

La Gaceta

ÓRGANO OFICIAL

DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

////////////////////////////////////
AÑO LVII LIMA 27 DE JUNIO DE 2021 NÚMERO 064
////////////////////////////////////

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

Escuela Central de Posgrado

Se invita a la comunidad universitaria a participar de la videoconferencia de la defensa pública virtual de la Tesis de **DOCTORADO EN CIENCIAS CON MENCIÓN EN FÍSICA**, del M.Sc. Arnold Anthony Huamán Aguirre, a realizarse el día jueves 01 de julio de 2021, a las 12 h 00.

TÍTULO DE LA TESIS:

**“ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE CELDAS SOLARES
BASADAS EN PELÍCULAS NANOESTRUCTURADAS DE TiO₂
SENSIBILIZADAS CON COLORANTES NATURALES EXTRAÍDOS DEL
Zea Mays y de la Bixa Orellana”.**

ASESORA:

Dra. MARÍA ESTHER QUINTANA CÁCEDA

Profesora Principal de la Facultad de Ciencias Universidad Nacional de Ingeniería

RESUMEN

Las celdas solares sensibilizadas con colorante (CSSC) son dispositivos de conversión de energía solar a eléctrica atractivos por su fabricación flexible y de bajo costo. Están basadas en la sensibilización de un semiconductor de banda prohibida amplia que consiste en una película nanoporosa con una gran área superficial. El colorante, ubicado sobre la superficie de la película, cumple el importante rol de absorber la luz e inyectar electrones a la banda de conducción del semiconductor. Típicamente, se emplean compuestos inorgánicos basados en complejos de Rutenio como moléculas sensibilizadoras para la CSSC. Sin embargo, el uso de estos colorantes sintéticos tiene desventajas como el alto costo y su toxicidad. En contraparte, los colorantes naturales son de fácil extracción y sus componentes orgánicos, que también realizan la absorción de luz solar, pueden ser utilizados como sensibilizadores para la CSSC. En el presente trabajo de tesis se extrajeron colorantes a partir del Zea Mays y de la Bixa Orellana, productos naturales

oriundos del Perú, para la sensibilización de películas nanoporosas de dióxido de titanio (TiO_2). Las CSSCs fabricadas fueron estudiadas desde el punto teórico y experimental en dos principales etapas. En la primera, se realizó la simulación computacional de las moléculas de colorante mediante el método TD-DFT y la Simulación Dinámica Molecular (SDM) de la interacción entre el colorante y el TiO_2 . El análisis se complementó con las caracterizaciones ópticas de UV-Visible e infrarrojo (FTIR). En la segunda etapa se estudiaron los procesos de transporte y recombinación que ocurren en la celda solar. Para ello se recurrieron a los métodos de medidas transitorias de pequeña modulación, extracción de cargas y espectroscopía de impedancia.

Las simulaciones computacionales determinaron que la cinidin-3-glucósida (C3G), principal componente del Zea Mays, sensibiliza la película de TiO_2 mediante un anclaje monodentado a través de uno de los grupos hidroxilo. Por su parte, la bixina, que compone a la Bixa Orellana, realiza el anclaje mediante el grupo carboxilo y mostró además una tendencia a la formación de aglomerados sobre el TiO_2 . La técnica de extracción de carga permitió establecer la distribución de estados trampa de las películas sensibilizadas. Las medidas transitorias de pequeña-modulación brindaron información acerca de las constantes de tiempo y del coeficiente de difusión. Se concluyó que la película sensibilizada con el C3G presentó una mayor densidad de estados trampa y un menor nivel en la banda de conducción lo que derivó en menores tiempos de vida del electrón. La película sensibilizada con la Bixina presentó una mejor difusión para sus portadores de carga libres. Esto fue corroborado con la espectroscopía de impedancia, en el que los parámetros de longitud de difusión señalaron a la celda con Bixina con una mejor eficiencia de recolección de cargas. Todos los resultados estuvieron en concordancia con las curvas características de corriente – voltaje y con la curva espectral de eficiencia de conversión de fotones incidentes a electrones (IPCE).

