

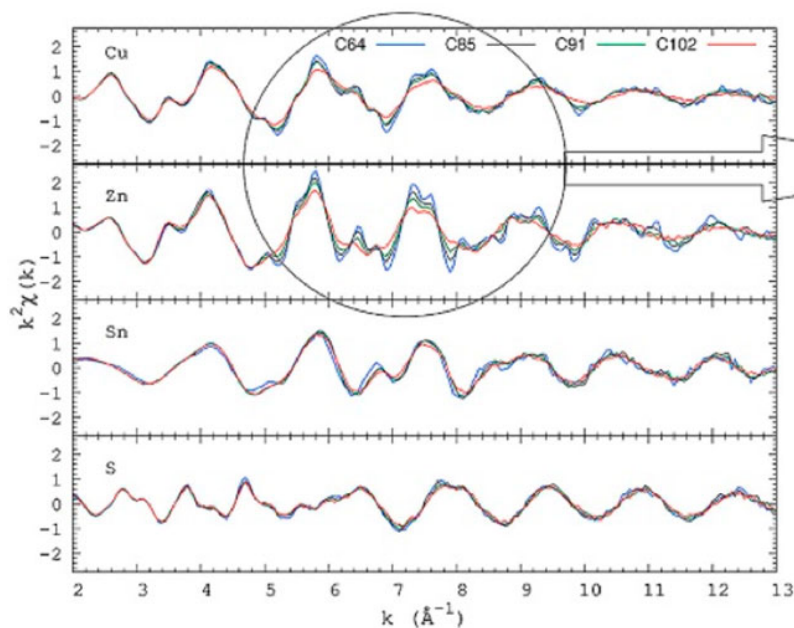
# UN MODELO DE ESTRUCTURA ATÓMICA REAL EN EL $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ MEDIANTE ESPECTROSCOPIA DE ABSORCIÓN DE RAYOS- X

*Posted on 13 agosto, 2019*

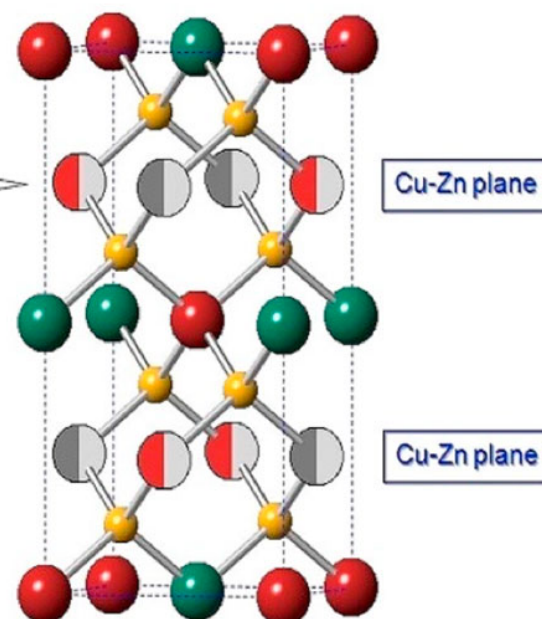
Los semiconductores con estructura kesterita, como el  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  (CZTS), son promisorios para reemplazar la actual generación de materiales absorbentes de luz para celdas solares. Éstos tienen la ventaja de estar constituidos por elementos abundantes, de bajo costo y ambientalmente amigables [1]. En colaboración con investigadores de la Universidad Marista de Mérida, el Instituto Politécnico Nacional y la Universidad de Stanford, se reportó un estudio completo de la estructura atómica local alrededor de cada una de las especies atómicas en películas delgadas de CZTS con estequiometrías deficientes en cobre, que son las que arrojan mejores eficiencias en dispositivos fotovoltaicos. Las muestras fueron asimismo caracterizadas por espectroscopia Raman y Difracción de Rayos-X mostrando la fase de Kesterita desordenada [2].

La espectroscopia de absorción de rayos-X permitió revelar y cuantificar micro fases secundarias en este material cuaternario, tales como ZnS o SnS, que no son detectables por otras técnicas como difracción de rayos-X hecha en laboratorio, y que demandan tratamientos para removerlas ya que éstas pueden impactar negativamente en la eficiencia en celdas solares. Se mostró que el desorden en la estructura está relacionada a los planos Cu-Zn y no a los planos Cu-Sn. Este desorden es intrínseco al CZTS. El análisis estructural de las muestras develó desviaciones reales respecto a la cristalografía en cuanto a distancias interatómicas promedios, que se contraen o expanden, y está vinculado a las diferencias de radio atómico. Es notable en el estudio que la muestra con estequiometría más cercana a la del CZTS con mejor desempeño en celdas fotovoltaicas  $\text{Cu}/(\text{Zn}+\text{Sn}) \sim 0.8$  se observó un mejor ordenamiento estructural que en otras proporciones.

## EXAFS EVIDENCE



## Disordered Structure



Por último, el desorden promedio en este material es producto del desplazamiento de las posiciones atómicas de los elementos constituyentes, y en primera aproximación, este estudio microscópico debe ser considerado como punto de partida para mejorar las propiedades macroscópicas de las películas para futuras aplicaciones [3].

## Referencias:

- [1] D.B. Mitzi, O. Gunawan, T.K. Todorov, K. Wang, S. Guha, *The path towards a high-performance solution-processed kesterite solar cell*, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*. 95 (2011) 1421–1436. doi:10.1016/j.solmat.2010.11.028.
- [2] R.A. Colina-Ruiz, J.A. Hoy-Benitez, J. Mustre de León, F. Caballero-Briones, F.J. Espinosa-Faller, *Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> thin films prepared with a Joule-heated graphite closed-space sulfurization system*, *Appl. Phys. A Mater. Sci. Process.* 125 (2019). doi:10.1007/s00339-019-2598-5.
- [3] R.A. Colina-Ruiz, J. Mustre de León, J.S. Lezama-Pacheco, F. Caballero-Briones, M. Acosta-Alejandro, F.J. Espinosa-Faller, *Local atomic structure and analysis of secondary phases in non-stoichiometric Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> using X-ray absorption fine structure spectroscopy*, *J. Alloys Compd.* (2017). doi:10.1016/j.jallcom.2017.04.191.