

## **Seminarios del Doctorado en Ciencias Exactas e Ingeniería 2023**

**Título de Tesis:** Estudio del transporte y dinámica de carga en semiconductores nanoestructurados para su aplicación en celdas solares.

**Tesista:** Nelson Leandro Paz.

**Directores:** David Mario Comedi y Nadia Celeste Vega

### **Resumen**

En el escenario energético actual de crisis de hidrocarburos debido a su inminente agotamiento dentro de pocos años, así como sus cada vez más graves efectos contaminantes y de efecto invernadero, se presenta la creciente necesidad de buscar nuevos materiales y tecnologías con el fin de desarrollar dispositivos basados en energías renovables para resolver parte de esta problemática global.

En este trabajo de tesis, se busca generar conocimiento sobre la física de semiconductores nanoestructurados para su aplicación en el desarrollo de celdas solares de tercera generación. Para ello, se estudiará el transporte eléctrico de electrodos de semiconductores nanoestructurados, con superficies modificadas o con diferentes grados de dopaje, en diferentes condiciones de medición y realizará el adecuado modelado teórico de estos electrodos nanoestructurados a partir del uso de diferentes herramientas de análisis matemático.

A continuación, se va a contar sobre el avance realizado en este último año en lo que se refiere a planificación y ejecución de experimentos en el Laboratorio de Nanomateriales y el Laboratorio de Física del Solido de la FACET-UNT, e informar sobre los cursos de posgrado realizados en este periodo.

Hasta el momento, las muestras de semiconductores nanoestructurados estudiadas en la parte experimental son: una muestra de nanohilos de ZnO en sustrato de silicio, que fue fabricada por un abordaje bottom up, mediante la técnica de crecimiento de transporte de vapor y condensación (TVC); y tres muestras de films de nanopartículas de ZnO en sustrato de vidrio recubierto de óxido de estaño con flúor (FTO), que fueron fabricadas por un abordaje bottom up, pero desde la fase líquida, mediante la técnica de síntesis solvotermal, variando la concentración de precursores químicos (Acetato de Zinc y Hexametilentetramina).

De la muestra de nanohilos de ZnO en silicio, se realizaron mediciones eléctricas. Se midieron curvas I-V en oscuridad y con iluminación de LED UV, de resistencia eléctrica vs tiempo en oscuridad e iluminadas con luz visible y LED UV, de conductancia eléctrica vs el recíproco de la temperatura en vacío y oscuridad y de resistencia vs longitud de onda de la luz incidente. De los resultados de las diferentes mediciones se observó: la cuasi-persistencia de la fotoconductividad de la muestra al iluminar por un tiempo con el LED UV, la disminución de la resistencia de la muestra con iluminación UV, la disminución de la resistencia de la muestra al pasar de aire a vacío y la disminución de la conductancia de la muestra a medida que se disminuye la temperatura. Lo cual condice con lo que ya

se conoce de la literatura científica sobre la conductividad y la fotoconductividad de muestras basadas en ZnO.

De las tres muestras de films de nanopartículas de ZnO en vidrio recubierto con FTO, se realizaron caracterizaciones estructural (SEM) y óptica (fotoluminiscencia, PL). De las caracterizaciones de las mismas se observó en general un depósito homogéneo de nanopartículas de ZnO en el sustrato, bandas de emisión en los espectros de PL que se encuentran centradas en diferentes longitudes de onda en el verde, además de una banda de emisión en el UV. A medida que se aumenta la concentración de precursores aumenta el tamaño de las nanopartículas, hay un mayor recubrimiento de la superficie del sustrato y un desplazamiento hacia el rojo (red shift) de la banda de emisión UV. Esto comprueba que esta técnica de síntesis permite conseguir nanomateriales con propiedades deseadas con sólo ajustar parámetros de síntesis.

Actualmente, se está trabajando para depositar contactos eléctricos sobre las muestras, a fin de estudiar sus propiedades eléctricas y fotoeléctricas.

En paralelo a la parte experimental, se realizaron y aprobaron cuatro cursos de posgrado: *Química Computacional Aplicada a la Determinación de Estructuras Moleculares*, en el cual se estudiaron las propiedades estructurales, conformacionales y espectroscópicas tanto de sistemas aislados como en solución mediante el método Ab-initio con la aproximación Hartree-Fock y la teoría del funcional de la densidad (DFT) con la aproximación B3LYP empleando los programas Gaussian y GaussView; *Introducción a los métodos de modelado computacional en ciencia de los materiales*, en el cual se estudiaron las propiedades estructurales y electrónicas de sistemas mediante el método de ondas planas y pseudopotenciales, basado en DFT con diferentes aproximaciones del funcional de correlación e intercambio empleando los programas Quantum ESPRESSO y XCrySDen; *Métodos Computacionales para el Estudio de Estructuras Moleculares y Atómicas*, en el cual se trabajaron con aplicaciones del método de Montecarlo muestreo simple (percolación, modelos de crecimiento de LDA y deposición balística etc.) y con aplicaciones del método de Montecarlo muestreo pesado con algoritmo de Metrópolis y dinámica de Glauber (fenómeno de adsorción superficial, decoración de superficies nanoestructuradas, electrosorción-deposición en un electrodo, etc.); *Escuela de Nanociencia y Nanotecnología ENN 2022*, en la cual se estudiaron diferentes técnicas de crecimiento y caracterización de films delgados.