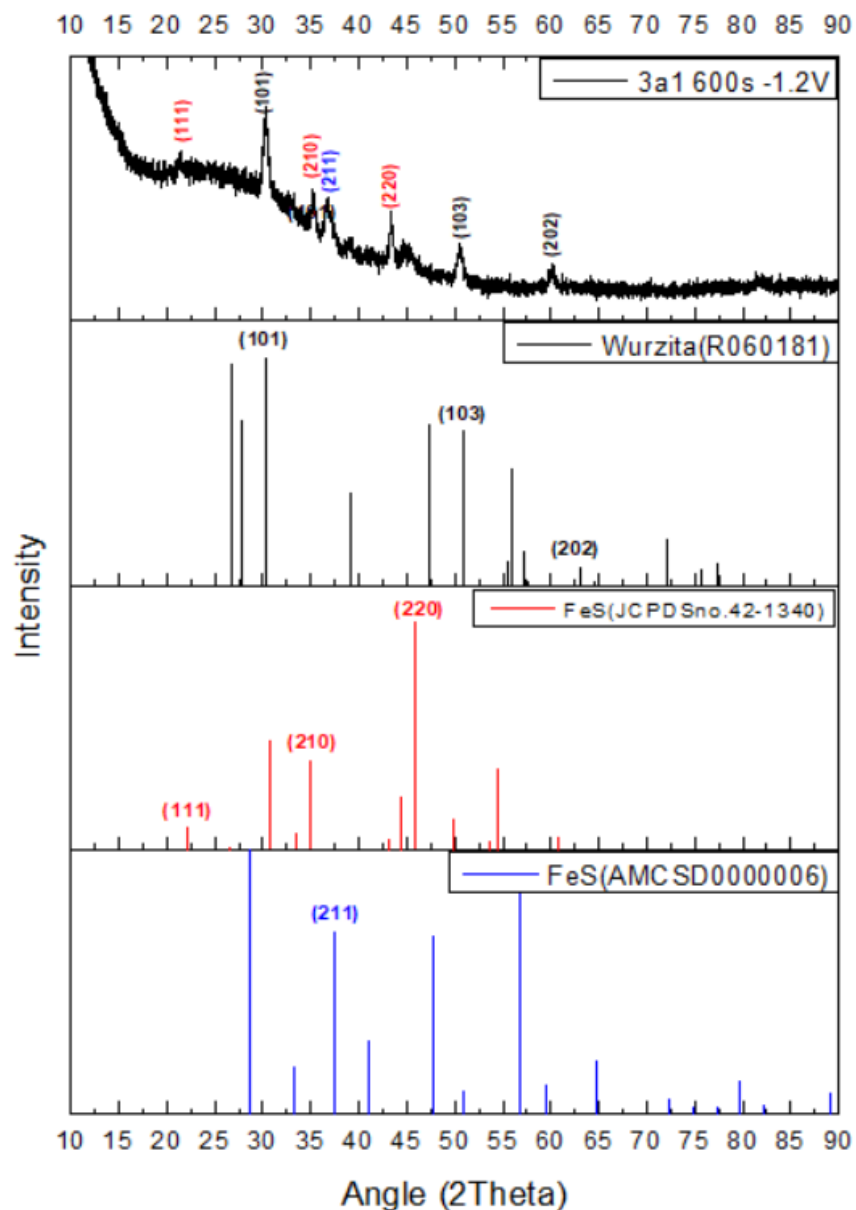


Figura 8 Patrón de difracción de rayos X $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente a -1.2 V, 600 s a una concentración 3:1 de Fe:Zn

4.1.4 Caracterización morfológica

Las imágenes de SEM (Figura 9-12) fueron obtenidas para el estudio de la morfología superficial de las películas delgadas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas. La Figura 9 muestra las imágenes obtenidas a diferentes aumentos de la muestra depositada a -1.7 V por 600 s con una relación 1:1 de Fe:Zn, la Figura 9a

muestra que las películas son de naturaleza no porosa y presentan morfología irregular, además de que se pueden observar estructuras laminares en forma de red entretejida, esto atribuido a la alta cantidad de Zn que se encuentra en la muestra, lo cual también es confirmado por el espectro de XRD (Figura ##) y puede ser atribuido a la fase del ZnS en su forma de Wurzita.

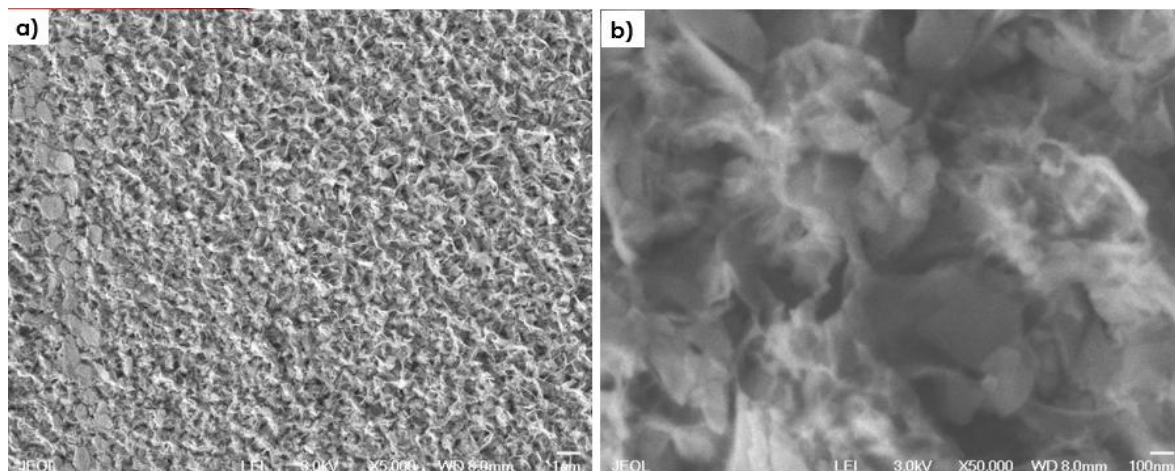


Figura 9 Imágenes de SEM de las películas de $Fe_xZn_{1-x}S$ depositadas electroquímicamente a -1.7 V, 600 s a una concentración 1:1 de Fe:Zn

Las imágenes obtenidas a diferentes aumentos de las muestras depositadas a -1.5 V y 600 s con una relación 2:1 de Fe:Zn se muestran en la Figura 10, donde el ternario $Fe_xZn_{1-x}S$ se deposita regularmente en todo el sustrato, a comparación de la Figura 9, podemos observar de mejor manera las nanopartículas depositadas sobre el sustrato de ITO, esto debido a que la cantidad de Zn en la muestra es menor, esto es confirmado con el análisis de XRD mostrado en la Figura 7 donde se observa mayores señales de compuestos de Fe. En las Figuras 10a y 10b se pueden apreciar que la película es de naturaleza no porosa, además de que podemos observar que existen

aglomerados de nanopartículas de tamaños variados que van desde los 28 nm hasta los 150 nm.

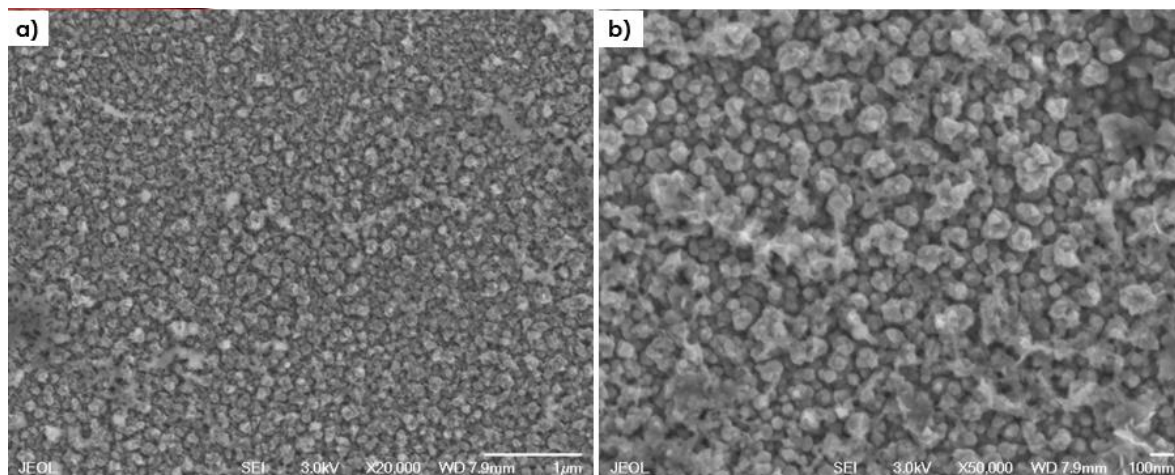


Figura 10 Imágenes de SEM de las películas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente a -1.5 V, 600 s a una concentración de 2:1 de Fe:Zn

Las imágenes obtenidas a diferentes aumentos de las muestras depositadas a -1.2 V y 600 s con una relación 3:1 de Fe:Zn se muestran en la Figura 11, la cual presenta una deposición uniforme de la película sobre el sustrato, a diferencia de las muestras anteriores podemos observar aglomerados de nanopartículas, pero estos no son tan apreciables debido a las estructuras laminares en forma de red entretejida, esto atribuido a la alta cantidad de Zn en la muestra dichos cúmulos tienen un tamaño que va desde 24 nm hasta los 45 nm.

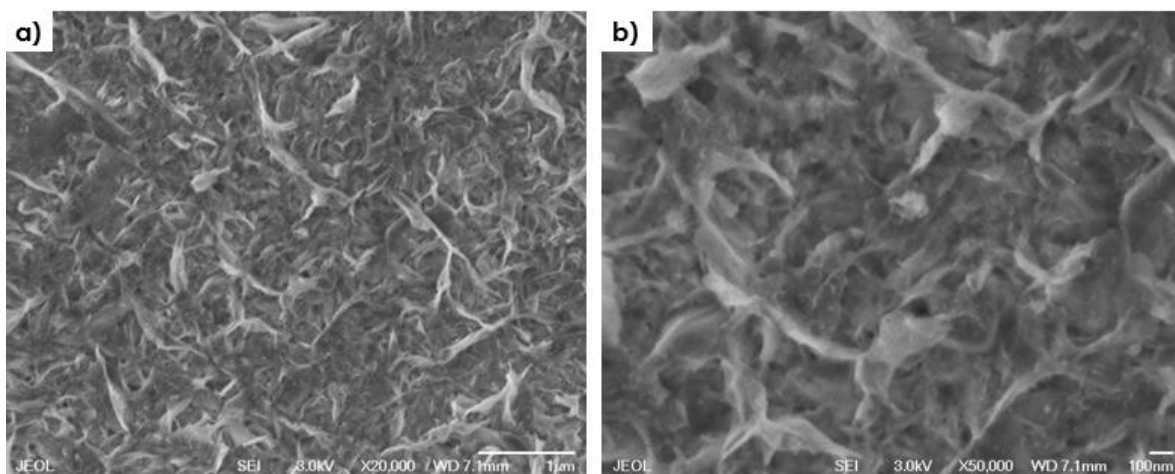


Figura 11 Imágenes de SEM de películas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente a -1.2 V , 600 s a una concentración 3:1 de Fe:Zn

Para estas tres condiciones de síntesis, se llevaron a cabo mediciones de espesor con ayuda del SEM; las imágenes las podemos ver en la Figura 12. En la Figura 12a se observa el espesor de la muestra sintetizada a -1.7 V por 600 s con una relación de 1:1 de Fe:Zn donde el espesor varió de 450 nm a 550 nm ; en la Figura 12b se observa el espesor de la muestra sintetizada a -1.5 V por 600 s con una relación 2:1 de Fe:Zn donde el espesor varió entre 450 nm a 600 nm ; en la Figura 12c se observa el espesor de la muestra sintetizada a -1.2 V a 600 s con una relación 3:1 de Fe:Zn donde el espesor varió de 290 nm a 330 nm . Con lo anterior se observa que la película sintetizada a -1.2 V por 600 s con una relación 3:1 de Fe:Zn tuvo un espesor mucho menor en comparación con los otros experimentos, aunque revisando los resultados de XRD se observa la presencia de las mismas fases cristalográficas. Podemos atribuir la variación en el espesor al voltaje utilizado para la síntesis del material, ya que al usar un menor voltaje hay menos energía para activar la reacción de los materiales.

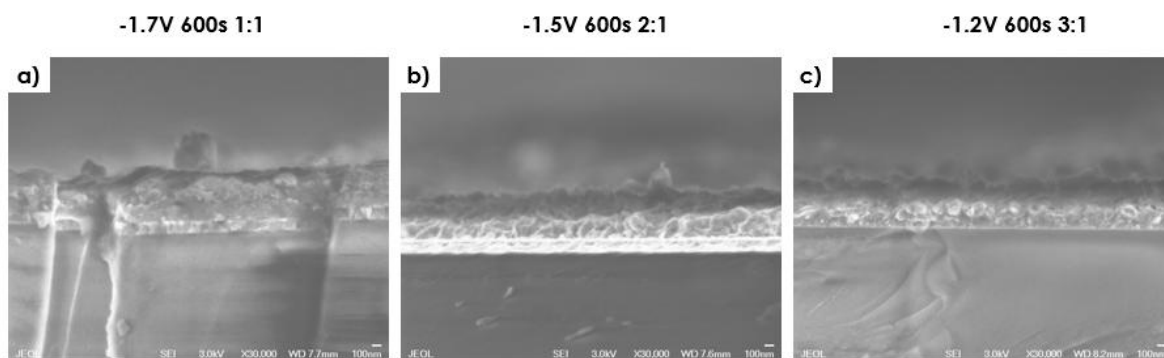


Figura 12 Imágenes de SEM del espesor de películas de $Fe_xZn_{1-x}S$ depositadas electroquímicamente donde a) -1.7 V , 600 s a una concentración 1:1 de Fe:Zn/b) -1.5 V , 600 s a una concentración de 2:1 de Fe:Zn/ c) a -1.2 V , 600 s a una concentración 3:1 de Fe:Zn

En la literatura encontrada, el grupo de investigación de Akhtar y colaboradores sintetizaron películas delgadas de FeZnS por deposición de baño químico durante 3 horas, obteniendo películas con un espesor promedio de 200 nm ; también se observaron aglomeraciones casi esféricas de un diámetro promedio de 150 nm (Akhtar, S *et al.*, 2015). El grupo de investigación de Kashyout y colaboradores, sintetizaron películas delgadas de ZnFeS vía electroquímica, demostraron que la morfología de la película cambia de granular porosa a una estructura más compacta a medida que el contenido de Zn aumenta (Kashyout *et al.*, 1995). Tras haber mencionado lo anterior, podemos concluir que el material sintetizado vía electroquímica es un material no poroso que fue depositado de manera uniforme sobre el sustrato en el cual se pueden observar cúmulos semi esféricos de nanopartículas con diámetros que van desde 24 nm a 150 nm , lo cual coincide con lo mencionado por los autores anteriormente citados. Adicionalmente se observa que el espesor de las películas puede ser modificado al variar el método de síntesis y las condiciones de este, observando que en el caso de la síntesis electroquímica se puede

variar la granulometría de la película y su espesor, el cual está directamente relacionado a la diferencia de potencial que pasa por el sistema.

4.1.5 Espectroscopia por dispersión de energía (EDS)

Con el fin de analizar la composición del material sintetizado, se realizó un análisis complementario mediante espectroscopia de rayos X (EDS), esto se puede observar en la Tabla 3, donde se presentan porcentajes en peso y porcentajes atómicos de las muestras analizadas.

El análisis composicional de la película delgada de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositada a -1.7 V a 600 s con una concentración 1:1 de Fe:Zn muestra la presencia de Zn, Fe y S con un porcentaje en peso de 91.69, 7.46 y 0.85 respectivamente, al ver los datos tabulados en la Tabla 3 se puede observar que el Zn está presente en un porcentaje muy alto a comparación a la del Fe el cual no llega al 10 por ciento, esto concuerda con lo obtenido en XRD en la Figura 6 donde se observa las señales características de la wurzita, y del FeS el cual se encuentra en baja proporción.

El análisis composicional de la película de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositada a -1.5 V a 600 s con una concentración 2:1 de Fe:Zn de manera similar se encuentra la presencia de los elementos de Fe, S y Zn, a diferencia de la muestra anterior los elementos cuentan con un porcentaje en peso de 57.95, 10.12 y 31.33 respectivamente, al ver los datos tabulados (Tabla 3) se puede observar que la presencia del Fe es mucho mayor a la del Zn, lo cual concuerda con lo observado en XRD en la Figura 7 donde además de la Wurzita, se puede

observar el aumento de señales en compuestos de hierro, encontrándose los compuestos de FeS y FeS₂.

Tabla 3 Porcentajes atómicos y de peso para las muestras sintetizadas de Fe_xZn_{1-x}S

EDS de las muestras sintetizadas vía electroquímica								
-1.7 V a 600 s 1:1 de Fe:Zn			-1.5 V a 600 s 2:1 de Fe:Zn			-1.2 V a 600 s 3:1 de Fe:Zn		
Elemento	% Peso	% atómico	Elemento	% Peso	% atómico	Elemento	% Peso	% atómico
S	0.85	1.7	S	5.75	10.12	S	3.675	7.33
Fe	7.46	8.54	Fe	57.95	58.55	Fe	12.99	14.32
Zn	91.69	89.75	Zn	36.23	31.33	Zn	83.17	78.33

El análisis composicional de la película depositada a -1.2 V a 600 s con una concentración de 3:1 de Fe:Zn en la cual podemos encontrar los elementos de S, Fe, Zn estos elementos se encuentran con un porcentaje en peso de 3.67, 12.99 y 83.17 respectivamente, en algunas muestras se detectaron elementos como el O y In esto debido a que el espesor de la película era tan delgado que se traspaso y se observaron señales del sustrato (vidrio recubierto con ITO). Esto se confirma con lo observado en XRD en la Figura 8, donde se aprecian

las señales características de la Wurzita, donde además se encuentran señales de compuestos de hierro tales como FeS y FeS₂.

Tras los análisis realizados, se puede concluir que el material sintetizado a -1.5 V a 600 s con una concentración 2:1 de Fe:Zn es el que cumple con lo esperado, ya que a diferencia de los otros este cuenta con mayor cantidad de Fe; esto apoyado con lo descrito en la Tabla 3, también confirmado por el espectro de XRD (Figura 6-8) donde la muestra con una concentración 2:1 de Fe:Zn presenta señales correspondientes a compuestos de Fe en su mayoría.

4.1.6 Resultados de UV-Vis:

En la Figura 13 se muestra el espectro de UV-Vis para el Fe_xZn_{1-x}S electrodepositado a -1.7 V, -1.5 V y -1.2 V a 600 s a temperatura ambiente, en un rango 200 nm a 1100 nm.

Los resultados obtenidos para las películas de Fe_xZn_{1-x}S muestran una banda de absorción en el ultravioleta (350-400 nm) atribuida al ZnS, en concordancia con trabajos previos donde se reporta que el ZnS puro presenta un borde de absorción agudo alrededor de 340-370 nm, correspondiente con una banda prohibida directa de aproximadamente 3.6 eV (Nadeem *et al.*, 2000) (Kassim *et al.* 2010). Sin embargo, la aparición de una segunda región de absorción significativa hacia los 600 nm sugiere una modificación de la estructura electrónica debido a la incorporación del hierro. Este comportamiento ha sido reportado por Elango y Roopan, quienes observaron que el dopado con metales el transición como Fe en matrices de ZnS induce a la formación de niveles energéticos intermedios dentro de la banda prohibida, permitiendo una

mayor absorción en el visible (Elango *et al.*, 2015). Así mismo, en el estudio de dopaje de Fe en pirita (FeS_2), Hazarika *et al.*, mostraron que la introducción de elementos sustituyentes altera la densidad de estados y puede desplazar el borde de absorción hacia mayores longitudes de onda (Hazarika *et al.*, 2015).

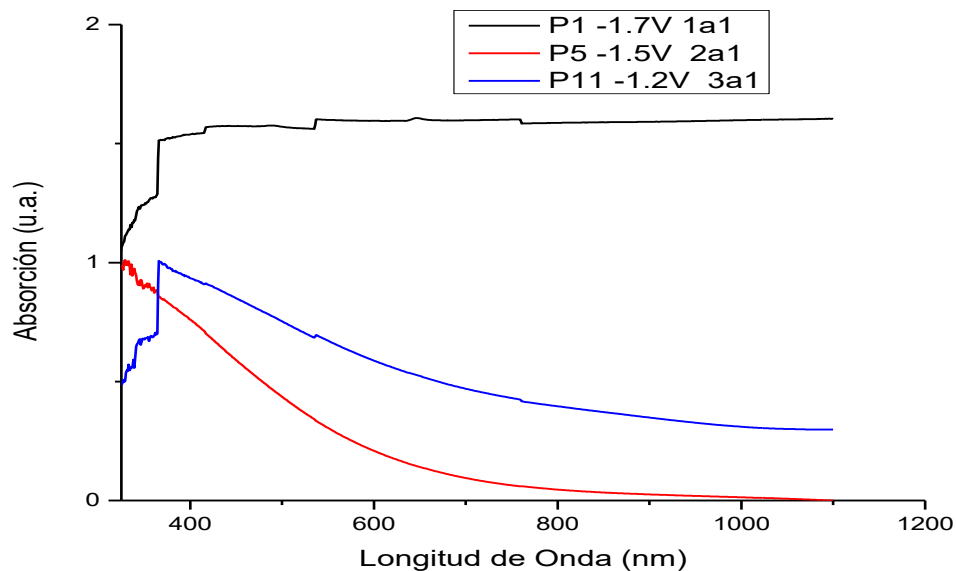


Figura 13 Espectro de absorbancia de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente donde a) -1.7 V, 600 s a una concentración 1:1 de Fe:Zn/b) -1.5 V, 600 s a una concentración de 2:1 de Fe:Zn/ c) a -1.2 V, 600 s a una concentración 3:1 de Fe:Zn

Con ayuda de los datos arrojados por la caracterización de UV-Vis, se construyó un gráfico con el cual se obtuvo el E_g del material en cada síntesis, para dicho grafico se utilizaron las siguientes ecuaciones:

$$\alpha = 2.302 * \left(\frac{A}{t}\right) \quad (4)$$

$$h\nu = \frac{1240}{\lambda} \quad (5)$$

donde:

- α es el coeficiente de absorción.
- t es el espesor de la película.
- λ es la longitud de onda.
- $h\nu$ es energía de fotón.
- A es la absorbancia.

Tras haber realizado los cálculos correspondientes, se creó un gráfico el cual se puede observar en la Figura 14; cabe recalcar que un gráfico como este se realizó para cada una de las muestras analizadas.

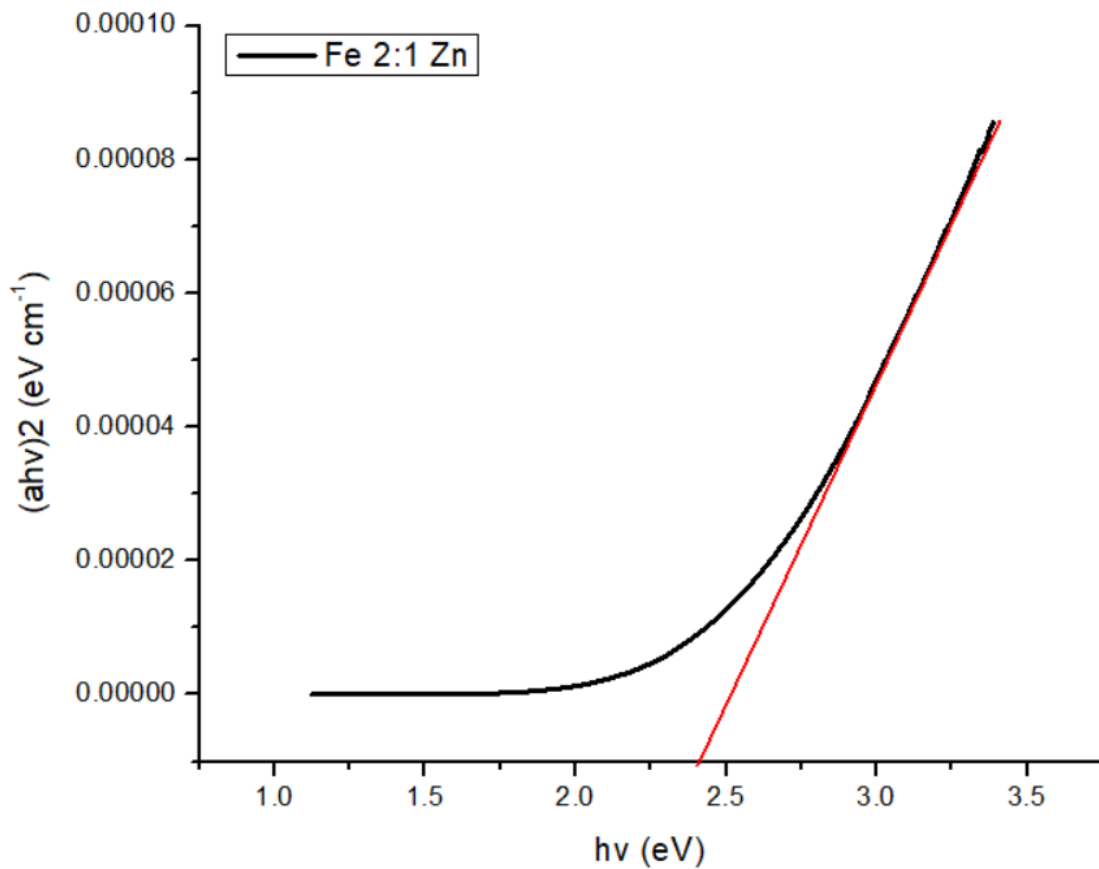


Figura 14 Tauc-plot para el cálculo del E_g para la muestra con concentraciones de Fe:Zn de 2 a 1 en la síntesis de $Fe_xZn_{1-x}S$

Con ayuda de este gráfico y del programa utilizado para su elaboración, se obtuvieron los datos necesarios para calcular la E_g de cada una de las muestras, el cual arrojó valores de 1.215, 2.490 y 2.290 eV para las muestras sintetizadas del material ternario con relaciones de Fe:Zn de 1:1, 2:1 y 3:1 respectivamente.

4.1.7 Resultados de Fotoluminiscencia:

En la Figura 15 podemos observar los espectros de PL para el $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ electrodepositado a 600 s con diferentes concentraciones de la celda electroquímica. Para las muestras con potenciales de -1.7 V y -1.2 V a 600 s se utilizó una longitud de onda de excitación de 255 nm para ambas muestras; se puede observar una señal traslapada a una longitud de 500 nm lo que es cercano al valor típico del ZnS la cual se presenta entre 530-610 nm (Raghuram *et al.*, 2016), esta emisión característica del ZnS es atribuida a transiciones electrónicas desde trampas superficiales y vacancias del azufre, que se mantienen activas debido a la alta proporción de Zn en estas muestras; esto también se puede observar el espectro de XRD donde dichas muestras presentan en su mayoría señales correspondientes a la ZnS en su fase Wurzita.

Para la muestra electrodepositada a -1.5 V a 600 s se utilizó una longitud de onda de excitación de 335 nm, donde podemos ver que se presenta una señal a 670 nm, el desplazamiento batocrómico puede deberse a que existe la presencia del Fe en la red del material, que induce la formación de niveles intermedios dentro de la banda prohibida, permitiendo transiciones de menor energía (Horoz *et al.*, 2017) ; como se observa en el espectro de XRD donde

dicha muestra presenta señales en su mayoría de compuestos de Fe, a su vez confirmado por el análisis de EDS.

En conjunto, estos resultados respaldan la idea de que la incorporación progresiva de Fe en la red de ZnS altera significativamente la estructura electrónica del material, modificando su emisión óptica y desplazando la fotoluminiscencia hacia el rojo (Horo *et al.*, 2017).

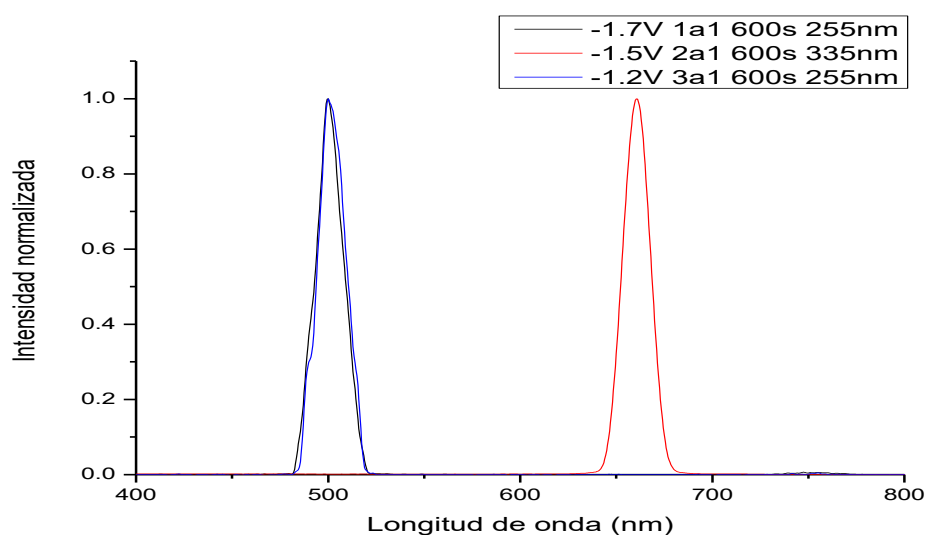


Figura 15 Espectro de fotoluminiscencia de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ depositadas electroquímicamente donde a) -1.7 V, 600 s a una concentración 1:1 de Fe:Zn/b) -1.5 V, 600 s a una concentración de 2:1 de Fe:Zn/ c) a -1.2 V, 600 s a una concentración 3:1 de Fe:Zn

4.2 Caracterización del Poli(3-hexiltiofeno) (P3HT)

A continuación, se muestran las caracterizaciones correspondientes al polímero Poli(3-hexiltiofeno), dicho polímero fue sintetizado vía oxidación química del monómero 3-hexiltiofeno y en presencia del FeCl_3 , dicha reacción se llevó a cabo bajo una atmosfera de nitrógeno por un periodo de 24 h.

El P3HT obtenido se presentó como un polvo sólido de color negro, el cual se aprecia como un polvo fino que tiende a aglomerarse en cúmulos más grandes tal como se muestra en la Figura 16.



Figura 16 P3HT sintetizado.

4.2.1 Resultados de FTIR

En la Figura 17 se puede encontrar el espectro correspondiente al FTIR del P3HT, en el cual podemos observar señales características de este material, podemos observar una señal a 2925.2 cm^{-1} el cual se debe a la vibración C-H en la cadena alifática de los grupos hexilo. El tiofeno se puede identificar por sus señales características ubicadas en 1460.6 cm^{-1} correspondientes al enlace C=C, en 2443 cm^{-1} correspondiente al enlace C-H₂ y en 2923 cm^{-1} correspondiente al enlace C-H₃. La presencia de C-H de los anillos aromáticos es confirmada por la señal característica ubicada en 1079.0 cm^{-1} . Se puede observar una vibración a 668 cm^{-1} que indica la presencia del átomo de S del anillo del politiofeno; la presencia de estas señales en el espectro indica que se obtuvo el P3HT.

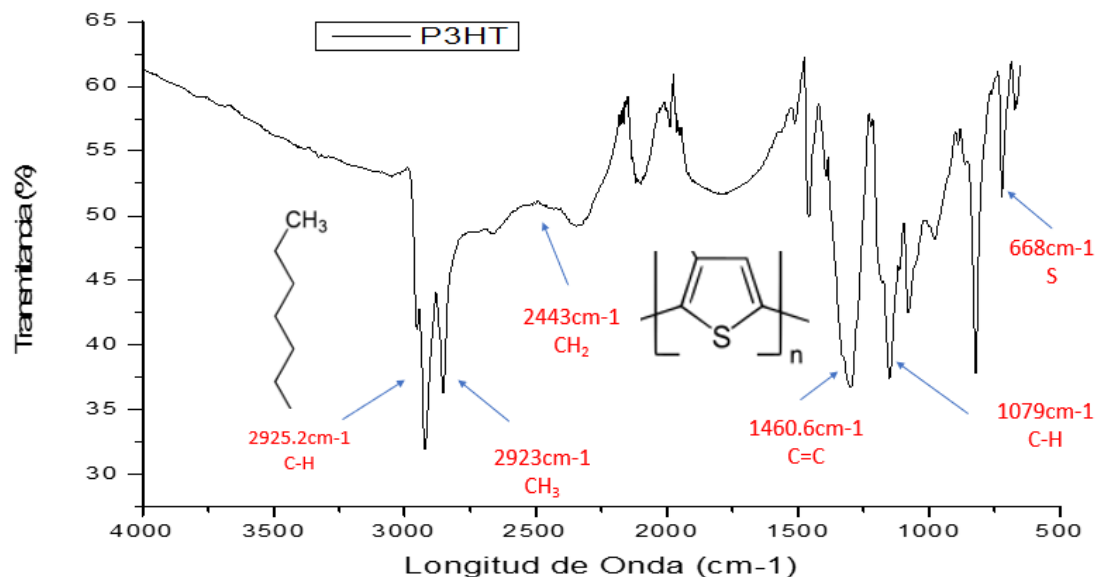


Figura 17 Espectro infrarrojo del P3HT sintetizado

4.2.2 Resultados de UV-Vis

En la Figura 18 se puede observar el espectro de absorción del P3HT diluido en cloroformo, donde se muestra la longitud de onda de máxima absorción a 434 nm. El valor estándar reportado para dicha absorción es de 420 nm según la literatura, sin embargo, se han reportado trabajos en los que estas señales llegan hasta los 454 nm, dicho desplazamiento se ha asociado a una disminución de la longitud de conjugación de la cadena principal (Tremel *et al.*, 2014).

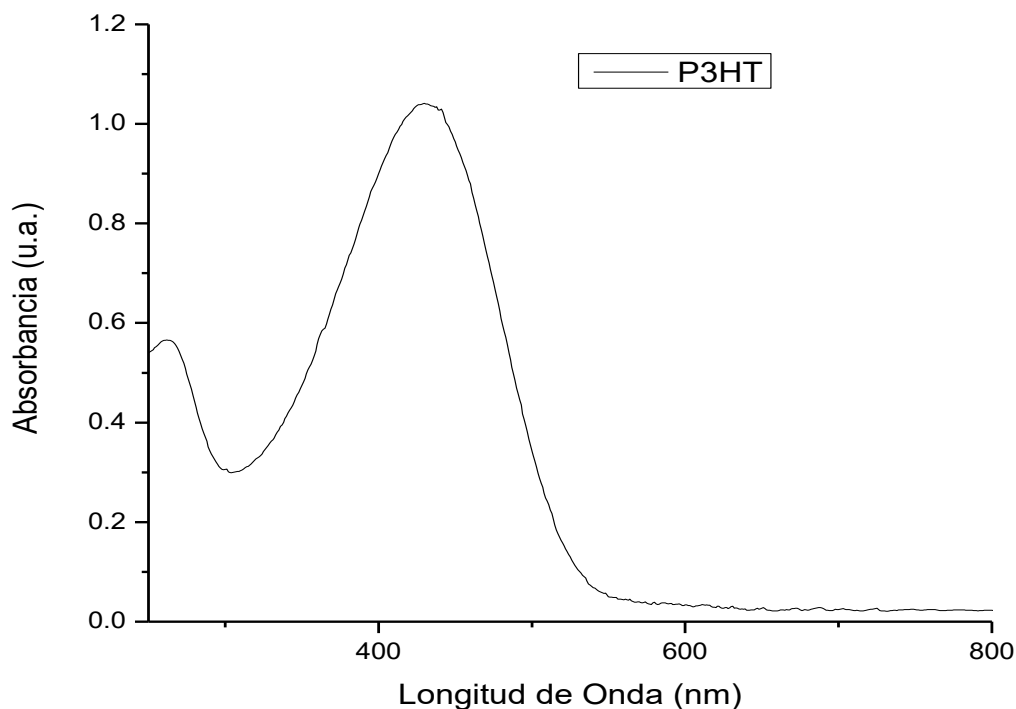


Figura 18 Espectro de absorción del P3HT

4.2.3 Resultados de Fotoluminiscencia

En la Figura 19 se puede observar el espectro de fotoluminiscencia, en el cual podemos observar que se presenta una señal a una longitud de 577 nm aproximadamente, la literatura reporta que cuando se obtienen señales a este valor de longitud de onda se puede asociar a una alta regioregularidad de las cadenas que conforman el material, lo anterior es una característica deseable para la celda solar ya que esto permitirá tener una mejor distribución de las cargas fotoinducidas (Tremel *et al* 2014).

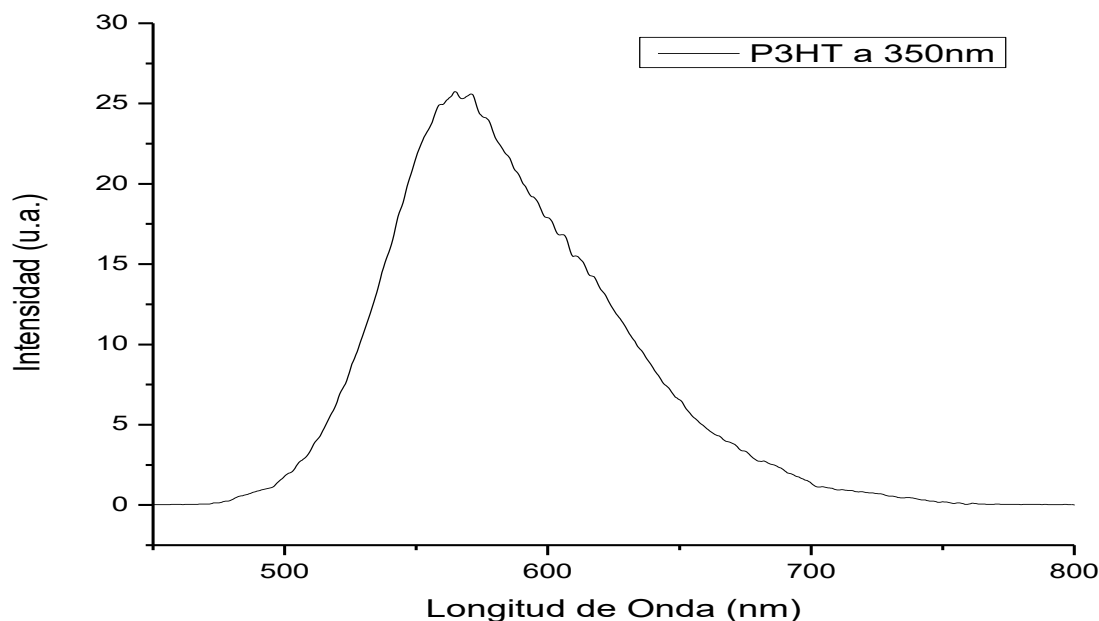


Figura 19 Espectro de fotoluminiscencia del P3HT

4.3 Celdas solares híbridas

Una vez obtenidos los materiales de interés se procedió a realizar su deposición para generar una celda con disposición capa por capa, se utilizó como base el vidrio conductor de ITO donde se realizó la deposición directa del material ternario a las diferentes relaciones Fe:Zn. Una vez obtenidas las películas del material inorgánico se llevó a un equipo de *spin-coating* para agregar una capa del P3HT sintetizado, así como una capa de PEDOT:PSS el cual actuará como capa transportadora de huecos. Finalmente se agregó una última capa de Au por la técnica de *sputtering* el cual funcionara como electrodo metálico para cerrar el circuito. En la Figura 20 se pueden conservar las celdas terminadas.

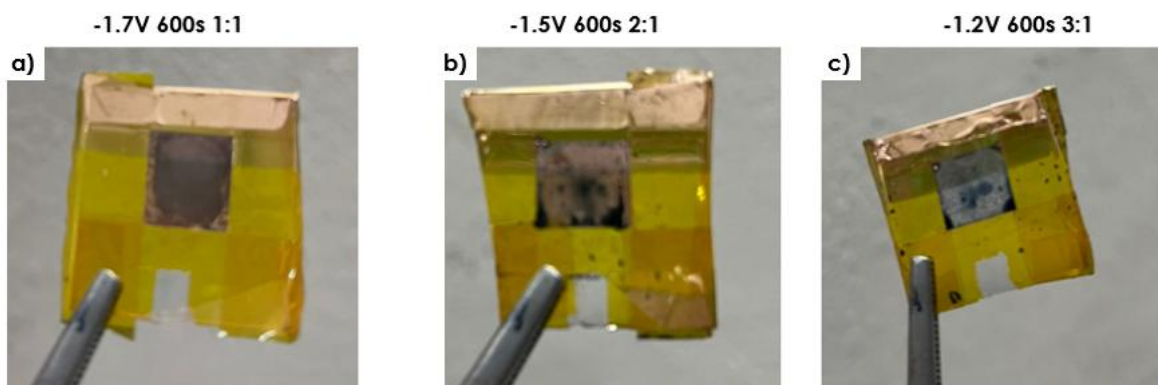


Figura 20 Celdas solares con configuracion a) ITO/ $\text{Fe}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{S}$ /P3HT/NPAu b) ITO/ $\text{Fe}_{0.66}\text{Zn}_{0.33}\text{S}$ /P3HT/PEDOT:PSS/NPAu c) ITO/ $\text{Fe}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{S}$ /P3HT/PEDOT:PSS/NPAu

4.3.1 Caracterización de las celdas solares híbridas:

Para caracterizar las celdas generadas se realizaron curvas corriente-voltaje (I-V), para dichas curvas se realizó un barrido de 0 V a 2 V, tras obtener la curva I-V se procedió a realizar la curva de potencia-voltaje (P-V) para dicha curva se realiza la multiplicación de la corriente por el voltaje. En las Figuras 21-23 se pueden observar las curvas correspondientes a la caracterización realizada a las celdas terminadas. Dichas curvas nos ayudaron a encontrar la eficiencia con ayuda de la ecuación (1) los resultados se pueden observar en la Tabla 4.

Tabla 4 Parámetros de celda y eficiencias calculadas para las diferentes celdas

Celda	I_m	V_m	I_{sc}	V_{oc}	FF	Eficiencia	Composición
1	0.008798	1.70016	0.00511	1.7138	1.70702	1.4958	$\text{Fe}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{S}$
2	0.007499	1.5039	0.004828	1.5405	1.516329	1.1277	$\text{Fe}_{0.66}\text{Zn}_{0.33}\text{S}$
3	0.06659	1.3574	0.004809	1.3793	1.36271	0.903893	$\text{Fe}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{S}$

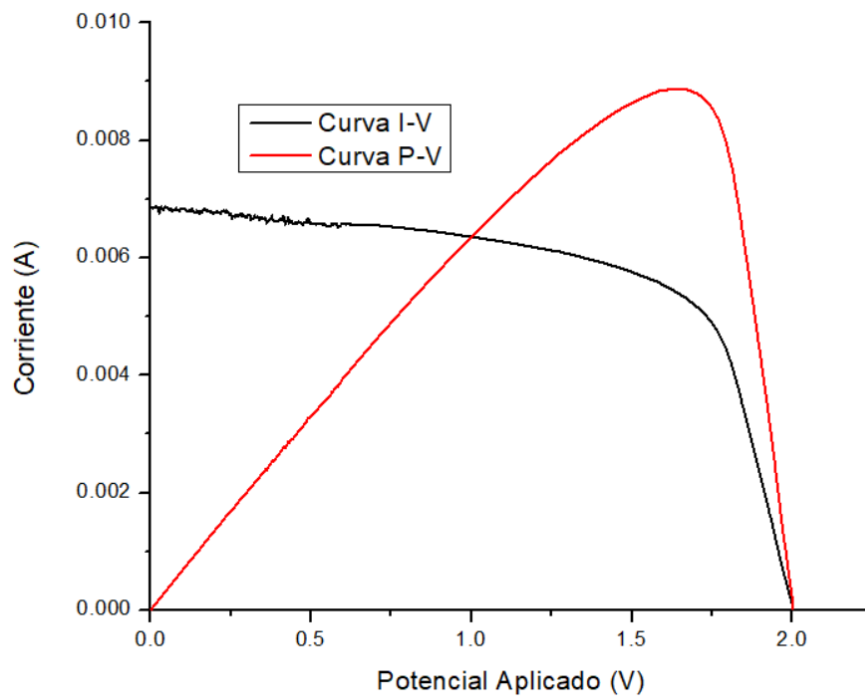


Figura 21 Curva I-V de la celda ITO/Fe_{0.5}Zn_{0.5}S/P3HT/NPAu

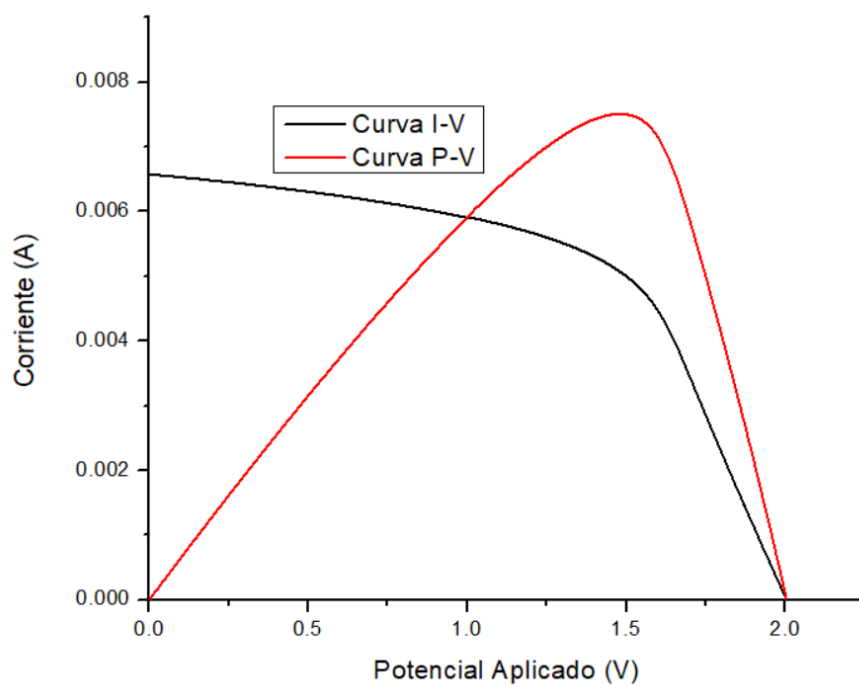


Figura 22 Curva I-V de la celda ITO/Fe_{0.66}Zn_{0.33}S/P3HT/PEDOT:PSS/NPAu

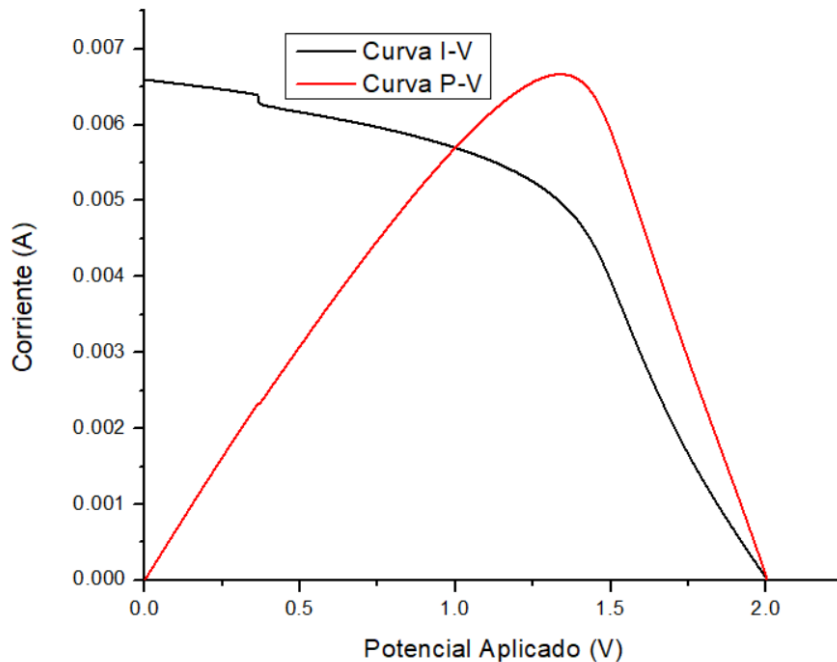


Figura 23 Curva I-V de la celda ITO/ $\text{Fe}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{S}$ /P3HT/PEDOT:PSS/NPAu

Los resultados de las curvas I-V y P-V obtenidas para las celdas solares basadas en películas delgadas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ muestran eficiencias menores al 2%, lo cual, aunque modesto, es consistente con reportes previos para dispositivos experimentales fabricados con sulfuros ternarios o materiales dopados. La celda con composición $\text{Fe}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{S}$ alcanzó la mayor eficiencia (1.49%), mientras que el aumento en la proporción del Fe provocó una disminución progresiva del rendimiento fotovoltaico. Este comportamiento puede atribuirse a la alteración de la estructura de banda y a un incremento de defectos o centros recombinantes introducidos por el Fe, lo cual limita el transporte eficiente de cargas, como se ha observado también por Liu *et al.*, al dopar ZnS con metales de transición en celdas solares de tipo heterounión (Liu, *et al.*, 2016).

Así mismo, comparando con trabajos como el de Naderi *et al.*, donde celdas basadas en películas de ZnS dopadas con Ni y Cu lograron eficiencias apenas superiores al 2%, es evidente que, aunque estos sulfuros pueden funcionar como semiconductores activos, requieren una optimización rigurosa de la morfología, el espesor de la película, la calidad cristalina y la interfaz con otras capas para lograr mejores rendimientos (Naderi *et al.* 2020). Sin embargo, en el trabajo de Jabeen *et al.*, en 2017 se reporta una celda híbrida que tiene como capa activa ZnS con P3HT la cual alcanza una eficiencia de 0.48% (Jabeen *et al.* 2017) con lo que se demuestra que la incorporación del Fe para generar nuestro material ternario tuvo un efecto positivo en la eficiencia de la celda final.

En ese sentido, los resultados presentados aquí se alinean con la etapa temprana de desarrollo de materiales alternativos, destacando el potencial del ternario $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ como capa fotoactiva para una celda solar, pero también denota la necesidad de mejorar su estructura electrónica y su acoplamiento con capas colectoras y transportadoras. Por lo cual se podría sugerir la adición de una capa transportadora de electrones y evaluar los niveles energéticos asociados al material en sus transiciones electrónicas a fin de seleccionar un polímero que sea mucho más adecuado y que permita aumentar la eficiencia de la celda. Sin embargo, es importante destacar que este material presenta un comportamiento favorable para la aplicación en celdas solares.

CAPÍTULO 5

5.1 Conclusiones y Recomendaciones

En este proyecto se lograron sintetizar vía electroquímica y caracterizar las películas delgadas de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$, obteniendo un material ternario con diferentes concentraciones de Fe. La caracterización por XRD muestra que se generó un material base de ZnS en su fase Wurzita que contenía fases de FeS y FeS_2 debido a las reflexiones observadas en los difractogramas. Los resultados de los espectros de absorción confirman que la estructura base el ZnS encontrada por el XRD dirige la respuesta fotoquímica del material, aunque se encontraron señales pertenecientes al Fe que sugieren una modificación electrónica del ZnS debido a la incorporación del Fe en su estructura, por lo que podemos presumir la formación de un material ternario. Las imágenes de SEM mostraron películas uniformes, no porosas, con cúmulos semiesféricos, con tamaños de 20 a 150 nm y espesores de 200 a 600 nm. El análisis por EDS apoya los resultados de XRD demostrando la incorporación de los iones Zn y Fe en la estructura base del sulfuro sintetizado y las películas obtenidas presentaron valores de E_g de 1.215, 2.490 y 2.290 eV para las muestras con relación Fe:Zn 1:1, 2:1, 3:1, respectivamente.

Se sintetizó el Poli(3-hexiltiofeno) vía oxidación química en presencia de FeCl_3 , se presentó como un polvo sólido de color negro, el cual se aprecia como un polvo fino que tiende a aglomerarse en cúmulos más grandes. El espectro de FTIR permite observar las señales características del material, resaltando los enlaces C=C a 1460 cm^{-1} , la presencia del átomo de S a 668 cm^{-1} , y la presencia del enlace C-H a 2952 cm^{-1} confirmando su estructura química. El análisis por ultravioleta visible señalan la presencia de un polímero con disminución de longitud de conjugación de la cadena principal, mientras que los resultados de fotoluminiscencia demuestran la presencia de un polímero con alta regioregularidad, por lo anterior el polímero puede ser utilizado para la aplicación deseada, aunque podrían mejorarse sus características para tener resultados más favorables.

El Poli (3-hexiltiofeno) sintetizado fue depositado mediante la técnica de *Spin-Coating* sobre la película previamente depositada sobre ITO de $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ por vía electroquímica, para generar la capa fotoactiva de nuestra celda solar híbrida. Adicionalmente por *Spin-Coating* se depositó PEDOT:PSS el cual actúa como una capa transportadora de huecos. Finalmente, para cerrar el circuito de la celda solar, se hizo una deposición por la técnica de *sputtering* de nanopartículas de Au. Por lo que nuestra celda solar tendrá la estructura ITO/ $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{S}$ /P3HT,PEDOT:PSS/Au, se realizaron tres celdas cambiando los materiales inorgánicos bajo las relaciones 1:1, 2:1, 3:1 de Fe:Zn.

A las celdas generadas se les realizaron las curvas I-V para su caracterización, donde se obtuvieron parámetros de voltaje de circuito abierto y

corriente de corto circuito. Los cuales permitieron realizar el cálculo de la potencia máxima de la celda y por ende su eficiencia. Para las celdas estudiadas en el proyecto se obtuvieron eficiencias de 1.4958, 1.1277 y 0.9038% para las relaciones 1:1, 2:1 y 3:1 de Fe:Zn respectivamente. Aunque todos los resultados obtenidos fueron menores al 2% por lo que no se cumple la hipótesis del proyecto, se recomienda optimizar los parámetros de síntesis del compuesto ternario, la síntesis del P3HT y el espesor de las películas de los polímeros conductores, y especialmente la ingeniería de celda apropiada. Sin embargo, los resultados obtenidos sobrepasan ampliamente los valores reportados para celdas equivalentes compuestas por ZnS y P3HT como capa fotoactiva reportados en 0.48%, lo que demuestra que la incorporación de Fe tiene un efecto positivo en la respuesta fotovoltaica del material. El mejor resultado se obtuvo para la celda con relación 1:1 de Fe:Zn lo que indica que el material $\text{Fe}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{S}$ fue el que presentó una mayor eficiencia de conversión de energía, mientras que al aumentar la cantidad de Fe en el sistema esta propiedad disminuye.

Este proyecto, ofrece una alternativa para la elaboración de celdas solares híbridas, ya que abarca los materiales ternarios simples, con baja toxicidad y con una ruta de síntesis rápida y permite control de las características finales del material. Además del uso de un polímero conductor con una síntesis fácilmente escalable para proporcionarle propiedades de flexibilidad a la celda final. Sin embargo, para que dicha aplicación pueda llevarse a cabo es necesario seguir investigando en la síntesis de los

materiales, su compatibilidad energética y la ingeniería de celda durante la fabricación de los dispositivos fotovoltaicos además de explorar la adición de otras fases de polímero que cuentan con mayor compatibilidad con el material ternario.

Considerando las técnicas de síntesis, la simplicidad de los materiales y la baja toxicidad de los sistemas generados la propuesta que se presenta en este proyecto puede ser técnicamente ajustada para su desarrollo a grande escala y pensar en una posible aplicación industrial. Cabe resaltar que los valores de celda, aunque no son altos pueden recolectar energía solar que podría ser acumulada debido al área de la celda expuesta la cual se ampliaría al ser este un sistema flexible (por la presencia del polímero conductor) que pudiera colocarse sobre superficies de uso arquitectónico y en dispositivos.

A futuro, dicho proyecto puede tener un impacto social importante, ya que se promueve el uso de energías limpias, además de brindar una alternativa en materiales de construcción de celdas solares, esto para ayudar a personas las cuales no cuenten con un suministro fiable de energía eléctrica.

REFERENCIAS

- Akhtar S, M., Malik A, M., Alghamdi G, Y., Ahmad S, K., Riaz, S., & Naseem, S. (2015). Chemical bathdeposition of Fe-doped ZnS thin films: Investigations of their ferromagnetic and half-metallic properties. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 289-291. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.mssp.2015.05.017
- Altomonte, H., Coviello, M., & Lutz F., W. (2003). *Energia renovables y eficiencia energética de América Latina y el Caribe. Restricciones y perspectivas*. Santiago de Chile.
- Ansari, M., Mohiuddin, S., Kandemirli, F., & Malik, M. (2018). Synthesis and characterization of poly(3-hexythiophene): improvement of regioregularity and energy band gap. *Royal Society of Chemistry*, 8319-8328.
- Atria Innovation*. (2020). Retrieved Noviembre 21, 2023, from Atria Innovation: <https://www.atriainnovation.com/microscopia-electronica-de-barrido-sem-utilidades/>
- Atwater, H. A., & Polman, A. (2010). Plasmonics for improved photovoltaic devices. *Nature Materials*, 205-213.
- Bard, A., & Faulkner, L. (2001). *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications*. New York: Jhon Wiley & Sons, Inc.
- Billmeyer, F. W. (1984). *Textbook of polymer Science* . Jhon Wiley & Sons.
- Bolaños Ch, L., & Alvarez, L. (2018). Polimeros Conductores: Aplicaciones en celdas fotovoltaicas y dispositivos electronicas. *Ciencia y Tecnologia* , 18-38.
- Bonin, K. (2013). Polymers: Structure and Function. *Materials Science*, 89-100.
- Bredas, J. L. (2010). The Role of the Doping Process in Conductive Polymers. *Chemical Reviews*, 1395-1412.
- Buker, K., Fiechter, S., Eyert, V., & Tributsch, H. (1999). Photoelectrochemistry of Higly Zn-Doped Pyrite as Compared with Isostructural FeS₂. *Journtal of The Electrochemical Society*, 264-265.
- Chang, Y. C., Hsu, P. H., & Li, T. W. (2017). Electrochemical deposition of ternary compounds: Mechanisms and applications. *Journal of Electrochemical Science*, 567-580.
- Chaundhry, V., Pandey, R., Prakash, R., Kumar, N., & A, K. (2019). Highly aligned and crystalline poly(3-hexylthiophene) thin films by off-center spin coating for high performance organic field-effect transistors. *Synthetic Metals*, 258, 116221.
- Chen, L., Zhang, H., & Xu, Y. (2021). Synthesis and properties of ternary metal oxides for sensor applications. *Journal of Materials Chemistry A*, 6784-6795. doi:https://doi.org/10.1039/D0TA09714D
- Chen, Z., Wang, H., & Liu, Y. (2020). Recent Advances in Electrochemical Synthesis of Multicomponent Alloys. *Electrochimica Acta*, 354(136671).

- Compton, R., & Banks, C. (2010). *Understanding Voltammetry: Simulation of Electrode Processes* (3era Edicion ed.). Imperial College Press.
- Conway, B. (1998). *Electrochemical Supercapacitors: Scientific Fundamentals and Tecnological Applications* . Kluwer Academic Publishers.
- Cruz T., I. (2018). *Fabricación y caracterización optica y electrica de una celda solar organica utilizando el compuesto P3HT:PCBM (Tesis)*. Mexico .
- Díaz Chao, P. (2009). *Películas delgadas para aplicaciones termoelectricas y fotovoltaicas: formacion y dopaje*. Madrid.
- Dresselhaus, M. S. (2007). Electrically Conductive Polymers. *Science*, 818-821.
- Elango, G., & Roopan, S. M. (2015). A review on the optical properties of metal-doped ZnS nanoparticles. *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews*, 132-145.
- Electrical Tecnology*. (2019). Retrieved Abril 16, 2024
- Electrical4U. (2020, Octubre 28). *Electrical4U*. Retrieved Abril 16, 2024, from <https://www.electrical4u.com/solar-cell/>
- Elgrishi, N., Rountree, K., McCarthy, B., Rountree, E., Eisenhart, T., & Dempsey, J. (2018). A Practical Begginers Guide to Cyclic Voltammetry. *Journal of Chemcial Education*, 197-206.
- Flores Rivera, N. R., & Domínguez Ramírez, M. Á. (n.d.). *"Medición de la eficiencia de energètica de los paneles solares de silicio" (Tesis de Matesría)*. CIMAV.
- Freedman, B. (2003). *The Nature of Plymers*. Cambridge University Press.
- Gao, J. (2015). Organic Photovoltaic Devices Based on Conductive Polymers. *Advanced Materials*, 2928-2946.
- Gao, J., Wang, M., & Zhang, Y. (2003). Synthesis and properties of poly(3-hexylthiophene). *Macromolecules*, 872-877. doi:<https://doi.org/10.1021/ma0262176>
- Garcia, M., Lopez, R., & Wang, T. (2021). Ternary ceramics for advanced applications. *Ceramics International*, 5401-5408. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.11.137>
- Gayathri, G., Manikandan, K., & Thiruneelakandan, R. (2019). Prearation and effect of complexing agents on ternary FeZnS₂ thin films by chemical bath deposition method for photo catalitic degradation of dye molecules. 6023-6036.
- Gilliland, G. (1996). Photoluminescence spectroscopy of crystalline semiconductors . *Materials, Science and Engineering*, 99-400.
- Green, M. A., Emery, K., Hishikawa, Y., Warta, W., & Dunlop, E. D. (2015). Solar cell efficiency tables (version 45). *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 1-9.
- Günes, S., & Sariciftci, N. (2007). Hybrid solar cells. *Inorganica Chimica Acta*.

- Gür, E. S., Hekimoglu, B., & Aydin, M. (2019). Electrochemical Synthesis of CIGS Thin Films for Solar Cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 109-118.
- Haiss, W., Thanh, N., Aveyard, J., & Ferning, D. (2007). Determination of size and concentration of gold nanoparticles from UV-vis spectra. *Analytical Chemistry*, 4215-4221.
- Hazarika, A., Mahanta, D., & Deka, S. (2015). Metal doped iron pyrite nanostructures for visible light driven photocatalysis. *RSC Advances*, 26915-26924.
- Heeger, A. J. (2001). Semiconducting and Metallic Polymers: The Fourth Generation of Polymeric Materials. *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, 3-8.
- Heinemann, W., & Kissinger, P. (1996). *Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry* (2da Edición ed.). CRC Press.
- Hernández-Calderón, I. (2013). Epitaxial growth of thin films and quantum structures of II-VI visible-bandgap semiconductors. *Molecular Beam Epitaxy*, 311-346.
doi:<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-387839-7.00014-2>
- Higuera Valenzuela, H. (2018). *¿Como funcionan las celdas solares? ¿Y como mejorar su funcionamiento?* Retrieved Abril 16, 2024, from <https://redsolar.ier.unam.mx/wp-content/uploads/2018/12/Como-funcionan-las-celdas-solares.pdf>
- Honsberg, C., & Stuart, B. (2019). *PVEducation*. Retrieved Septiembre 28, 2022, from <https://www.pveducation.org/es/fotovoltaica/dispositivos-semiconductores/dopaje>
- Horoz, S., & Sahin, O. (2017). Investigation of structural, optical and photovoltaic properties of Fe-alloyed ZnS quantum dots. *Journal of Materials Science in Electronics*, 438-446.
- Horoz, S., Al-Ghamdi, A. A., & El-Tantawy, F. (2017). Fe-doped ZnS nanoparticles: Photoluminescence and UV-Vis studies. *Journal of Luminescence*, 179-185.
- Hossain, N., Mobarak, H., Mimona, M., Islam, A., Hossain, A., Zhura, F., & Chowdhury, M. (2023). Advances and significances of nanoparticles in semiconductor applications - A review. *Results in Engineering*, <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2023.101347>.
- Huang, Y., Li, W., & Zhang, X. (2020). Advancements in polymer solar cells based on poly(3-hexylthiophene). *Solar Energy Materials and Solar Cells*.
doi:<https://doi.org/10.1016/j.solmat.2019.110493>
- Hwang, Y. J., & Cho, J. H. (2013). Conductive Polymers: The Future of Flexible Electronics. *Journal of Materials Chemistry C*, 1647-1654.
- Incháustegui Moreno, A. V., Díaz Guerrero, T. d., Osuna, E. I., & Bermúdez Contreras, A. S. (2019). *Efecto ambiental y socioeconómico de la producción de energía eléctrica*. Retrieved Septiembre 2022, 9, from Ciencia y Desarrollo. CONACYT: <https://www.cyd.conacyt.gob.mx/?p=articulo&id=482>
- ISASA Latam. (n.d.). Retrieved Noviembre 23, 2023, from ISASA Latam: <https://isasalatam.com/molecular/espectrometria-infrarroja-con-transformada-de-fourier-ftir/>

- Jabeen, U., Adhikari, T., Shah, M. S., Pathak, D., & Nunzi, J. M. (2017). Synthesis, characterization and photovoltaic performance of Mn-doped ZnS quantum dots- P3HT hybrid bulk heterojunction solar cells. *Optical Materials*, 754-762.
- Jiang, P., Zhou, W., & Wang, L. (2018). Charge Transfer Mechanisms in Organic-Inorganic Hybrid Solar Cells. *Nano Energy*(53), 8-20.
- Johnson, A., & Lee, S. (2023). Ternary semiconductors for optoelectronic applications. *Applied Physics Reviews*. doi:<https://doi.org/10.1063/5.0070813>
- Kashyout, A., Arico, A., Monforte, G., Crea, F., Antonucci, V., & Giordano, N. (1995). Electrochemical deposition of ZnFeS thin film semiconductors on tin oxide substrates. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 45-53.
- Kassim, A., Nagalingam, S., Tee, T., & Min, H. S. (2010). Synthesis and characterization of nanocrystalline ZnS thin films by chemical bath deposition method. *Journal of Applied Sciences*, 3130-3133.
- Kassim, A., WeeTee, T., Abdullah K., D., Sharif, A., SoonMin, H., Yong, G., & Nagalinbam, S. (2009). Preparation and Characterization of Iron Sulphide Thin Films by Chemical Bath Deposition Method. In *Indo. J. Chem.* (pp. 8-11).
- Khan, Y. (2016). Conductive Polymers for Chemical and Biological Sensors. *Advanced Functional Materials*, 2923-2939.
- Kirchartz, T., & Rau, U. (2018). Charge recombination in organic solar cells. *Advanced Energy Materials*.
- Kissinger, P., & Heineman, W. (1983). *Modern Techniques in Electroanalysis*. Maercel Dekker.
- Li, J., M, Z., Yu, B., Ma, Y., & Qu, Y. (2019). Chemical Doped Ternary and Quaternary Transition-Metal-Based Electrocatalysts for Hydrogen Evolution Reaction. *ChemCatChem*, 11, 4998-5012.
- Li, P., Wang, Y., & Chen, H. (2019). Co-deposition of Ternary Compounds in Electrochemical Systems: Challenges and Solutions. *Electrochemical Reviews* , 75-92.
- Li, X., Yu, P., & Zhao, Y. (2020). Enhancing Charge Transport in Hybrid Solar Cells via Electrochemical Characterization. *Advanced Energy Materials*, 10(12).
- Li, Y. (2013). Optical and electronic properties of poly(3-hexylthiophene) thin films. *Journal of Applied Physics*. doi:<https://doi.org/10.1063/1.4798097>
- Liu, T. (2015). A review on poly(3-hexylthiophene): Synthesis, properties, and applications. *Polymer Reviews*, 479-509. doi:<https://doi.org/10.1080/15583724.2015.1066962>
- Liu, Y., Yan, C., Wu, Y., Chen, C., Yang, L., Zhang, Y., & Li, Y. (2016). Enhanced photoelectric performance of ZnS thin film solar cells by transition metal doping. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 264-271.

- Luan, W., Zhang, C., Luo, L., Yuan, B., Jin, L., & Kim, Y. S. (2017). Enhancement of the photoelectric performance in inverted bulk heterojunction solid solar cell with inorganic nanocrystals. *Applied Energy*, 2217-2223.
- MacDiarmid, A. G. (2001). Conducting Polymers: A New Era. *Synthetic Metals*, 11-22.
- Marques, T., Bento, D., Morozin, D., & Laureto, E. (2012). In situ and ex situ spectroscopic study of poly(3-hexylthiophene) electrochemically synthesized. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 1916-1921.
- Matsumoto, T., Kato, Y., & Sato, R. (2019). Properties and applications of ternary alloys. *Materials Science and Engineering: A*. doi:<https://doi.org/10.1016/j.msea.2019.138282>
- Matsumoto, Y. (2011). Celdas solares de silicio: Fundamento y tendencias. *Electronica del Estado solido*, 32-44.
- Miklas, J. W., & Lendlein, A. (2016). Smart Polymers: Materials for Future Applications. *Advanced Functional Materials*, 3001-3010.
- Miller, J., & Robinson, P. (2023). Challenges in the development of ternary materials. *Materials Today*, 52-59. doi:<https://doi.org/10.1016/j.mattod.2023.03.011>
- Nadeem, M. Y., & Ahmed, W. (2000). Optical properties of ZnS thin films. . *Turkish Journal of Physics*, 651-659.
- Naderi, N., Safari, A., & Esfandiar, A. (2020). Structural, optical and photovoltaic properties of Cu and Ni doped ZnS thin films for solar cell applications. . *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 146-156.
- Namsheer, K., & Rout, C. (2021). Conducting polymers: a comprehensive review on recent advances in synthesis, properties and applications. *RSC Advances*, 5659-5697. doi: <https://doi.org/10.1039/d0ra07800j>
- Nasir, E. M., & Naji, I. S. (2015). Structural and Optical Properties of PbxCd1-xS Thin Films Prepared by Vacuum Evaporation Technique. *Aust. J. Basic & Appl. Sci.*, 364-371.
- Novoa Jerez, J., Alfaro, M., Alfaro, I., & Guerra, R. (2020). Determinación de la eficiencia de un mini panel solar fotovoltaico: una experiencia de laboratorio en energías renovables. *Educación Química*, 31, 22-37. doi: 10.22201/fq.18708404e.2020.2.70300
- Odian, G. (2004). *Principles of Polymerization*. Wiley.
- Oni, A. M., Mohsin, A. S., & Rahman, M. (2024). A comprehensive evaluation of solar cell technologies, associated loss mechanisms, and efficiency enhancement strategies for photovoltaic cells. *Energy Reports*, 3345-3366. doi:<https://doi.org/10.1016/j.egyr.2024.03.007>
- Ozawa, F. (2019). *TCI Chemicals*. Retrieved Septiembre 28, 2022, from <https://www.tcichemicals.com/TH/en/product/pick/Highly-Regioregular-P3HT>

- Pastuszak, J., & Węgierek, P. (2022). Photovoltaic Cell Generations and Current Research Directions for Their Development. *Materials*. doi:<https://doi.org/10.3390/ma15165542>
- Patel, R., & Kumar, A. (2023). Ternary catalysts: A review on their efficiency in chemical reactions. *Catalysis Today*, 152-166. doi:<https://doi.org/10.1016/j.cattod.2023.01.014>
- Pérez O., O. (2019). *Fabricación de celdas solares híbridas en absorbedores de colágenos Ag₂S, Bi₂S₃ y AgBiS₂ (Tesis de Maestría)*. Baja California, Mexico.
- Pérez, M. E., Ramos, S., & Morales, J. (2016). Ternary Materials: Advances and Applications. *Advanced Materials*, 2857-2872. doi:<https://doi.org/10.1002/adma.201505520>
- Pingarrón, J., & Sánchez, P. (n.d.). Química electroanalítica: Fundamentos y Aplicaciones. España: Editorial Síntesis .
- Piña G., M. A. (2022). *Síntesis de películas delgadas de Fe_xZn_{1-x}S vía electroquímica con potencial de aplicación en celdas solares (Tesis de Licenciatura)*. Nuevo León : Univesidad Autonoma de Nuevo León .
- Pourasl, H. H., Barenji, R. V., & Khojastehnezhad, V. M. (2023). Solar energy status in the world: A comprehensive review. *Energy reports*, 3474-3493. doi:<https://doi.org/10.1016/j.egyr.2023.10.022>
- Qi, X., Zhang, H., Li, Y., & Chen, J. (2019). Density functional theory study of the structure and properties of C-doped pyrite. *Physica B: Condensed Matter*, 168-174.
- Raghuram, H., Pradeep, S., Dash, S., Chowdhury, R., & Mazumder, S. (2016). Chitosan-encapsulated ZnS:M (M: Fe³⁺ or Mn²⁺) Quantum Dots for Fluorescent Labelling of sulphate-reducing Bacteria. *Bulletin of Materials Science*.
- Rao, T. N., & Thomas, K. G. (2009). PEDOT: A Conductive Polymer for High-Performance Applications. *Journal of Materials Chemistry*, 5750-5760.
- Rao, X., Liu, Y., & Zhang, H. (2020). Ternary Metal Oxides as Efficient Catalysts for Water Splitting. *Catalysis Today*, 82-94.
- Retana, F., Campos, J., Peña, Y., & Serrano, T. (2016). *Materiales para su aplicación en celdas solares híbridas*.
- Retana, M., & Colaboradores. (2020). *HYBRID SOLAR CELLS OF PYRITE-BASED/POLY(3-HEXYLTHIOPHENE) CORE/SHELL NANOWIRES. [Tesis de doctorado]*. Nuevo, León: Universidad Autonoma de Nuevo León. Retrieved from <http://eprints.uanl.mx/21897/>
- Riveros Urrego, S. (2013). *Síntesis y Caracterización de Poliofenos Disustituídos Regioregulares para la Aplicación en Celdas Solares Organicas[Tesis de Maestría]*. Bogota: Universidad Nacional de Colombia .
- Rohatgi, P. K., & Sahai, N. (2012). Mechanical Properties of Polymers. *Journal of Biomedical Materials Research*, 456-467.

- RTI Laboratories. (n.d.). Retrieved Julio 15, 2024, from FTIR Analysis:
<https://rtilab.com/techniques/ftir-analysis/#:~:text=Fourier%20Transform%20Infrared%20Spectroscopy%2C%20also,samples%20and%20observe%20chemical%20properties.>
- Ruíz M., L. J. (2018). *Estudio de los parametros de deposición PEDOT por via electroquímica y su aplicacion en celdas solares de perovskita con arquitectura invertida*. Bogotá: Universidad de los Andes.
- S&S Ingenieria. (2020). Retrieved Noviembre 21, 2023, from S&S Ingenieria:
<https://sysingenieria.co/28-fotoluminiscencia#:~:text=La%20Espectroscop%C3%ADa%20de%20Fotoluminiscencia%20es,un%20proceso%20llamado%20foto%20Dexcitaci%C3%B3n.>
- Sai, R., Ezzapuia, H., & Nofal, M. M. (2021). Electronic structure of iron pyrite by the LMTO_ASA method. *Results in Physics* .
- Salas Noguera, O. (2017). *FACTORES FÍSICOS Y DE DISEÑO QUE INTERVIENEN EN LA EFICIENCIA DE LOS PANELES SOLARES CONSTRUIDOS CON NUEVOS MATERIALES FOTOVOLTAICOS*. Bogota : Universidad Piloto de Colombia.
- Sanchez-de-Armas, R., & Gutierrez-Beltran, E. (2015). Nanotecnología inspirada en la naturaleza: celdas solares sensibilizadas con colorante. *Encuentros en la Biología*, 32-36.
- Santos, A., Smith, J., & Walker, P. (2018). Stoichiometric Control in Electrochemical Synthesis of Complex Alloys. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 196-202.
- Schlesinger, M., & Paunovic, M. (2010). *Modern Electroplating*. John Wiley & Sons, Inc.
- Seymour, R. B., & Carraher, C. E. (2012). *Polymer Chemistry: An Introduction* . CRC Press.
- Shi, Z., & Jayatissa, A. (2020). Preparation and characterization of cobalt-doped iron pyrite (FeS₂) thin films. *Progress in Natural Science: Materials International* , 352-359.
- Singh, B. P., Goyal, S. K., & Kumar, P. (2021). Solar PV cell materials and technologies: Analyzing the recent developments. *Materials Today: Proceedings*, 43, 2843-2849.
doi:<https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.01.003>
- Sirringhaus, H., Kawase, T., Friend, R. H., Shimoda, T., Inbasekaran, M., Wu, W., & Woo, E. P. (1999). High-resolution inkjet printing of all-polymer transistors. *Science*, 2123-2126.
doi:<https://doi.org/10.1126/science.290.5499.2123>
- Skoog, D., Holler, F., & Crouch, S. (2017). *Principles of Instrumental Analysis* (7ma Edicion ed.). Cengage Learning.
- Tlaxcaltecatl, M. E., Vásquez S, J. V., & Alonso P, M. A. (2021). Caracterización de un panel por resistencia de carga. *Revista Ingeniantes*, 55-59.

- Tremel, K., & Ludwigs, S. (2014). Morphology of P3HT in thin films in relation to optical and electrical properties. *P3HT Revisited – From Molecular Scale to Solar Cell Devices*, 39-82. doi: 10.1007/12_2014_288
- TWI Global. (2022). Retrieved Noviembre 23, 2023, from TWI Global: <https://www.twi-global.com/technical-knowledge/faqs/x-ray-diffraction>
- Uhuegbu, C. C. (2011). Spectral Selective Properties and Possible Applications of Iron Zinc Sulphide Ternary Thin Film. *J. Basic. Appl. Sci. Res.*, 307-311.
- Universidad Computense Madrid. (n.d.). Retrieved Julio 15, 2024, from Luminiscencia: <https://www.ucm.es/data/cont/media/www/pag-17833/Guiones%20de%20Nanomateriales.pdf>
- Van Krevelen, D. W., & Te Nijenhuis, K. (2009). Properties of Polymers: Their Correlation with Chemical Structure.
- Villegas, R., & Aguilar, J. L. (2021, Noviembre 09). *INECOL*. Retrieved Septiembre 30, 2022, from Instituto de Ecología A.C.: <https://www.inecol.mx/inecol/index.php/es/ct-menu-item-25/ct-menu-item-27/17-ciencia-hoy/1526-energias-renovables-en-mexico>
- Wilson, G., Al-Jassim, M., Metzger, W., Glunz, S., Verlinden, P., Xiong, G., . . . Yan, Y. (2020). The 2020 photovoltaic technologies roadmap. *Journal of Physics D: Applied Physics*. doi:10.1088/1361-6463/ab9c6a
- Xi, X. X., Cheung, T., & H.L., D. (2007). Synthesis of ternary XnxCdx-1S nanowires by thermal evaporation and the study of their photoluminescence. *Material Letters*, 128-132.
- Xu, J., Sun, M., Zhang, W., & Wang, J. (2022). Nanostructured ZnO and TiO_2 in hybrid polymer solar cells: Interface engineering and morphology control. *Nano Energy*. doi:<https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2021.106747>
- Yoo, D., Kim, J., Ko, S., & Lee, J. (2020). Interfacial engineering for high-efficiency organic and perovskite solar cells. *Nano energy*.
- Yuan, J. (2009). Polypyrrole: Synthesis and Applications. *Chemical Society Reviews*, 1431-1442.
- Yuan, W. (2016). Efficiency improvement of P3HT organic solar cells using new solvent additive. *Organic Electronics*, 163-169. doi:<https://doi.org/10.1016/j.orgel.2016.01.010>
- Zhang, Y. (2017). Conductive Polymers in Energy Storage Applications. *Energy & Environmental Science*, 1258-1280.
- Zoski, C., & Mirkin, M. (2000). *Cyclic Voltammetry: Simulation and Analysis of Reaction Mechanism*. Wiley-VCH.