

UNIVERSIDAD DE SONORA

DEPARTAMENTO DE INVESTIGACIÓN EN FÍSICA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA EN TECNOLOGÍA
ELECTRÓNICA

“ESTUDIO TEÓRICO DE ESTRATEGIAS PARA EL INCREMENTO DE EFICIENCIA EN CELDAS SOLARES”

Tesis presentada como requisito para obtener el grado de:
DOCTOR EN CIENCIAS EN ELECTRÓNICA

Presenta:

M. Sc. RAFAEL AUSTREBERTO SABORY GARCÍA

Director de Tesis:

DR. ARMANDO GREGORIO ROJAS HERNÁNDEZ

Hermosillo, Sonora

Enero 2019

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

AGRADECIMIENTO

Quiero expresar mi más sincera gratitud a mi director de investigación el Dr. Armando Gregorio Rojas Hernández por el continuo apoyo durante mi tesis de doctorado. De igual manera quiero agradecerle por su paciencia, motivación y por compartir su conocimiento durante este proceso de preparación para la obtención del grado de Doctor.

Así mismo, quiero agradecer al resto del comité de revisión de Tesis: la Dra. Alicia Vera Marquina, el Dr. Dainet Berman Mendoza, el Dr. Roberto Gómez Fuentes y Dr. Rafael Ramírez Bon.

Por último, quiero agradecer a mi familia, por estar siempre apoyándome y motivándome.

TABLA DE CONTENIDO

RESUMEN.....	1
CAPÍTULO 1.- INTRODUCCIÓN.....	2
CAPÍTULO 2.- TEORÍA ELECTROMAGNÉTICA.....	6
2.1.- Ecuaciones de Maxwell	7
2.1.1.- Ecuaciones de Maxwell en su Forma General.....	7
2.1.2.- Ecuaciones de Maxwell en un Medio Simple.....	9
2.2.- Ondas Planas.....	12
2.2.1.- Ecuaciones de Onda.....	12
2.2.2.- Ondas Planas Uniformes.....	14
2.2.3.- Frente de Onda.....	18
2.3.-Nano Partículas Metálicas y Superficie de Plasmones	19
2.3.1.- Modelo Semi Clásico Simple de Nano Partículas Metálicas.....	21
CAPÍTULO 3.- PROPIEDADES ÓPTICAS Y ELÉCTRICAS DE UNA CELDA SOLAR TIPO HETERO-ESTRUCTURA.....	23
3.1.- Propiedades de la Luz	23
3.1.1.- Ondas de Luz	25
3.2.- Tiempo de Vida de los Portadores y Velocidad de Recombinación.....	27
3.3.- Movilidad de los Portadores	34
3.3.1.- Movilidad de Arrastre	35
3.4.- Estructura de Banda en los Semiconductores.....	36
3.4.1.- Distribución en el momento Espacial	37
3.4.2.- Distribución de Densidad de Estados	39
3.5.- Propiedades Ópticas de una celda solar	40
3.5.1.- Transmisión y Reflexión.....	40
3.5.2.- Eficiencia cuántica Interna.....	42
3.5.3.- Derivación de la Eficiencia Cuántica Interna	43
3.6.- Propiedades Eléctricas de una Celda Solar.....	46
3.6.1.- Corriente en Corto Circuito	47

3.6.2.- Densidad de Corriente en oscuridad	48
3.6.3.- Voltaje de Circuito Abierto.....	50
3.6.4.- Factor de Llenado FF	50
3.6.5.- Resistencia Característica	51
3.6.6.- Eficiencia de una Celda Solar η	52
<i>CAPÍTULO 4.- SIMULACIÓN Y RESULTADOS DE LA HETERO-ESTRUCTURA .</i>	<i>54</i>
4.1.- Materiales Utilizados Para la Hetero-estructura.....	54
4.1.1.- Óxido de Indio y Estaño ITO.....	55
4.1.2.- Sulfuro de Cadmio CdS	57
4.1.3.- Sulfuro de Plomo PbS.....	58
4.1.4.- Telururo de Cadmio CdTe	59
4.1.5.- Seleniuro de Cadmio CdSe	61
4.2.- Cálculo de la Eficiencia Óptica de la Celda Solar	62
4.2.1.- Cálculo del Coeficiente de Transmisión	63
4.2.2.- Estimación de la Eficiencia Cuántica Interna	64
4.3.- Cálculo de los Parámetros Eléctricos de la Celda Solar	68
4.3.1.- Determinación de la Densidad de Corriente de Corto Circuito J_{SC} y Densidad de Corriente en Oscuridad J_d	68
4.3.2.- Curva Característica J-V, Densidad de Potencia y Factor de Llenado	69
4.3.3.- Eficiencia Máxima de las Celdas Solares CdS/PbS, CdS/CdTe y CdS/CdSe... 71	
<i>CAPÍTULO 5.- EFECTOS EN LA DISTRIBUCIÓN DEL CAMPO ELÉCTRICO DEBIDO A LA VARIACIÓN DE GEOMETRÍAS EN CELDAS CON NANO-HUECOS</i>	<i>73</i>
.....	73
5.1- Diseño del Modelo de Simulación.....	73
5.2.- Simulación con Nano Partículas de Oro.....	74
5.3.- Simulación de Celda Unitaria de CdSe con Variación de Nano Partículas Metálicas Nobles: Platino Pt, Mercurio Hg, Titanio Ti y Paladio Pl.	78
<i>CAPÍTULO 6.- CONCLUSIONES Y TRABAJO A FUTURO</i>	<i>83</i>
<i>REFERENCIAS</i>	<i>86</i>

TABLA DE FIGURAS

CAPÍTULO 1.- INTRODUCCIÓN

Figura 1. 1.- Gráfica comparativa de eficiencias de diversos modelos y tecnologías de celdas solares nrel(https://www.energy.gov/eere/solar/downloads/research-cell-efficiency-records).....	3
--	---

CAPÍTULO 2.- TEORÍA ELECTROMAGNÉTICA

Figura 2. 1.- Representación gráfica del campo eléctrico y magnético de una onda plana viajando en el espacio libre.....	14
Figura 2. 2.- Diagrama de un frente de onda plana.....	18
Figura 2. 3.- Superficie de frente de onda esférica.....	19

CAPÍTULO 3.- PROPIEDADES ÓPTICAS Y ELÉCTRICAS DE UNA CELDA SOLAR TIPO HETERO-ESTRUCTURA

Figura 3. 1.- Luz en el espectro electromagnético.....	24
Figura 3. 2.- Representación de la luz como una onda electromagnética; en la figura a) se puede observar la luz con los componentes del vector del campo magnético, vector del campo eléctrico y el vector de velocidad. En la figura b) se denota la señal como frentes de onda planos, en los eje x, y y z, de igual manera con sus componentes vectoriales E, H y V.....	26
Figura 3. 3.- Representación del Tiempo de Vida de los portadores; en (a) se puede apreciar la recombinación τ_r en el volumen del dispositivo, así como la velocidad de recombinación en la superficie S_r ; de manera similar en (b) se puede observar el Tiempo de vida de generación τ_g y la velocidad de generación de superficie S_g	28
Figura 3. 4.- Procesos de recombinación Shockley Read Hall; A_e representa la captura de un electrón, mientras A_h hace referencia a la captura de un electrón. [17].....	30

Figura 3. 5.- Proceso de Recombinación de Banda a Banda. [17].....	31
Figura 3. 6.- Proceso de Recombinación Auger. Se observa C_e que representa el caso para dos electrones y un hueco; de manera similar, C_h , representa el caso para cuando se tienen dos huecos y un electrón [17].....	33
Figura 3. 7.- Comportamiento Parabólico de la Energía del electrón con respecto a su momento, en negro se muestran los saltos discretos, mientras que en rojo se representa el valor casi continuo.....	38
Figura 3. 8.- Energía vs Momento en un sistema de dos bandas prohibidas directas; En la figura se puede observar la Banda de Conducción con una parábola positiva con el punto mínimo en Energía de banda prohibida. De igual manera, se puede observar la Banda de valencia como una parábola negativa, en representación de la emisión de fotones.....	39
Figura 3. 9.- Modelo equivalente de circuito eléctrico para una celda solar.....	46
Figura 3. 10.- Curva característica I-V de una celda solar.....	47
Figura 3. 11.- Representación del Factor de Llenado FF dentro de una curva J-V.....	51
Figura 3. 12.- Representación de la Resistencia Característica dentro de una curva J-V...	52

CAPÍTULO 4.- SIMULACIÓN Y RESULTADOS DE LA HETERO-ESTRUCTURA

Figura 4. 1.- Hetero-estructura modelada en el SMM. La estructura está compuesta por Vidrio, ITO, CdS, PbS/CdTe/CdsE y Al.....	55
Figura 4. 2.- Índice de refracción n para el ITO (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].....	56
Figura 4. 3.- Coeficiente de extinción k para el ITO (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].....	56
Figura 4. 4.- Índice de refracción n para el CdS (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].....	58

Figura 4. 5.- Coeficiente de extinción k para el CdS (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].....	58
Figura 4. 6.- Índice de refracción n para el PbS (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].....	59
Figura 4. 7.- Coeficiente de extinción k para el PbS (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].....	59
Figura 4. 8.- Índice de refracción n para el CdTe (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].....	60
Figura 4. 9.- Coeficiente de extinción k (interpolado) para el CdTe utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].....	61
Figura 4. 10.- Índice de refracción n para el CdTe (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].....	62
Figura 4. 11.- Coeficiente de extinción k para el CdSe (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].....	62
Figura 4. 12.- Coeficiente de Transmisión para los tres modelos: Cds/Pbs, Cds/CdTe y Cds/CdSe.....	64
Figura 4. 13.- Concentración de donadores y aceptores Na-Nd para el PbS (Azul), CdTe (Amarillo) y CdSe (Rojo).....	65

Figura 4. 14.- Componentes de difusión a) y de deriva b) para el modelado de la celda solar con la unión CdS/PbS. El valor de W fue fijado a 0.28 μm . La Figura muestra los parámetros de la eficiencia cuántica interna en el rango de 300 a 900 nm, teniendo resultados más óptimos cuando el grosor de la capa activa es de 2 μm 66

Figura 4. 15.- Componentes de Difusión a) y de Arrastre b) para el modelado de la celda solar con unión CdS/CdTe con un valor fijado para a) de 0.26 μm . Se denota una mejor eficiencia cuando el grosor de la capa activa obtiene un valor mayor..... 67

Figura 4. 16.- Componentes de difusión a) y de deriva b) para el modelo de CdS/CdSe. El Valor de la región de carga espacial W fue establecido como $W=0.56 \mu\text{m}$ para la estimación del componente de difusión.....67

Figura 4. 17.- Curva J-V a) y máxima densidad de potencia de salida b) para la unión CdS/PbS, en función del Voltaje..... 70

Figura 4. 18.- Curva J-V a) y máxima densidad de potencia de salida b) para la unión CdS/CdTe, en función del Voltaje.....70

Figura 4. 19.- Curva J-V a) y máxima densidad de potencia de salida b) para la unión CdS/CdSe, en función del Voltaje..... 70

CAPÍTULO 5.- EFECTOS EN LA DISTRIBUCIÓN DEL CAMPO ELÉCTRICO DEBIDO A LA VARIACIÓN DE GEOMETRÍAS EN CELDAS CON NANO-HUECOS

Figura 5. 1.- Modelado de la celda unitaria para la deposición de nano partículas a). La variación de materiales se hace tanto de la estructura base, como la de los metales utilizados como nano partículas. En b) se observa como la celda es formada por las celdas unitarias, en un arreglo 5x5.....74

Figura 5. 2.- Variación del campo eléctrico para la celda unitaria con un ángulo de incidencia de 90° a); variación del campo eléctrico con un ángulo incidente de 95° b). Ambos casos con una longitud de onda de 800 nm..... 75

Figura 5. 3.- Se observa la adición de nano partículas de oro al diseño original con variación de tamaños: 55x35 nm en a); de igual manera se aprecia el campo eléctrico para una celda unitaria con nano partículas uniformes con dimensión 100x55 nm en b). Ambos casos son simulados con una frecuencia de 574 THz en donde se mostró una mayor intensidad..... 76

Figura 5. 4.- Se muestran los resultados en a) del campo eléctrico para la estructura modificada con bordes más suaves y con nano partículas de oro de 100x55 nm. La estructura mostrada corresponde a un ángulo de incidencia de 90° con una frecuencia de 574 thz. La parte b) de la figura muestra el campo eléctrico para una longitud de onda de 444 nm.....	77
Figura 5. 5.- Dispersión del campo eléctrico de la celda unitaria de seleniuro de cadmio con nano partículas de platino. La configuración corresponde a un ángulo de incidencia de 60° a una frecuencia de 474 THz.....	80
Figura 5. 6.- Dispersión del campo eléctrico de la celda unitaria de seleniuro de cadmio con nano partículas de mercurio. La configuración corresponde a un ángulo de incidencia de 60° grados a una frecuencia de 474 THz.....	80
Figura 5. 7.- Dispersión del campo eléctrico de la celda unitaria de seleniuro de cadmio con nano partículas de titanio. La configuración corresponde a un ángulo de incidencia de 60 grados a una frecuencia de 474 THz.....	81
Figura 5. 8.- Dispersión del campo eléctrico de la celda unitaria de seleniuro de cadmio con nano partículas de paladio. La configuración corresponde a un ángulo de incidencia de 60° a una frecuencia de 474 THz.....	81

TABLA DE TABLAS

Tabla 4. 1.- Set de parámetros utilizados para el cálculo de la Eficiencia Cuántica Interna EQI	68
Tabla 4. 2.- Parámetros obtenidos por el SMM para la hetero-estructura con unión CdS/PbS	71
Tabla 4. 3.- Parámetros obtenidos por el SMM para la hetero-estructura con unión CdS/CdTe.....	71
Tabla 4. 4.- Parámetros obtenidos por el SMM para la hetero-estructura con unión CdS/CdSe	71

RESUMEN

Como primera parte de este trabajo presentado, un modelo matemático es desarrollado bajo la teoría de Sah y Noyce para analizar, comprender y predecir el comportamiento de celdas solares en configuración de hetero-estructuras.

La celda está principalmente basada en la aplicación de 4 películas delgadas de diferentes materiales: Vidrio, Óxido de Indio y Estaño ITO, Sulfuro de Cadmio CdS, una capa activa, la cual es variada a través del estudio, y un contacto trasero. El estudio se enfoca en aplicar el análisis óptico y eléctrico para definir qué parámetros involucrados son los más críticos al momento de determinar y mejorar la eficiencia. Algunos de los parámetros considerados son el ancho de la región de carga espacial, concentración de la diferencia entre donadores y aceptores y el grosor de la capa activa, entre otros. La eficiencia máxima η de la celda es calculada usando un Sistema de Modelado Matemático (SMM) desarrollado en Matlab. Utilizando el SMM la eficiencia cuántica interna también es calculada y estudiada.

El grosor de la capa efectiva varía desde 0.5 a 2 μm , utilizando el SMM tres casos de materiales como capa activa son estudiados: PbS, CdTe, y CdSe. El análisis se hace bajo condiciones de AM 1.5 directo.

La segunda parte de esta tesis consta de un estudio el cual tiene como objetivo encontrar correlaciones entre diferentes materiales para retardar el efecto de recombinación entre electrones y huecos, con el fin de obtener una alternativa competitiva de una celda solar. El modelo consiste en una estructura de Seleniuro de Cadmio (CdSe), la cual busca remplazar estructuras de Silicio, y al mismo tiempo se adhieren tres nano partículas de un metal noble diferente en cada celda unitaria modelada. Este estudio está basado en simulaciones utilizando COMSOL. Las nano partículas son puestas de la siguiente manera: dos en la parte superior de la estructura de CdSe (izquierda y derecha) y una al fondo del nano hueco. Los metales utilizados como nano partículas son: Titanio (Ti), Paladio (Pd), Platino (Pt) y Mercurio (Hg). Finalmente, el comportamiento del campo eléctrico de cada estructura es obtenido.

CAPÍTULO 1.- INTRODUCCIÓN

Las características de corriente y voltaje de las uniones pn han sido de gran interés y han sido estudiadas por un gran número de autores. Debido a lo anterior, se han investigado diferentes opciones respecto a las uniones pn basadas en silicio, ya que se ha demostrado que a temperatura ambiente las características eléctricas medibles se desvían de manera considerable en comparación de la predicha teóricamente [1,2].

Durante los últimos 20 años las celdas solares basadas en películas delgadas policristalinas de CdS/CdTe fabricadas en sustratos de vidrio han sido consideradas como uno de los modelos más promisorios para aplicaciones a grande escala de recolección de luz de celdas solares. Diferentes modelos han sido caracterizados a través de estos últimos años, tales como la inserción de nano partículas de metales nobles a las celdas con pozos cuánticos de silicio y aire, tecnología de películas delgadas, concentradores multiunión, celdas cristalinas de Silicio, por mencionar algunos.

Las ventajas de utilizar celdas de películas delgadas basadas en semiconductores sensibilizados es que permiten la integración de configuración de dispositivos de bajo costo y ofrecen una respuesta espectral ancha, la cual puede ser también utilizada en el infrarrojo y cerca del infrarrojo.

La eficiencia baja conseguida con respecto a la teórica estimada en el rango de 28-30% es debido, principalmente, a los problemas tecnológicos de fabricación junto con la falta de conocimiento científico sobre el proceso que ocurre entre las uniones de los materiales seleccionados al momento de diseñar estructuras heterogéneas. Un incremento en la eficiencia de celdas solares se ha reportado recientemente [3,4,5,6,7].

Por otra parte, se está comenzando a poner especial atención hacia las celdas solares basadas en sensibilización de puntos cuánticos (QDSCs) dado que los puntos cuánticos exhiben ventajas atractivas, como un alto coeficiente de extinción y costos de fabricación bajos. Para este tipo de celdas solares, la eficiencia se encuentra en etapas tempranas, registrándose hasta el 2004 una eficiencia en el rango de 4-7%.

Otra de la ventaja que es importante mencionar es que los elementos de tipo n pueden ser presentados en diversas formas, tales como nano partículas, nano cables y películas delgadas.

Aún tras encontrar unos cuantos reportes publicados, no existe basta información en la literatura. La Figura 1.1 muestra cómo ha sido el crecimiento de la eficiencia a través de los años dependiendo el tipo de su configuración. Se puede observar que la delantera la llevan las celdas de tipo de multi unión (morado) con un 46% de eficiencia a nivel laboratorio.

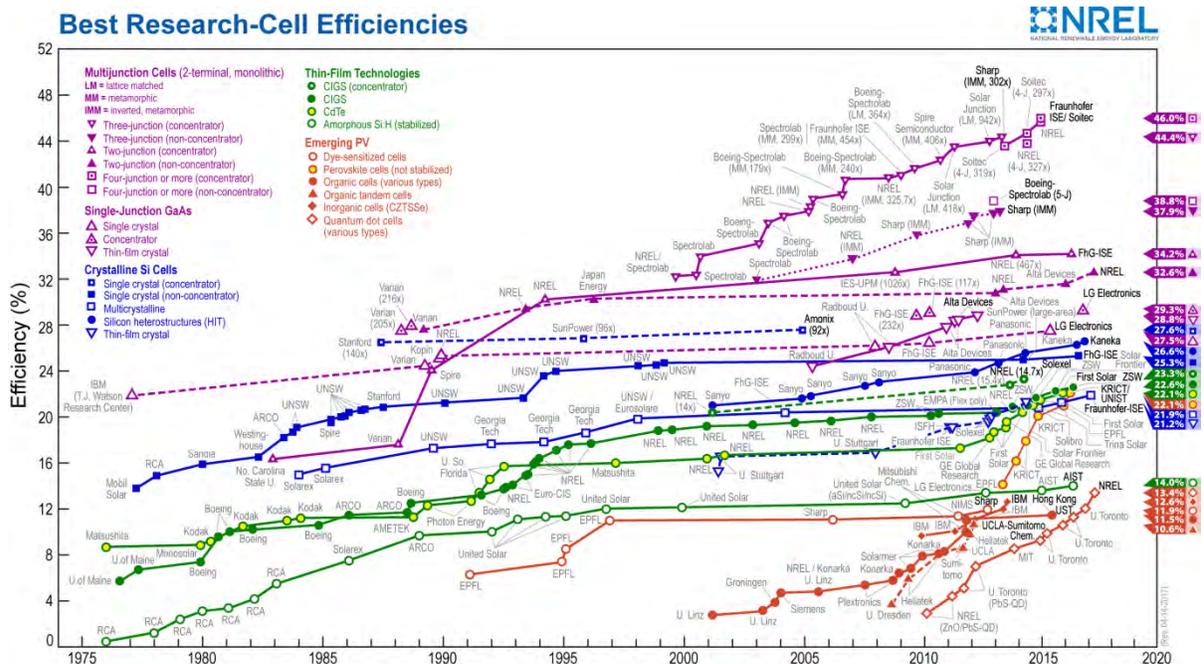


Figura 1. 1.- Gráfica comparativa de eficiencias de diversos modelos y tecnologías de celdas solares NREL (<https://www.energy.gov/eere/solar/downloads/research-cell-efficiency-records>).

Como primer trabajo de esta tesis se hace un estudio comparativo para determinar la eficiencia máxima η . El estudio corresponde a una comparación analítica a base de la teoría en el estado del arte de tres diferentes materiales semiconductores correspondientes a los grupos IV y II-VI utilizados para celdas solares. Los resultados son comparados con investigaciones reportadas con anterioridad, obteniendo resultados similares.

Una capa de CdS es utilizada como ventana con tres diferentes material con anchos de banda distintos y diferentes coeficientes de extinción. Dichos materiales son: Sulfuro de Plomo (PbS), Teluro de Cadmio (CdTe) y Seleniuro de Cadmio (CdSe).

Estos materiales son utilizados como capas activas. Las multireflexiones a través de todas las capas que componen la hetero-estructura, al igual que la absorción entre la unión de las capas ITO/CdS han sido consideradas para los tres casos.

El PbS ha sido seleccionado dado que es un semiconductor con una banda prohibida estrecha y tiene la habilidad de absorber energía cerca del rango infrarrojo. A su vez, el CdTe es utilizado debido a sus características cuasi óptimas como material absorbedor (alrededor del 90%). Finalmente, el CdSe ha sido elegido debido a su límite de absorción alto de 1.7 eV, su facilidad de crecimiento de cristales y por su uso actual en aplicaciones electrónicas.

Así mismo la Nanotecnología se ha vuelto en los últimos años un área de investigación con gran importancia en el área científica. El gran interés es principalmente debido a las aplicaciones que se han desarrollado para el mejoramiento de dispositivos orientados a la optoelectrónica y al mejoramiento de respuesta de dispositivos electrónicos.

La segunda parte de la tesis consiste en la simulación de estructuras con pozos cuánticos por medio de celdas unitarias y el depósito de nano partículas de metales nobles con el fin de encontrar alternativas confiables para las celdas basadas en Silicio que dominan actualmente el mercado.

Se ha demostrado [1, 2] que la adición de nano partículas de oro ayuda de manera significativa a la absorción de energía solar, llegando hasta una eficiencia de 33%. En este trabajo se busca una alternativa de adición de nano partículas NP de diferentes materiales; el modelado de las nano partículas se hace en suposición de estructuras esféricas y el tamaño se relaciona con los niveles permitidos de energía de acuerdo con el tamaño del pozo [8].

Como primer análisis se determinó diseñar una estructura basada en Silicio para realizar la comparación de cómo afecta la dispersión del campo eléctrico al tener o no nano partículas. En este caso se depositaron 3 nano partículas de oro en una celda unitaria y se hizo la comparación del mismo modelo al no tener dichas partículas. Posteriormente, se establecieron variaciones en la geometría de la estructura para estudiar el impacto producido por la conformación geométrica de la celda unitaria.

Tras obtener los primeros resultados, como segunda parte, se procedió a intercambiar el material de la estructura básica de la celda unitaria de Silicio por Seleniuro de Cadmio,

con el fin de encontrar alternativas y correlaciones que aumenten la dispersión del campo eléctrico entre las nano partículas de diferentes metales y el CdSe, aumentando la absorción de la luz incidente. Los metales utilizados como nano partículas para este análisis fueron Titanio, Paladio, Platino y Mercurio.

Tras la introducción de este trabajo, en el capítulo 2 se cubrirá la teoría básica de electromagnetismo, la cual sustenta los principios de la resonancia de plasmón superficial utilizada en el modelado y diseño de las celdas solares con NP presentadas en este trabajo. Se presentan de manera general la representación de las Ecuaciones de Maxwell, así como una breve explicación de la propagación de ondas en el espacio libre y cierra con una introducción a la teoría de plasmones de superficie.

Así mismo, el capítulo 3 abarca la teoría las propiedades ópticas y eléctricas de las celdas solares de heteroestructura, tratando temas de los principales parámetros necesarios para el diseño de las mismas. Entre los parámetros que cubre este capítulo se encuentra la eficiencia cuántica interna, recombinación, factor de llenado, eficiencia final, por mencionar solo algunos.

El capítulo 4 y 5 muestran la metodología utilizada y el desarrollo para el modelado de ambas celdas solares estudiadas en esta tesis: celda solar de hetero estructura y celda solar con NP respectivamente. Los capítulos cubren los modelos utilizados, así como los resultados obtenidos para cada modelo y las comparaciones estudiadas.

Finalmente el capítulo 6 consta de las conclusiones obtenidas tras la investigación, modelado, simulación, comparación y estudio realizado. De igual manera, se expone la sugerencia sobre el trabajo a futuro que se tiene en mente para la continuación de estos proyectos.

HIPÓTESIS

¿Es posible aumentar y controlar la eficiencia de las celdas solares de hetero estructura por medio de la configuración de parámetros, tales como el grosor de la capa activa y la concentración de donadores y aceptores?

CAPÍTULO 2.- TEORÍA ELECTROMAGNÉTICA

En este capítulo se tratarán las teorías básicas del comportamiento electromagnético que corresponden al diseño de una celda solar. La teoría se basa principalmente en los parámetros y comportamientos que intervienen en la eficiencia tanto óptica como eléctrica de una celda solar. Se comenzará con una breve presentación de los conceptos básicos de cómo las ondas son generadas, tales como la su propagación en diferentes medios (con pérdidas y sin pérdidas). Después se presentarán dos tipos de onda de propagación conocidos como frentes de ondas, éstos son como fuente puntual y frente de onda plana. Para terminar, se presentará también una descripción de los efectos de plasmón de superficie localizada. Para comenzar las ecuaciones de Maxwell son presentadas a continuación.

2.1.- Ecuaciones de Maxwell

Las ecuaciones de Maxwell fueron publicadas en 1864 y uno de los mayores resultados fue la predicción de la propagación de la energía electromagnética en forma de ondas. Las ecuaciones que nos dicen la forma de propagación consideran tanto medios lineales, isotrópicos y homogéneos. Cuando se considera un medio lineal, significa que la permitividad no es dependiente de la magnitud o el nivel del campo eléctrico y la permeabilidad no es dependiente de la magnitud o el nivel del campo magnético. Un medio isotrópico significa que la polarización tiene dirección paralela a la cual es aplicado el campo, y de igual manera su magnitud no depende de la dirección del campo eléctrico. Uno de los impactos más revolucionarios de las ecuaciones de Maxwell fue la predicción de la existencia de ondas electromagnéticas, y determinar que en el vacío (o espacio libre) la velocidad de propagación alcanza la velocidad de la luz.

2.1.1.- Ecuaciones de Maxwell en su Forma General

Comenzaremos con una breve discusión de las ecuaciones de Maxwell en su forma general, también llamadas “Ecuaciones de Maxwell Microscópicas [9]”

Este modelo de las Ecuaciones de Maxwell muestra el campo eléctrico \mathbf{E} y el campo magnético \mathbf{H} en términos de la carga y la corriente, los cuales también incluyen magnitudes en niveles microscópicos. Debido a la pequeña cantidad de cargas y corrientes consideradas en esta forma, este modelo es referenciado como “las Ecuaciones de Maxwell en el Vacío”.

A continuación, las cuatro Ecuaciones de Maxwell en su forma diferencial e integral son mostradas.

Tabla 2. 1.- Ecuaciones de Maxwell en su forma general [9]

Nombre	Forma Integral	Forma Diferencial
Ecuación Maxwell-Faraday	$\oint_{\partial S} E \cdot dl = -\frac{\partial \Phi_{H,S}}{\partial t}$	$\nabla \times E = -\frac{\partial H}{\partial t}$
Ley de Ampere	$\oint_{\partial S} H \cdot dl = \mu_0 J + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t}$	$\nabla \times H = \mu_0 J + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t}$
Ley de Gauss	$\oiint_{\partial v} E \cdot dA = \frac{Q(V)}{\epsilon_0}$	$\nabla \cdot E = \frac{\rho}{\epsilon_0}$
Ley de Gauss's para Magnetismo	$\oiint_{\partial v} H \cdot dA = 0$	$\nabla \cdot H = 0$

En el caso que no existan cargas ($Q=0$) ni corrientes ($J=0$), como es el caso del vacío, las Ecuaciones de Maxwell se transforman en:

$$\nabla \cdot E = 0 \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot H = 0 \quad (2.2)$$

$$\nabla \times E = -\frac{\partial H}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\nabla \times H = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t} \quad (2.4),$$

donde μ_0 y ϵ_0 son la permeabilidad y la permitividad del espacio libre respectivamente ($\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} H \cdot m^{-1}$) ($\epsilon_0 = 8.8541 \times 10^{-12} F/m$). Las ecuaciones anteriores conducen a E y H a satisfacer la ecuación de onda la cual tiene soluciones lineales compuestas por ondas planas viajando a la velocidad de la luz. La ecuación de onda y las ondas planas serán cubiertas en la sección 2.2. Es importante mencionar en este punto que, gracias a las Ecuaciones de Maxwell, es posible explicar cómo las ondas se propagan en diferentes espacios y medios. Al variar el campo magnético, un cambio en el campo eléctrico es generado gracias a la ley de Faraday. Al mismo tiempo, por medio de la corrección de

Maxwell acerca de la ley de Ampere, sabemos que el cambio mencionado con anterioridad crea otro cambio al campo magnético. Estos ciclos de variación son lo que permiten a las ondas propagarse a través del espacio. Es obvio pensar que, al considerar las corrientes y las cargas las Ecuaciones de Maxwell cambiarán conforme estas ondas se mueven en un medio que difiera al espacio libre.

2.1.2.- Ecuaciones de Maxwell en un Medio Simple

Las Ecuaciones de Maxwell en su forma general expresadas en la Tabla 2.1 (Forma Diferencial) y usando las definiciones denotadas en las ecuaciones (2.9) y (2.10) acerca de las densidades esenciales, las ecuaciones (2.5) a (2.8) ahora involucran cuatro densidades: ρ (densidad de carga libre), P (Polarización), J (Densidad de Corriente), y M (Magnetización).

$$\epsilon_0 \nabla \cdot E = \bar{\rho} \quad (2.5)$$

$$\nabla \cdot E = -\dot{H} \quad (2.6)$$

$$\mu_0^{-1} \nabla \cdot H = -\overline{\rho_m} \dot{v} + \epsilon_0 \dot{E} \quad (2.7)$$

$$\nabla \cdot H = 0 \quad (2.8)$$

$$\bar{\rho} = \rho - \nabla \cdot P \quad (2.9)$$

$$\overline{\rho_m} \dot{v} = J + \nabla \times M + \dot{P} \quad (2.10)$$

En gran cantidad de materiales estas densidades son inducidas por un campo electromagnético externo. La relación real entre cualquiera de las densidades y el componente de excitación del campo pueden ser determinados llevando a cabo un estudio detallado de las estructuras atómicas y moleculares. Sin embargo, existe una relación general entre las densidades y el campo, la cual puede ser expresada formalmente como se muestra a continuación:

$$P = P(E) = P_0 + \epsilon_0 X_e E + \epsilon_0 X_{e2} |E^2| \hat{E} + \dots \quad (2.11)$$

$$-M = -M(H) = -M_0 + \mu_0^{-1} X_m B + \mu_0^{-1} X_{m2} |H^2| \hat{H} + \dots \quad (2.12)$$

$$J_f = J_f(E) = J_{f0} + \sigma E + \sigma_2 |E^2| \hat{E} + \dots \quad (2.13)$$

Cada una de las densidades mostradas en las expresiones anteriores son representadas por series que incluyen un término constante e independiente del campo de excitación, un término lineal y términos no lineales de órdenes mayores. En las ecuaciones (2.11) – (2.13) χ_e es la susceptibilidad eléctrica y χ_m es la susceptibilidad magnética del material.

Los términos constantes representados en las ecuaciones constan de un momento eléctrico permanente P_0 , un momento magnético permanente M_0 , y una corriente permanente J_0 . Aun cuando estos términos son importantes en diversos casos, no son primordiales en la mayoría de los aspectos de la teoría electromagnética. En diversas aplicaciones, dichos términos son representados como expresiones lineales; Los términos lineales de las ecuaciones (2.11) a la (2.13) no son aplicables para dieléctricos cuando el campo electromagnético es de alta intensidad.

Cuando los términos lineales son buenas aproximaciones, las Ecuaciones de Maxwell se simplifican de manera considerable. En un medio con estas condiciones las ecuaciones quedan de la siguiente manera:

$$D = \varepsilon_0 E + P = (1 + X_e)\varepsilon_0 E \quad (2.14)$$

$$B = \mu_0^{-1} H - M = (1 + X_m)\mu_0^{-1} B \quad (2.15)$$

$$J_f = \sigma E \quad (2.16)$$

En estas ecuaciones $(1 + X_e)$ y $(1 + X_m)$ son cantidades adimensionales que dependen solamente de las características eléctricas y magnéticas de las estructuras correspondientes a los modelos para los que X_e y X_m son definidos específicamente. También cada una de estas cantidades son convenientemente representadas por un símbolo que representa las propiedades de la polarización lineal o la magnetización lineal. Estos símbolos son representados como:

$$\varepsilon_r = 1 + X_e \quad \text{or} \quad X_e = \varepsilon_r - 1 \quad (2.17)$$

$$\mu_r^{-1} = 1 + X_m \quad \text{or} \quad X_m = \mu_r^{-1} - 1 \quad (2.18)$$

La expresión de ε_r representa la constante de dieléctrico relativa o permitividad relativa de un medio lineal polarizable, mientras que μ_r es la permitividad relativa de un

medio magnetizable. Para una permitividad y una permeabilidad magnética absoluta las letras griegas ε y μ son utilizadas respectivamente. En términos de estos componentes, lo siguiente puede ser expresado:

$$D = \varepsilon E \quad (2.19)$$

$$B = \mu^{-1} H \quad (2.20)$$

$$P = (\varepsilon - \varepsilon_0) E \quad (2.21)$$

$$-M = (\mu^{-1} - \mu_0^{-1}) H \quad (2.22)$$

Dado que X_e y X_m , así como ε_r y μ_r están definidas en términos de P y $-M$ utilizando una subdivisión de volumen que no está delimitada no pueden existir contribuciones de las partes del mismo grupo. A consecuencia de lo anterior, los valores están limitados a contribuciones de carga libre haciendo que $\rho = \rho_f$ y $J = J_f$. Utilizando la ecuación (2.19) y la ecuación (2.20) y aplicando la relación de la ecuación (2.23) las ecuaciones de campo toman las siguientes formas, en donde ρ_f es la única función de densidad que aparece de manera explícita, por lo tanto:

$$\varepsilon \nabla \cdot E = \rho_f \quad (2.24)$$

$$\nabla \times E = -\dot{H} \quad (2.25)$$

$$\mu^{-1} (\nabla \times H) = \sigma E + \varepsilon \dot{E} \quad (2.26)$$

$$\nabla \cdot H = 0 \quad (2.27)$$

Las relaciones son válidas en polarización y magnetización lineal y dentro de un medio conductor. De acuerdo con lo anterior se puede decir que los valores de P y $-M$ son determinados utilizando las ecuaciones (2.21) y (2.22), al igual que los valores de ε_r y μ_r son obtenidos de estas ecuaciones en cualquier caso en particular.

2.2.- Ondas Planas

La solución para las ecuaciones de vector de onda no es simple; en el caso de coordenadas cartesianas, con el fin de facilitar los procedimientos matemáticos, se trabaja con ondas planas donde los campos dependen de una sola coordenada de tiempo y espacio:

$$E(r, t) = E(z, t) \quad H(r, t) = H(z, t) \quad (2.28), (2.29)$$

Por otra parte, para evitar la derivación de los vectores, ondas linealmente polarizadas son utilizadas para los cuales los campos retienen la dirección de sus vectores de tiempo:

$$E(r, t) = E(z, t)\hat{e}_0 \quad H(r, t) = H(z, t)\hat{h}_0 \quad (2.30), (2.31)$$

2.2.1.- Ecuaciones de Onda

Basándose en los principios mencionados con anterioridad y asumiendo que tanto los campos E y H son armónicos y dependientes del tiempo en la forma de $e^{j\omega t}$, las ecuaciones de Maxwell se transforman quedando de la siguiente manera:

$$\nabla \times H = (\sigma + j\omega\varepsilon)E \quad (2.32)$$

$$\nabla \times E = (j\omega\varepsilon)E \quad (2.33)$$

$$\nabla \cdot E = 0 \quad (2.34)$$

$$\nabla \cdot H = 0 \quad (2.35)$$

Aplicando la identidad vectorial

$$\nabla \times (\nabla \times A) \equiv \nabla(\nabla \cdot A) - \nabla^2 A \quad (2.36)$$

representándola para coordenadas cartesianas

$$\nabla^2 A = (\nabla^2 A_x)a_x + (\nabla^2 A_y)a_y + (\nabla^2 A_z)a_z \quad (2.37)$$

y obteniendo la rotacional de (2.32) y (2.33), así como utilizando (2.34) y (2.35), tenemos que:

$$-\nabla^2 H = (\sigma + j\omega\varepsilon)(\nabla \times E) \quad (2.38)$$

$$-\nabla^2 E = -j\omega\mu(\nabla \times H) \quad (2.39)$$

Al sustituir $\nabla \times E$ y $\nabla \times H$ de la ecuación (2.33) y la ecuación (2.32), obtenemos las ecuaciones de vector de onda que se muestran a continuación:

$$\nabla^2 H = \gamma^2 H \quad \text{and} \quad \nabla^2 E = \gamma^2 E \quad (2.40), (2.41)$$

en donde $\gamma^2 = j\omega\mu(\sigma + j\omega\varepsilon)$ y γ representa la constante de propagación cuyas partes reales e imaginarias son positivas:

$$\gamma = \alpha + j\beta \quad (2.42)$$

$$\alpha = \omega \sqrt{\frac{\mu\varepsilon}{2} \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\sigma}{\omega\varepsilon}\right)^2} - 1 \right)} \quad (2.43)$$

$$\beta = \omega \sqrt{\frac{\mu\varepsilon}{2} \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\sigma}{\omega\varepsilon}\right)^2} + 1 \right)} \quad (2.44)$$

El término α es conocido como la constante de atenuación mientras que β representa la constante de fase.

Las ecuaciones de onda en el dominio del tiempo están dadas en forma sinusoidal como se muestra en la ecuación (2.45) para el campo eléctrico y en la (2.46) para el campo magnético:

$$E_x = E_m \cos(\omega t + \beta z + \theta) \quad (2.45)$$

$$H_y = \frac{E_m}{\eta} \cos(\omega t + \beta z + \theta) \quad (2.46)$$

donde η' es la impedancia característica del aire o $120\pi \Omega$. En la Figura 2.1 se puede observar los dos campos (eléctrico y magnético) del mismo tamaño, ya que solo es una representación ilustrativa.

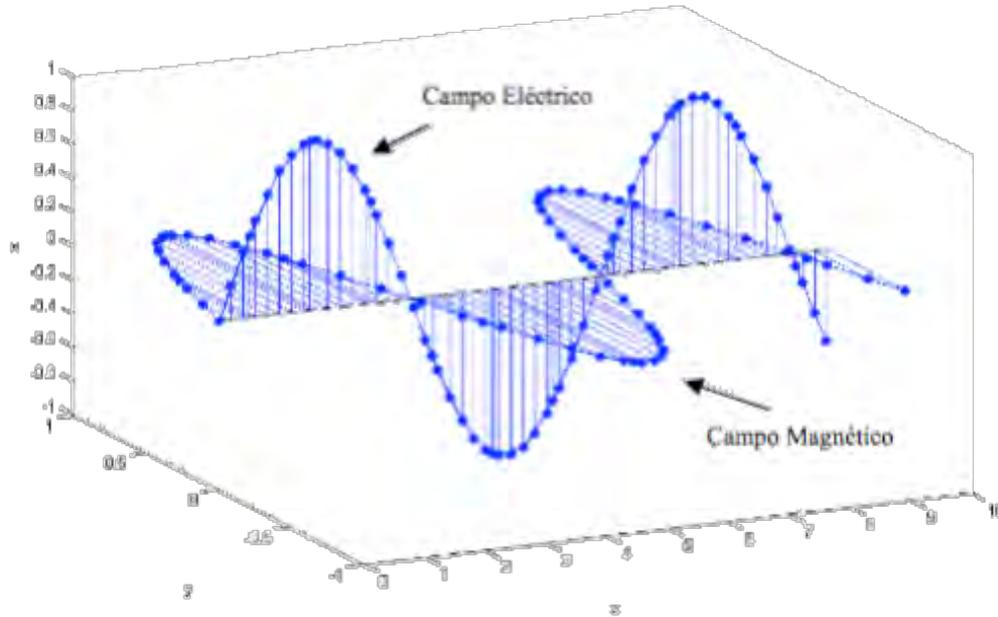


Figura 2. 1.- Representación gráfica del campo eléctrico y magnético de una onda plana viajando en el espacio libre.

La figura 2.1 muestra el campo eléctrico el cual tiene su amplitud en el plano x , mientras el campo magnético se encuentra en el plano y , y ambos se propagan en dirección z .

2.2.2.- Ondas Planas Uniformes

Una onda plana uniforme puede ser descrita como un fenómeno en donde los campos eléctricos y magnéticos son uniformes para cualquier punto en un plano perpendicular a la dirección de propagación. Lo anterior indica que los fasores de los vectores de ambos campos son independientes de la posición de estos campos [10].

Aparte de la constante de propagación, existe otro factor que depende de las características del medio conocido como la impedancia característica del medio. Este se calcula utilizando la siguiente expresión:

$$\eta' = \sqrt{\frac{j\omega\mu}{\sigma + j\omega\varepsilon}} \quad (2.47)$$

2.2.2.1.- Propagación en un Medio sin Pérdidas

Contar con un medio que no tenga pérdidas significa que ε y μ son números reales y por consiguiente el número de onda k también es real. Existe una manera alternativa de representar una solución para una onda plana. Esta solución es derivada al considerar un campo eléctrico solamente con el componente en \hat{x} , al igual que no considerar variaciones en las direcciones x y y . Lo anterior puede ser observado en la ecuación (2.48):

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} = 0 \quad (2.48)$$

Estas condiciones son aplicadas a la ecuación de onda de Helmholtz para \bar{E} en la forma de (2.49), por lo tanto, se reduce a (2.50)

$$\nabla^2 \bar{E} + \omega^2 \mu \varepsilon \bar{E} = 0 \quad (2.49)$$

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + k^2 E_x = 0 \quad (2.50)$$

Esta ecuación tiene dos soluciones independientes, las cuales son de la forma

$$E_x(z) = E^+ e^{-jkz} + E^- e^{+jkz} \quad (2.51)$$

E^+ y E^- representan las constantes de amplitud arbitraria. La ecuación anterior existe para condiciones de armónicos en el tiempo, con una frecuencia ω . En el dominio del tiempo, la ecuación debe ser reescrita como la ecuación (2.52) donde se asume que E^+ y E^- son constantes reales.

$$\varepsilon_x(z, t) = E^+ \cos(\omega t - kz) + E^- \cos(\omega t + kz) \quad (2.52)$$

Esta ecuación es entonces separada en diferentes términos. El primer término describe una onda viajera en la dirección $+z$, debido a que se busca preservar que la relación $\omega t - kz$ sea constante. El movimiento de un punto fijo de la onda debe ser en la dirección $+z$ conforme el tiempo aumenta.

El segundo término de la ecuación demuestra una onda que viaja en la dirección opuesta ($-z$). Esta es la principal razón del porque las amplitudes de los campos eléctricos son

representadas con los superíndices (+) y (-); en el espacio libre, la velocidad de propagación de una onda llega a ser igual que la velocidad de la luz.

Con el fin de obtener una descripción completa de una onda plana, el campo magnético debe estar también presente. En términos prácticos, cuando se conoce ya sea el campo eléctrico o el campo magnético, el campo desconocido puede ser encontrado utilizando las Ecuaciones de Maxwell. Dado que el campo eléctrico es presentado en la ecuación (2.51), al aplicar la ecuación (2.53) los componentes H_z y H_x son igual a 0, entonces el campo magnético es representado por:

$$\nabla \times \bar{E} = -j\omega\mu\bar{H} \quad (2.53)$$

$$H_y = \frac{1}{\eta} [E^+ e^{-jkz} - E^- e^{jkz}] \quad (2.54)$$

considerando que este análisis es hecho para el espacio libre, la impedancia de la onda η o la impedancia intrínseca del medio es la misma que $\eta_0 = 377\Omega$.

2.2.2.2.- Propagación en un Medio con Pérdidas

Un medio con pérdidas existe cuando hay una mínima conductividad σ [11], y por consiguiente las Ecuaciones de Maxwell son representadas con la adición de σ :

$$\nabla \times \bar{E} = -j\omega\mu\bar{H} \quad \nabla \times \bar{H} = j\omega\epsilon\bar{E} + \sigma\bar{E} \quad (2.55), (2.56)$$

por lo tanto, la ecuación de la onda para el campo eléctrico queda de la siguiente manera:

$$\nabla^2 \bar{E} + \omega^2 \mu \epsilon \left(1 - j \frac{\sigma}{\omega \epsilon}\right) \bar{E} = 0 \quad (2.57)$$

A simple vista se puede notar que la ecuación (2.57) mantiene cierta similitud con la ecuación (2.49). La diferencia recae en el valor de k^2 para medios sin pérdida, el cual ahora es sustituido por $\omega^2 \mu \epsilon [1 - j(\sigma/\omega\epsilon)]$.

Debido a la adición de la conductividad, la onda plana ahora tendrá una constante de propagación distinta, que para este caso tendrá un valor de γ :

$$\gamma = j\omega\sqrt{\mu\epsilon}\sqrt{1 - j\frac{\sigma}{\omega\epsilon}} \quad (2.58)$$

Al igual que en la sección 2.2.2.1, aquí también es necesario hacer las mismas suposiciones de solo tener un componente en \hat{x} y no tener variaciones en x y y ; entonces la ecuación (2.57) se convierte en:

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} - \gamma^2 E_x = 0 \quad (2.59)$$

y las soluciones para dicha ecuación son:

$$E_x(z) = E^+ e^{-\gamma z} + E^- e^{\gamma z} \quad (2.60)$$

Para la onda viajera en la dirección positiva, el factor de propagación es presentado como:

$$e^{-\gamma z} = e^{-\alpha z} e^{-j\beta z} \quad (2.61)$$

y la expresión anterior también puede ser representada en el tiempo del dominio de la siguiente manera:

$$e^{-\alpha z} \cos(\omega t - \beta z) \quad (2.62)$$

En comparación a la velocidad de onda alcanzada por las ondas planas que viajan en el espacio libre, las ondas que viajan a través de un medio con pérdidas sufren un decaimiento en este valor. Finalmente, el campo magnético puede ser encontrado utilizando:

$$H_y = \frac{j}{\omega\mu} \frac{\partial E_x}{\partial z} = \frac{-j\gamma}{\omega\mu} (E^+ e^{-\gamma z} - E^- e^{\gamma z}) \quad (2.63)$$

La ecuación (2.63) puede ser reescrita definiendo la impedancia de la onda, al igual que en el caso del medio sin pérdidas. Entonces, se hacemos que $\eta = j\omega\mu/\gamma$, el campo magnético puede ser expresado como:

$$H_y = \frac{1}{\eta} (E^+ e^{-\gamma z} - E^- e^{\gamma z}) \quad (2.64)$$

Tras haber analizado algunas propiedades de las ondas planas, la siguiente sección cubre la parte de las superficies imaginarias que representan los puntos correspondientes de una onda viajera, mejor conocida como frente de onda.

2.2.3.- Frente de Onda

Los conceptos de haces y frentes de ondas son útiles para ilustrar los efectos de propagación de ondas electromagnéticas a través del espacio libre. Un haz es considerado como una línea dibujada a través de una dirección de propagación de una onda electromagnética. Un frente de onda es formado cuando puntos de igual fase de propagación se unen y parten de la misma fuente, y al mismo tiempo forman una “superficie” de fase constante [12].

2.2.3.1.- Frente de Onda Plana

Un frente de onda plana representa un camino de onda con una superficie perpendicular a la dirección de propagación. Cuando una superficie es plana, su frente de onda es perpendicular como se puede observar en la Figura 2.2. Entre más cerca se encuentre de la fuente, más complicado será el frente de onda [10]

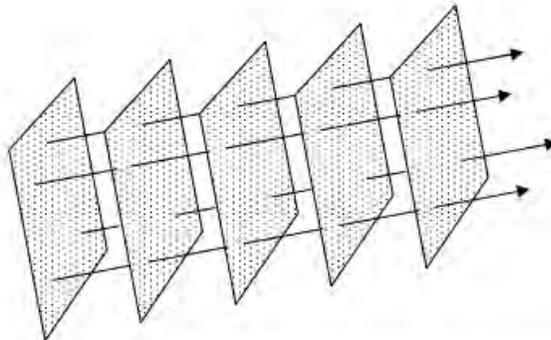


Figura 2. 2.- Diagrama de un frente de onda plana.

2.2.3.2.- Frente de Onda de una Fuente Puntal

Muchas de los frentes de onda son usualmente más complicadas que los frentes de ondas planas. En un frente de onda de una fuente puntal, diversos rayos son propagados

hacia varias direcciones; esta fuente es considerada como una fuente isotrópica, y el frente de onda generado por una fuente puntual es referido como una esfera con su radio respectivo. Su centro se encuentra en el punto donde las ondas son originadas [10]. En el espacio libre, y a una distancia dada de la superficie de la fuente, los rayos dentro de una pequeña superficie de frente de onda esférica son casi paralelos a la dirección de propagación como se observa en la Figura 2.3. Por lo tanto, a una mayor distancia de la fuente de propagación, el frente de onda se comporta más como un frente de onda plano y por lo que en ciertos casos este tipo de frente de ondas puede ser simplificado como un frente plano [10]. Esta tesis se basa en la propagación y reflexión de los haces generados por el sol a través de diferentes materiales para el análisis y modelado de celdas solares.

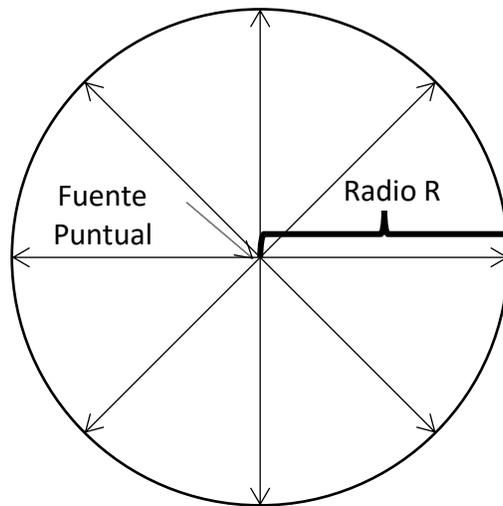


Figura 2. 3.- Superficie de frente de onda esférica.

2.3.-Nano Partículas Metálicas y Superficie de Plasmones

En el caso que un gas esté fuertemente ionizado, o también llamado estado de plasma, los portadores con carga libre son capaces de interactuar con la radiación electromagnética de baja frecuencia oscilando en resonancia, produciéndose el fenómeno conocido como plasmón.

Debido a la característica de los metales, el volumen de estos puede llegar a ser representado a forma de aproximación como un plasma sólido en el que los átomos se representan como puntos masivos fijos con carga positiva mientras que una “capa de

electrones libres” cubren toda la estructura. Los plasmones de volumen se pueden definir como ondas cuantizadas de un número de electrones móviles que son generadas al momento que una enorme cantidad de estos son perturbados de su posición de equilibrio y vibran a una frecuencia característica dada [13]. En el caso que se cuente con un metal de superficie infinito, la frecuencia de plasmón de volumen puede ser encontrada de la siguiente manera:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{\epsilon_0 m_e}} \quad (2.65)$$

N es la densidad de portadores de carga, o en este caso electrones móviles, e y m_e son la carga del electrón y su masa respectivamente y ϵ_0 es la permitividad del espacio libre.

Cuando la frecuencia de radiación es menor que la frecuencia de plasmón en el material, los electrones tienen la oportunidad de seguir de manera precisa las oscilaciones del campo eléctrico oscilante de la radiación, y por consecuencia la onda es reflejada totalmente. Por otra parte, si la frecuencia de radiación es mayor a la del plasmón del material, las cargas no son capaces de coordinarse con el campo eléctrico oscilante y la onda es entonces transmitida.

Existe un tipo especial de plasmones asociados a la superficie de los metales, el cual es conocido como plasmones de superficie. Bajo ciertas condiciones, como el acoplamiento de frecuencias entre la onda incidente y la de la oscilación del material, estos plasmones pueden interactuar con la radiación electromagnética en un fenómeno conocido como resonancia de plasmón de superficie. Existe una pequeña variación de plasmones de superficie conocida como “plasmones de superficie localizados” que es cuando las oscilaciones colectivas son producidas por electrones restringidos en volúmenes pequeños metálicos.

En un plasmón de superficie localizado, el campo eléctrico oscilante de la luz que incide sobre el metal induce un dipolo eléctrico en la partícula, desplazando a una parte de los electrones móviles deslocalizados en una dirección separada con respecto a los que restan en la partícula metálica; por consecuencia se genera una carga negativa en una sección de la

partícula. Los núcleos y los electrones internos que no fueron desplazados, forman una carga opuesta o también llamada carga positiva.

En partículas pequeñas se produce un dipolo, pero en el caso que se tengan partículas mayores a 30 nm se producirán cuadrupolos y/o multipolos, haciendo más compleja la situación.

2.3.1.- Modelo Semi Clásico Simple de Nano Partículas Metálicas

Un plasmón generado por una nano partícula se relaciona directamente a los plasmones generados en superficies metálicas como se mencionó con anterioridad. Bastantes propiedades de los plasmones de nano partículas pueden ser entendidos al ser modelados utilizando la física semi clásica.

Dado que el diámetro de una nano partícula se encuentra en el orden de profundidad de penetración de ondas electromagnéticas en metales (30 nm), la luz de excitación es capaz de penetrar la nano partícula. El campo dentro de la partícula recorre los electrones conductores colectivamente con respecto a la carga fija positiva de la red de iones. Los electrones generan una carga en la superficie a un lado de la partícula. La atracción de esta carga negativa y la carga positiva de los iones que quedan en la red en el lado opuesto resulta en una fuerza restauradora.

La frecuencia de resonancia es principalmente determinada por la intensidad de la fuerza restauradora. Esta fuerza depende de la separación de las cargas de superficie, el tamaño de la partícula y la polarización del medio entre y alrededor de las cargas, la cual a su vez depende del medio incrustado y de la polarización del núcleo de los electrones de la nano partícula de metal.

Las cargas superficiales alternantes forman efectivamente un dipolo oscilante, el cual irradia ondas electromagnéticas. Este modelo simple para partículas plasmónicas se relaciona al concepto de una “antena óptica”.

Las nano partículas metálicas absorben y dispersan la luz de manera intensa a frecuencias de resonancia plasmónica. La relación de dispersión y absorción cambia drásticamente con el tamaño de la nano partícula. Al ser las nano partículas “grandes” logran

dispersar la luz de manera muy eficiente, razón por la cual para tamaños mayores a 30 nm, la dispersión se convierte en un parámetro muy importante.

Los detalles sobre el estudio realizado en esta tesis con referencia a las nano partículas metálicas será cubierto en el Capítulo 5.

CAPÍTULO 3.- PROPIEDADES ÓPTICAS Y ELÉCTRICAS DE UNA CELDA SOLAR TIPO HETERO-ESTRUCTURA

Durante este capítulo se cubrirá el aspecto relacionado con las propiedades ópticas y eléctricas que intervienen dentro del objeto de estudio de la Tesis presentada. El capítulo cubre teoría básica para el cálculo básico de la eficiencia cuántica interna como lo son las propiedades de la Luz, la movilidad de arrastre, el tiempo de vida de los portadores, entre otros por la parte óptica. De igual manera por la parte eléctrica se cubren parámetros como la densidad de corriente en corto circuito, densidad de corriente en oscuridad, factor de llenado, eficiencia máxima, entre otros. En resumen, este capítulo engloba los aspectos que llegan a jugar un papel determinante al momento de desarrollar una celda solar de tipo hetero-estructura y al momento de caracterizar su eficiencia.

3.1.- Propiedades de la Luz

En este capítulo se cubrirán algunos conceptos de la teoría básica que respalda las propiedades de la luz, y como esta se comporta en un medio.

La primera teoría estable correspondiente a la naturaleza de la luz fue impulsada por Newton en 1704 en su libro “Óptica” en el cual se sugería que la luz era compuesta por pequeñas partículas o Corpúsculos.

Tiempo después, apareció una nueva explicación desarrollada por Fresnel y Arago, la cual hablaba sobre la polarización de la luz en términos de ondas de luz transversales. Sin embargo dicha explicación no fue capaz de refutar por completo la hipótesis de la luz como partícula.

Al pasar los años la teoría de la luz como onda se fue arraigando y fortaleciendo por el trabajo e investigación del mismo Fresnel, quien fue el primer científico en explicar el fenómeno de la interferencia y la difracción utilizando la teoría de la onda.

La teoría de la luz como onda logró alcanzar su pico cuando Maxwell desarrolló la teoría de la radiación electromagnética y demostró que la luz era solamente una pequeña parte del espectro electromagnético. Tras dichos resultados, la luz pasó a ser imaginada como una onda electromagnética, como se muestra en la Figura 3.1.

El problema con esta suposición fue que la condición para que la onda pueda existir era un poco complicada de cumplir; la condición establece que es necesario contar con “algo” en donde pueda existir la onda [14].

En 1895, se observó que cuando la luz ultravioleta era utilizada para iluminar las superficies de diversos metales se emitían “partículas negativas”, las cuales fueron nombradas como “electrones”. Estos resultados no lograban acoplarse completamente con la teoría de la luz como una onda electromagnética.

Dichos electrones, ahora conocidos como “fotociones” eran solo observados si la frecuencia de radiación excedía cierto valor mínimo, el cual variaba de acuerdo al material que se estaba utilizando, y la energía cinética del fotoción era linealmente proporcional a la frecuencia de iluminación. También, se logró observar que el número de los fotociones emitidos aumentaba cuando se incrementaba la intensidad de la luz, pero su energía permanecía constante para cualquier tipo de fuente de luz.

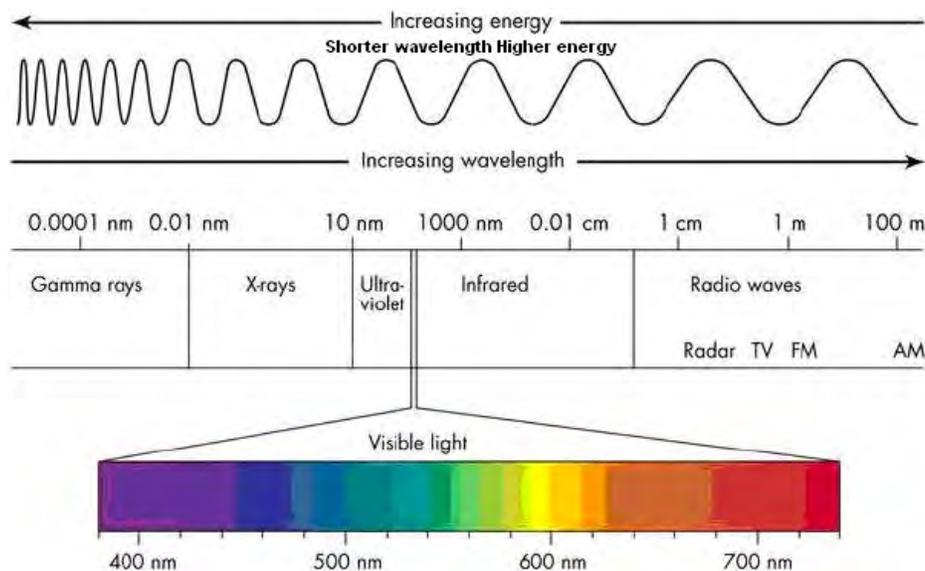


Figura 3. 1.- Luz en el espectro electromagnético.

La explicación de este “efecto fotoeléctrico” llegó con Einstein en 1905 y se basaba en la idea de que la luz se comportaba como pequeñas partículas, ahora llamadas “fotones”.

Cada fotón entrega la misma cantidad de energía, si esta es suficientemente grande entonces el electrón puede ser expulsado hacia la superficie.

La energía de cada fotón, E , resultó ser proporcional a la frecuencia de iluminación, tal que el fotoelectrón puede ser expulsado cuando la frecuencia pasa cierto umbral. Una vez sobrepasa dicho valor, al aumentar la frecuencia de iluminación permite que el exceso de energía sea presentada como una energía cinética creciente [14]. La energía cinética de los fotoelectrones desprendidos de los metales es descrita por: $1/2 mv^2 = E - \phi$.

Donde m es la masa del electrón emitido, v es la frecuencia de la luz incidente y ϕ es conocida como la función trabajo, la cual es la energía requerida para liberar un electrón de una superficie metálica. Al día de hoy, todos los experimentos muestran que la luz y su interacción con la materia es mejor descrita en términos de fotones. En su nivel más simple, el comportamiento estadístico de un gran número de fotones puede ser representado de manera adecuada como una onda electromagnética.

3.1.1.- Ondas de Luz

Si uno se basa en la teoría de onda, las ondas de luz comprenden un pequeño segmento del espectro electromagnético como se mencionó en la sección anterior. Cualquier sección del espectro electromagnético es referido como una onda con una longitud de onda λ determinada, con un componente eléctrico y otro magnético, y cada uno de estos es descrito por un vector y esta a su vez se mueve a una velocidad de 3×10^8 m/s en el vacío, también conocida como “la velocidad de la luz”.

En un caso sencillo, el vector \vec{E} es perpendicular al vector magnético \vec{H} ; estos vectores se encuentran sobre un plano perpendicular a la dirección en la cual la onda se mueve, descrita por la velocidad del vector v , o también conocida como el vector de propagación o el vector de onda k . Por lo anterior, \vec{E} y \vec{H} caen en un plano que es perpendicular a la dirección de propagación, así que la luz es referida como una onda “Transversal Electromagnética” o TEM por sus siglas en inglés.

Tanto el vector eléctrico, el vector magnético y el vector de velocidad pueden ser representados por tres ejes cartesianos como se muestra en la Figura 3.2 y como es mencionado en el Capítulo 2.

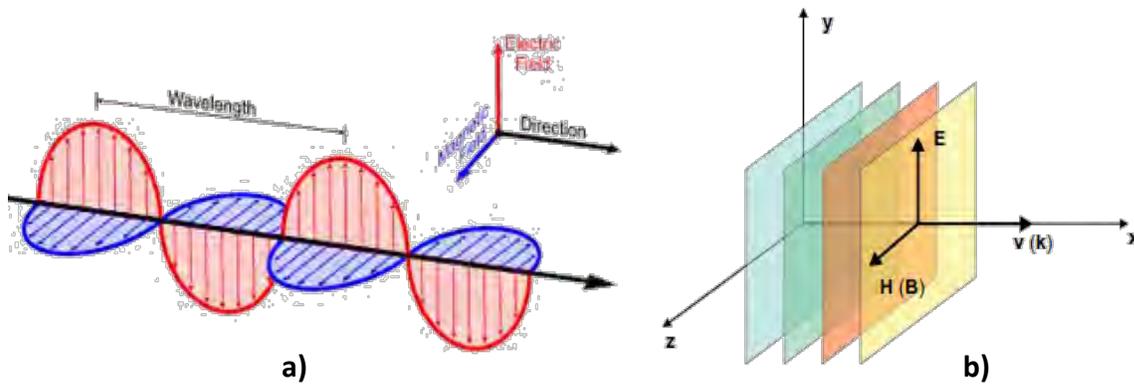


Figura 3. 2.- Representación de la luz como una onda electromagnética; en la figura a) se puede observar la luz con los componentes del vector del campo magnético, vector del campo eléctrico y el vector de velocidad. En la figura b) se denota la señal como frentes de onda planos, en los eje x, y y z, de igual manera con sus componentes vectoriales E, H y V.

Un rayo de luz puede decirse que es monocromático cuando está compuesto de un rango muy estrecho de longitudes de onda, y que es coherente cuando todas estas ondas que pertenecen a dicho rango están en fase. La forma en la que el vector del campo eléctrico está restringido es lo que define la polarización de la onda, existiendo tres tipos: la lineal, la elíptica y la circular. Si el campo eléctrico permanece solo en un plano, entonces se dice que la luz está polarizada de forma plana o con polarización lineal.

La luz “normal” tal como la luz solar no es emitida con un flujo continuo, si no en ráfagas cortas. Sin embargo, entre cada una de estas ráfagas, la fase y la polarización cambia de una a otra de manera aleatoria, por lo que la fase y la polarización puede llegar a variar de gran manera y no estar relacionadas con dichos parámetros de ráfagas anteriores.

Por lo anterior, la luz “normal” es descrita como “incoherente” y “no polarizada” y por lo tanto la interacción de la luz del día con objetos puede ser interpretada, con una buena aproximación, sin tomar en cuenta la polarización.

3.1.1.1.- Radiación de Cuerpo Negro

Un cuerpo negro puede ser definido como un objeto el cual puede absorber completamente radiación de cualquier longitud de onda que incide sobre él [15] y emite radiación basada en su temperatura.

El origen del nombre de cuerpo negro reside en el hecho de que en caso de que no emitan radiación en el rango visible del espectro, dichos cuerpos aparentan ser negros debido a la absorción completa de todas las longitudes de onda. Para el área de la investigación y desarrollo de celdas solares, los cuerpos negros de interés son los que emiten luz en el rango visible. El sol es considerado un cuerpo negro, ya que su cuerpo es inmensamente grueso y no refleja longitudes de onda.

3.2.- Tiempo de Vida de los Portadores y Velocidad de Recombinación

La teoría de la recombinación par electrón hueco por medio de trampas o centros de recombinación fue propuesta por Hall y Shockley y Read en 1952, como se mencionó en la sección anterior. El tiempo de vida del portador es uno de los pocos parámetros el cual da información sobre las densidades de los defectos en los semiconductores. Debido a lo anterior, en la comunidad de Circuitos Integrados dicho parámetro ha sido adoptado como un monitor de proceso de pureza.

El problema que se presenta al momento de definir un tiempo de vida es que en realidad se está describiendo una propiedad de un portador dentro de un material semiconductor y no una propiedad en sí del material. Aun cuando se logra establecer un valor que represente el tiempo de vida, es importante estar conscientes que solo es una representación de un promedio sobre el comportamiento de los portadores influenciados por las superficies, interfaces, barreras de energía y densidad de portadores, sin dejar fuera a las propiedades del semiconductor incluyendo su temperatura.

Los tiempos de vida se pueden delimitar en dos categorías principales:

1. Tiempo de Vida de Recombinación
2. Tiempo de Vida de Generación

El tiempo de vida de recombinación τ_r se aplica cuando el número de los portadores en exceso disminuye debido a la recombinación; por otra parte, el tiempo de vida de generación τ_g hace referencia cuando existe cierta pausa por parte de los portadores, debido a que la región de carga espacial de un dispositivo excitado en inversa y el dispositivo tratan de llegar al equilibrio. La región de carga espacial o zona de depleción es creada con la

descompensación de iones donadores en la región n e iones aceptores en la región p. Dentro de esta región, los electrones y los huecos se encuentran en tránsito de una región a otra.

Cuando estas recombinaciones y regeneraciones ocurren en el volumen del dispositivo, son caracterizados por τ_r y τ_g . Cuando dichos eventos suceden sobre la superficie, son caracterizados por la “velocidad de recombinación de superficie” S_r y la “velocidad de generación de superficie” S_g .

La Figura 3.3 muestra el proceso del tiempo de vida de recombinación y el tiempo de vida de generación. En (a) se denota como la recombinación sucede cuando un par electrón-hueco deja de existir en el volumen del dispositivo mientras en (b) se puede observar cómo se genera un par electrón-hueco.

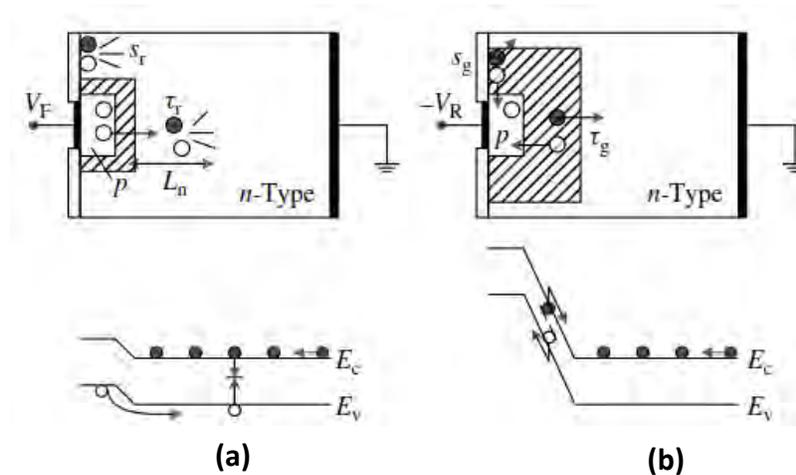


Figura 3. 3.- Representación del Tiempo de Vida de los portadores; en (a) se puede apreciar la recombinación τ_r en el volumen del dispositivo, así como la velocidad de recombinación en la superficie S_r ; de manera similar en (b) se puede observar el Tiempo de vida de generación τ_g y la velocidad de generación de superficie S_g .

Debido a las características de las celdas solares, este trabajo se enfocará en la descripción del tiempo de vida de recombinación, describiendo sus principales propiedades así como el análisis de trasfondo para obtener el valor numérico que describa dicho concepto.

La tasa de recombinación R en el volumen del dispositivo tiene una dependencia no lineal con respecto a la variación del equilibrio de la densidad de portadores. En un semiconductor tipo p, considerando sus electrones minoritarios, R puede ser denotada por:

$$R = A(n - n_0) + B(pn - p_0n_0) + C_p(p^2n - p_0^2n_0) + C_n(pn^2 - p_0n_0^2) \quad (3.1)$$

Donde n y p son las densidades de electrones y huecos (cm^{-3}) respectivamente, n_0 y p_0 son las densidades del electrón y de hueco en equilibrio (cm^{-3}). De igual manera $n = n_0 + \Delta n$, $p = p_0 + \Delta p$ y Δp y Δn son el exceso de densidad de portadores. En la ecuación 3.1, se considera que los términos son lineales, cuadráticos y de tercer orden.

En el caso de que no se tengan trampas en el semiconductor, los excesos de portadores p y n son iguales, lo que lleva a (3.1) poder expresarse de la siguiente manera:

$$R \approx A\Delta n + B(p_0 + \Delta n)\Delta n + C_p(p_0^2 + 2p_0\Delta n + \Delta n^2)\Delta n + C_n(n_0^2 + 2n_0\Delta n + \Delta n^2)\Delta n \quad (3.2)$$

El tiempo de vida de recombinación puede ser definido como:

$$\tau_r = \frac{\Delta n}{R} \quad (3.3)$$

Y sustituyendo (3.2) en (3.3):

$$\tau_r = \frac{1}{A + B(p_0 + \Delta n) + C_p(p_0^2 + 2p_0\Delta n + \Delta n^2) + C_n(n_0^2 + 2n_0\Delta n + \Delta n^2)} \quad (3.4)$$

Existen tres mecanismos de recombinación principales que determinan el tiempo de vida de recombinación de los cuales se habla a continuación.

1. Recombinación Shockley-Read-Hall (SRH)

En un proceso de recombinación no radiativo, la recombinación de pares de electrón hueco puede tener lugar en los estados de trampas que se encuentran localizadas en la región prohibida del semiconductor como se muestra en la Figura 3.4. Este proceso involucra la captura de electrones (o huecos) por los estados de trampas, seguido por la recombinación de huecos en la banda de valencia (o electrones en la banda de Conducción). Cuando los pares de electrón hueco se recombinan, la energía es liberada por medio de una emisión de un fonón. Los estados de trampas pueden ser creados por

impurezas a niveles profundos, como por ejemplo: transición de metales o metales normales tales como Fe, Ni, Co, W, Au. También puede ser por radiación y defectos de procesamiento inducidos [16].

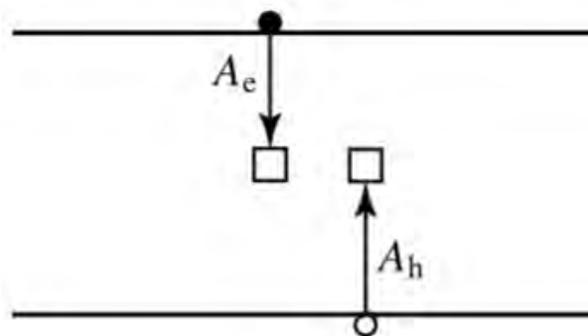


Figura 3. 4.- Procesos de recombinación Shockley Read Hall; A_e representa la captura de un electrón, mientras A_h hace referencia a la captura de un electrón. [17].

2. Recombinación Radiativa (Banda a Banda)

La recombinación banda a banda en un semiconductor es el proceso inverso de la absorción óptica. La emisión de fotones durante esta recombinación es un fenómeno común observado en una banda prohibida directa de semiconductores como GaAs, GaN, o ZnSe. Por otra parte, si nos encontramos con un semiconductor no degenerado, se puede observar que la tasa a la cual los electrones y huecos son aniquilados vía recombinación banda a banda es proporcional a la densidad de electrones y huecos en las bandas de conducción y de valencia, respectivamente.

Cuando se está en equilibrio térmico, la tasa de recombinación es igual a la tasa de generación térmica. En la Figura 3.5 se puede observar la recombinación de Banda a Banda.

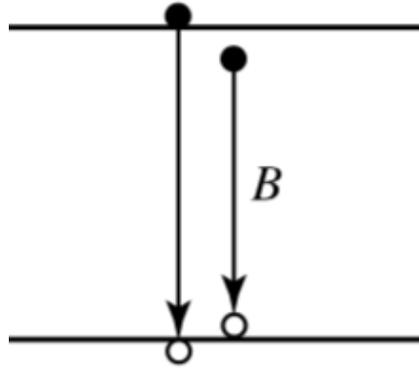


Figura 3. 5.- Proceso de Recombinación de Banda a Banda. [17].

3. Recombinación Auger

La recombinación Auger es un proceso que involucra tres cuerpos y que requiere la participación en cada ocasión de dos electrones y un hueco o un electrón y dos huecos como se observa en la Figura 3.6. En esta recombinación, la energía liberada por recombinación banda a banda de un electrón y un hueco es escogida por un tercer portador, ya sea cualquier otro electrón o cualquier otro hueco. Esta energía eventualmente es convertida a energía térmica por la red conforme el tercer portador excitado se relaja hacia la banda de prohibida. Consecuentemente, un proceso de recombinación Auger no es considerado un proceso radiativo.

Los tres procesos de recombinación (o mecanismos) determinan el tiempo de recombinación: Shockley Read Hall τ_{SRH} , Radiativo (Banda a Banda) τ_{Rad} y Auger τ_{Auger} ; entonces el tiempo de recombinación puede ser representado de la siguiente manera:

$$\tau_r = \frac{1}{\tau_{SRH}^{-1} + \tau_{Rad}^{-1} + \tau_{Auger}^{-1}} \quad (3.5)$$

donde

$$\tau_{SRH} = \frac{\tau_p(n_0 + n_1 + \Delta n) + \tau_n(p_0 + p_1 + \Delta p)}{p_0 + n_0 + \Delta n} \quad (3.6)$$

y n_1 , p_1 , τ_n y τ_p se pueden definir como:

$$n_1 = n_i \exp\left(\frac{E_T - E_i}{kT}\right); p_1 = n_i \exp\left(-\frac{E_T - E_i}{kT}\right) \quad (3.7)$$

$$\tau_p = \frac{1}{\sigma_p v_{th} N_T}; \tau_n = \frac{1}{\sigma_n v_{th} N_T} \quad (3.8)$$

En (3.7) y (3.8) E_T y E_i son la energía de trampas y el nivel de energía intrínseca respectivamente; k es la constante de Boltzman, T es la temperatura en grados Kelvin, n_1 es la densidad de portadores intrínsecos, σ_p y σ_n la sección transversal de captura de huecos y electrones (cm^2) respectivamente. De igual manera tenemos que:

$$\tau_{Rad} = \frac{1}{B(p_0 + n_0 + \Delta n)} \quad (3.9)$$

donde B es el coeficiente de recombinación radiativa. Por último se tiene τ_{Auger} la cual se representa como:

$$\begin{aligned} \tau_{Auger} &= \frac{1}{C_p(p_0^2 + 2p_0\Delta n + \Delta n^2) + C_n(n_0^2 + 2n_0\Delta n + \Delta n^2)} \\ &\approx \frac{1}{C_p(p_0^2 + 2p_0\Delta n + \Delta n^2)} \end{aligned} \quad (3.10)$$

y C_p representa el coeficiente de recombinación para los huecos, mientras que C_n es para electrones.

Los valores para ciertos elementos pueden ser encontrados en [18]. Un parámetro que logra tomar importancia al momento de hacer mediciones para el tiempo de vida es el nivel de inyección.

Uno de los modelos para la formulación de la recombinación, se basa en el mecanismo de SRH del Si (el cual se utiliza en este trabajo). La información para el *n-Si* del modelado se puede encontrar en [18]. Para dicho modelo, la tasa de recombinación Shockley Read Hall está dada por:

$$R = \frac{\sigma_{ns}\sigma_p v_{th} N_T (pn - n_i^2)}{\sigma_n(n + n_1) + \sigma_p(p + p_1)} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \quad (3.11)$$

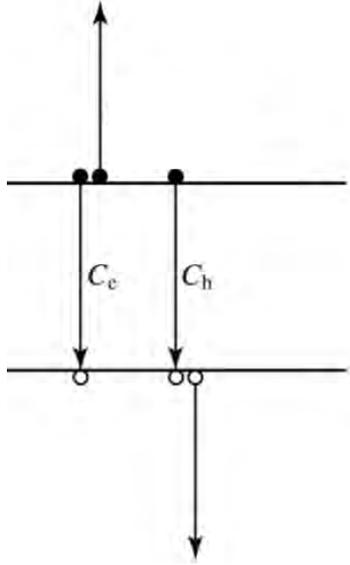


Figura 3. 6.- Proceso de Recombinación Auger. Se observa C_e que representa el caso para dos electrones y un hueco; de manera similar, C_h , representa el caso para cuando se tienen dos huecos y un electrón [17].

Mientras que la tasa de recombinación puede ser expresada como

$$R_s = \frac{\sigma_{ns}\sigma_{ps} v_{th} N_{it} (p_s n_s - n_i^2)}{\sigma_{ns}(n_s + n_{1s}) + \sigma_{ps}(p_s + p_{1s})} = \frac{S_n S_p (p_s n_s - n_i^2)}{S_n(n_s + n_{1s}) + S_p(p_s + p_{1s})} \quad (3.12)$$

y

$$S_n = \sigma_{ns} v_{th} N_{it}; \quad S_p = \sigma_{ps} v_{th} N_{it} \quad (3.13)$$

En (3.11) y (3.12) p_s y n_s son las densidades de electrones y huecos (cm^{-3}) en la superficie; la densidad de trampas de la interface es representada por N_{it} (cm^{-2}). En los casos anteriores cabe mencionar que se hace referencia a la superficie del material. Por lo tanto, la velocidad de recombinación en la superficie puede ser descrita por

$$S_r = \frac{R_s}{\Delta n_s} \quad (3.14)$$

Y sustituyendo (3.12) en (3.14) tenemos que

$$S_r = \frac{S_n S_p (p_{0s} + n_{0s} + \Delta n_s)}{S_n (n_{0s} + n_{1s} + \Delta n_s) + S_p (p_{0s} + p_{1s} + \Delta p_s)} \quad (3.15)$$

3.3.- Movilidad de los Portadores

La movilidad de los portadores es un término que interfiere de manera substancial con respecto al funcionamiento del dispositivo. Cuando se tiene un campo eléctrico de baja magnitud la velocidad del portador es proporcional a la movilidad; si se tiene un material con alta movilidad esto conducirá a la respuesta del mismo a frecuencias más altas, ya que los portadores tomarían menor tiempo para recorrer el dispositivo.

Por otra parte los dispositivos con mayor movilidad tienen mayor corriente, la cual carga las capacitancias mucho más rápido resultando igual que en el caso anterior con una respuesta a frecuencias más altas. Existen diferentes movilidades que se estudian, entre las cuales se encuentran:

- ***Movilidad Microscópica***

La movilidad microscópica μ es la que se determina solamente por la dispersión y es la que se utiliza en las ecuaciones de Maxwell haciendo la suposición de que no existen fluctuaciones.

- ***Movilidad MOSFET***

Esta movilidad se deduce de las mediciones MOSFET; los flujos de corrientes pueden verse afectados por las fluctuaciones a través de la introducción de nuevos términos de densidad de corriente o por modificaciones en las condiciones de límites en las ecuaciones de Maxwell, lo cual lleva a un efecto adicional al de las contribuciones de dispersión del caso anterior. [19]

- ***Movilidad de conductividad***

La movilidad de conductividad se deriva de la resistividad o conductividad de un material semiconductor.

- **Movilidad Hall**

El efecto Hall describe el comportamiento de los portadores libres en un semiconductor cuando se aplica un campo eléctrico o un campo magnético. La movilidad Hall μ_H es una movilidad efectiva de ciertos tipos de portadores para su arrastre transversal, bajo las condiciones anteriormente mencionadas.

- **Movilidad de Arrastre**

La movilidad de arrastre describe el efecto promedio de diversas colisiones experimentadas por el movimiento de cargas. En otras palabras, este parámetro puede denotarse como la movilidad cuando los portadores minoritarios se arrastran dentro de un campo eléctrico.

En este trabajo se enfocará más en la movilidad de arrastre, ya que es el que más concierne al fenómeno que ocurre dentro de la hetero-estructura que se tiene bajo observación.

3.3.1- Movilidad de Arrastre

La movilidad de arrastre es definida como la razón de la velocidad de arrastre promedio que un portador logra en un campo eléctrico E , lo cual puede ser representado como:

$$\mu_i = \frac{v_{dr,i}}{E} \quad (3.16)$$

La ecuación (3.16) puede ser entendida asumiendo que en condiciones de estado estacionario, todo el momento ganado por los portadores en las colisiones es perdido durante estas interacciones. En la ecuación 3.16 μ_i es la movilidad de arrastre o también llamada movilidad de portadores ($i=e, h$ para electrones y huecos respectivamente), $v_{dr,i}$ es la velocidad de arrastre y E es el campo eléctrico. En este caso tenemos que para el caso de electrones con carga $-e$, se puede tener la siguiente relación:

$$-eE\tau_{col,e} = m_{c,n}^* v_{p,dr,e} \quad (3.17)$$

donde $m_{c,n}^*$ es la conductividad de la masa efectiva del portador, $v_{p,dr,e}$ es la principal velocidad pico antes de una colisión y $\tau_{col,e}$ es el intervalo de tiempo promedio entre las

colisiones. Sí la ecuación (3.17) se resuelve para la velocidad pico, se tiene que: $v_{p,dr,e} = -(e\tau_{col,e}/m_{c,n}^*) \cdot E$

Además, asumiendo que la velocidad de arrastre inicial es cero, la velocidad de arrastre promedio se convierte en la mitad de $v_{p,dr,e}$ teniendo:

$$v_{dr,e} = \frac{v_{p,dr,e}}{2} = -\frac{1}{2} \left(\frac{e\tau_{col,e}}{m_{c,n}^*} \right) \cdot E \quad (3.18)$$

Sin embargo, el proceso de colisión llega a ser más complejo que la representación aproximada que se ha mostrado con anterioridad. En un proceso un poco más preciso, en el cual el efecto de distribución estadístico es tomado en cuenta, el factor de 1/2 en la ecuación anterior es eliminado y la ecuación (3.18) puede ser igualada de la siguiente manera:

$$v_{dr,e} = - \left(\frac{e\tau_{col,e}}{m_{c,n}^*} \right) \cdot E = -\mu_e \cdot E \quad (3.19)$$

donde μ_e es la movilidad de arrastre de los electrones en el material. Para el caso de huecos con carga e , se tiene que:

$$v_{dr,h} = - \left(\frac{e\tau_{col,h}}{m_{c,n}^*} \right) \cdot E = \mu_h \cdot E \quad (3.20)$$

en la cual μ_h y $\tau_{col,h}$ son la movilidad de arrastre de huecos y el promedio del intervalo de tiempo entre las colisiones de los huecos respectivamente.

3.4.- Estructura de Banda en los Semiconductores

La distribución de energía de estados depende en gran cantidad de la distancia interatómica. En un semiconductor la energía de la banda prohibida es un poco menos de 3 electrón-volts y la densidad de los electrones en la banda superior, o electrones en la banda inferior es no mayor que 10^{20} cm^{-3} [20].

Por otra parte, para el caso de un metal la banda superior está compuesta por electrones más allá de la banda prohibida y la concentración de electrones se encuentra dentro del orden de 10^{20} cm^{-3} . En el caso de los aislantes, tienen una energía de banda prohibida grande, generalmente de alrededor de 3 Electrón-volts y tienen una concentración de electrones prácticamente despreciable en la banda superior.

3.4.1.- Distribución en el momento Espacial

En esta subsección, se considerará como los estados permitidos son distribuidos a lo largo del momento de espacio. La energía cinética de un electrón está relacionada a su momento p por la ecuación (3.21) como se muestra a continuación:

$$E = \frac{p^2}{2m^*} \quad (3.21)$$

En la ecuación anterior, m^* representa la masa efectiva del electrón y p puede ser expresada como:

$$p = k\hbar \quad (3.22)$$

donde $\hbar = h/2\pi$ es la constante de Dirac, h es la constante de Planck y k es el vector de onda. El mayor valor de k ocurre al borde de los que es conocido como la zona de Brillouin, la cual es la zona donde el volumen de espacio de k contiene todos los valores de k hasta π/a donde a varía con respecto a la dirección.

De manera similar, la energía cinética del electrón puede ser representada en términos de k y \hbar de la siguiente manera:

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2m^*} \quad (3.23)$$

Si el material que se tiene a consideración es un cristal completo, y es modelado como un cubo con lados de longitud L , las energías permitidas son descritas por la siguiente expresión:

$$E = \frac{h^2}{2m^*L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (3.24)$$

Donde n son los números cuánticos. Dado que la energía en (3.24) varía en saltos discretos, estos saltos llegan a ser bastante pequeños por lo que la energía puede llegar a ser representada como un valor casi continuo. A continuación se muestra en la Figura (3.7) la energía del electrón con relación a su momento. En la figura se puede observar un comportamiento parabólico, por lo que ha dicha distribución de le conoce como “el valle parabólico” [20].

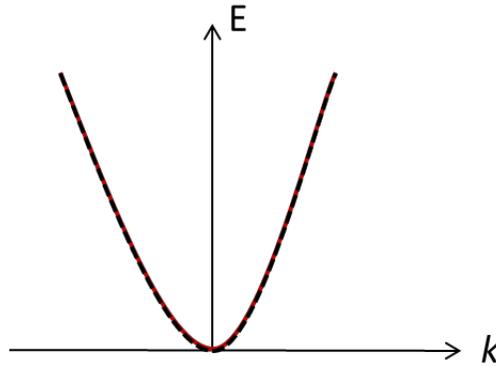


Figura 3. 7.- Comportamiento parabólico de la energía del electrón con respecto a su momento, en negro se muestran los saltos discretos, mientras que en rojo se representa el valor casi continuo.

Por practicidad, generalmente las bandas de valencia superiores son tomadas como niveles de referencia. La Figura 3.8 muestra el comportamiento de la Energía cinética en un sistema de dos bandas, donde se encuentran presentes la banda de conducción (curva superior) y la banda de valencia (curva inferior). En este modelo, el fondo de la banda de conducción se encuentra a una energía potencial mayor, valor que corresponde a la banda prohibida E_g .

De igual manera, podemos observar en la Figura 3.8 que la curva correspondiente a la banda de valencia tiene un comportamiento inverso a la parábola de la banda de conducción debido a que si los electrones pudieran tener un movimiento en red en dicha banda, estos serían acelerados en dirección opuesta en la que se deberían de mover si estuvieran en la banda de conducción, tal como si tuvieran masa negativa.

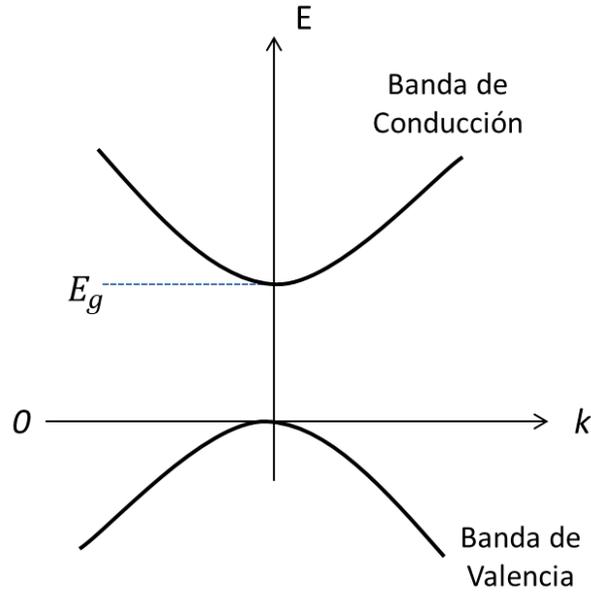


Figura 3. 8.- Energía vs Momento en un sistema de dos bandas prohibidas directas; En la figura se puede observar la Banda de Conducción con una parábola positiva con el punto mínimo en Energía de banda prohibida. De igual manera, se puede observar la Banda de valencia como una parábola negativa, en representación de la emisión de fotones.

3.4.2.- Distribución de Densidad de Estados

Las superficies de energía pueden llegar a ser considerados como primera aproximación como si fuesen de forma esférica, o como si fuera un medio isotrópico. Asumiendo lo anterior, el volumen del espacio k entre las esferas de energía E y $E + dE$ es $4\pi k^2 dk$. En el caso anterior, E es medido con respecto el borde de la curvatura de la banda.

Dado que un solo estado ocupa un momento espacial de un volumen de $8\pi^3/V$, siendo V la unidad de volumen del cristal, y ya que existen dos estados por nivel, el número de estados de energía en el intervalo de E y $E + dE$ es:

$$N(E)dE = \frac{\sqrt{(2m^*)^3}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} dE \quad (3.25)$$

La densidad total de estados hasta cierta energía E puede ser encontrada con:

$$N = \frac{\sqrt{(2m^*E)^3}}{3\pi^2\hbar^3} \quad (3.26)$$

ya que en general los valles de las bandas de energía son superficies elipsoidales y no esféricas, la masa efectiva tiene un comportamiento no isotrópico, por lo que un promedio de densidad de estados de masa efectiva es necesario:

$$m^* = \sqrt[3]{m_l^* m_{tl}^* m_{ts}^*} \quad (3.27)$$

donde m_l^* es la masa efectiva longitudinal y m_{tl}^* y m_{ts}^* son las dos masas efectivas transversales. En el modelo presentado con anterioridad, las contribuciones de cada valle pueden ser tomados en cuenta. Por lo tanto la energía E es:

$$N = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} \sum_j g_j (2m_j^*)^{\frac{3}{2}} (E - E_j)^{\frac{3}{2}} \quad (3.28)$$

En la Ecuación (3.28) g_j es el número de valles de tipo j, m_j^* es el promedio de masa efectiva en el valle j y E_j es la energía en la parte inferior del valle j. Este procedimiento se aplica de manera similar para la banda de valencia.

3.5.- Propiedades Ópticas de una celda solar

Las pérdidas ópticas afectan de manera considerable la potencia de una celda solar al reducir la densidad de corriente en corto circuito. Las pérdidas ópticas consisten básicamente en la luz que es reflejada en la parte de la superficie frontal de la estructura, o por la luz que no ha sido absorbida por la celda solar.

Por lo anterior a continuación se cubrirán aspectos ópticos tales como la transmisión y la reflexión y la eficiencia cuántica interna, parámetros que han sido considerados a lo largo de este trabajo con el fin de considerar las pérdidas mencionadas con anterioridad.

3.5.1.- Transmisión y Reflexión

La absorción o transmisión óptica son utilizadas para determinar los coeficientes de absorción ópticos y ciertas impurezas que se encuentran dentro de un material.

Ciertas impurezas poseen líneas de absorción características que se deben a modos de vibración del material. Durante la transmisión, la luz incidente en el material (una muestra) y la luz transmitida están en función de la longitud de onda.

Cuando se hace una medición, la muestra es caracterizada por el coeficiente de reflexión R, el coeficiente de absorción α , el coeficiente de reflexión complejo y el grosor d.

El coeficiente de absorción puede ser relacionado al coeficiente de extinción k y a la longitud de onda por medio de $\alpha = 4\pi k/\lambda$. Cuando se tiene una transmitancia T con un coeficiente de reflexión igual tanto en la superficie frontal como la trasera y la luz es incidente al material, la transmitancia puede ser representada como:

$$T = \frac{(1 - R)^2 e^{-\alpha d}}{1 + R^2 e^{-2\alpha d} - 2R e^{-\alpha d} \cos \phi} \quad (3.29)$$

donde $\phi = 4\pi n_1 d/\lambda$ y la reflectancia está dada por:

$$R = \frac{(n_0 - n_1)^2 + k^2}{(n_0 + n_1)^2 + k^2} \quad (3.30)$$

Por medio de la medición de la absorción, la banda prohibida puede ser determinada al medir el coeficiente de absorción en función de la energía del fotón. La luz es absorbida en el material cuando la energía de esta sea mayor que la de la banda prohibida [18]

En el caso de los semiconductores, generalmente $\alpha \approx 0$ lo que significa que pueden llegar a ser considerados transparentes, por lo que cuando las energías de los fotones son menores a la energía de la banda prohibida, la transmitancia pasa a ser:

$$T = \frac{(1 - R)^2}{1 + R^2 - 2R \cos \phi} \quad (3.31)$$

Cuando existe la presencia de impurezas en un semiconductor, estas pueden llegar a presentar absorción. La transmitancia con absorción es:

$$T = \frac{(1 - R)^2 e^{-\alpha d}}{1 - R^2 e^{-2\alpha d}} \quad (3.32)$$

Así mismo, cuando existen superficies ásperas en el semiconductor, la transmitancia se vuelve dependiente de la longitud de onda y T puede variar significativamente de oblea a oblea [18].

En el momento que se tiene un dispositivo con diferentes capas de diferentes materiales, como lo llega a ser una celda solar, las ecuaciones anteriormente presentan ciertas variaciones como se mostrará a continuación.

Basándose en la teoría de Fresnel cuando la luz tiene una incidencia cercana a la normal, y considerando la parte imaginaria del índice de refracción representada como $n^* = n - nk$, la Ecuación (3.30) puede ser reescrita como:

$$R = \frac{(n_1 - n_2)^2 + (k_1 - k_2)^2}{(n_1 + n_2)^2 + (k_1 + k_2)^2} \quad (3.33)$$

La Ecuación (3.33) representa el coeficiente de reflexión en la interfaz entre dos materiales en contacto. En el presente trabajo, se consideraran los índices de refracción del sustrato (vidrio), CdS y de la capa activa (PbS, CdTe, CdSe).

De igual manera en un dispositivo multicapas, la luz que es transmitida y que alcanzará la capa absorbidora después de todas las reflexiones es calculada por medio de:

$$T(\lambda) = (1 - R_{n,m})(1 - R_{n+1,m+1})(1 - R_{n+2,m+2})(1 - R_{n+3,n+4}) \quad (3.34)$$

Al momento en que se toman en cuenta los coeficientes de absorción entre la capa activa y la capa absorbidora, la Ecuación del coeficiente de transmisión (3.34) es representada como:

$$T(\lambda) = (1 - R_{n,m})(1 - R_{n+1,m+1})(1 - R_{n+2,m+2}) \\ (1 - R_{n+3,n+4})(e^{-\alpha_n d_n})(e^{-\alpha_{n+1} d_{m+1}}) \quad (3.35)$$

donde $\alpha_n, \alpha_m, d_n, d_m$ son los coeficientes de absorción y los grosores de la capa ITO y la capa CdS, respectivamente. En la sección a continuación se cubrirá la eficiencia cuántica interna.

3.5.2- Eficiencia cuántica Interna

La eficiencia cuántica muestra el porcentaje de los pares electrón-hueco generados con respecto a los fotones incidentes [21]. Así mismo, la eficiencia cuántica interna η_{int} define que tan efectivamente la potencia óptica es convertida a pares electrón hueco, los cuales contribuyen a la fotocorriente. Para casos como en dispositivos con el Silicio, la luz con longitudes de onda grandes penetran a gran nivel en el sustrato y la recombinación puede llegar a reducir la eficiencia cuántica interna.

La IQE (por sus siglas en inglés) tiene un comportamiento que depende directamente de la frecuencia, dado que dos efectos de transporte son involucrados: el arrastre de portadores y la difusión de portadores. [21].

Para el caso de las celdas solares, la IQE puede ser definida como la relación del número de portadores de carga extraídos de la celda con respecto al número de fotones absorbidos en la capa activa [22].

Dado que las mediciones IQE normalizan la eficiencia de generación de corriente con la eficiencia de absorción de luz, estas separan las propiedades electrónicas de las propiedades ópticas. Así mismo la magnitud de la IQE está inversamente relacionada a la cantidad de recombinaciones que están ocurriendo en la celda, mientras que la forma espectral de la curva puede proveer información acerca de la eficiencia de recolección de excitones en la celda, o sobre la dependencia espacial de la recombinación de carga.

Determinar las contribuciones de la capa activa de la celda solar en la IQE puede llegar a ser todo un reto, ya que requiere un modelado óptico que relacione la absorción total con la absorción de cada capa. El modelo más preciso, que es comúnmente usado, utiliza un formalismo de matriz de transferencia que calcula la interferencia de ondas coherentes reflejadas y transmitidas en cada interfaz en la hetero-estructura. Estos cálculos requieren conocimiento de un gran número de parámetros entre los que se encuentran el índice de reflexión n (parte real) y el índice de reflexión en su parte compleja (relacionado al coeficiente de extinción) el cual es responsable de la absorción en un medio. A continuación, se mostrará la teoría acerca de la eficiencia cuántica.

3.5.3.- Derivación de la Eficiencia Cuántica Interna

La eficiencia cuántica interna η_{int} puede ser desarrollada a partir de la ecuación de continuidad la cual es resuelta utilizando condiciones de límite.

La solución exacta de dicha ecuación, tomando en cuenta los componentes de difusión y de arrastre, así como la recombinación en la superficie entre dos capas de semiconductores, puede ser expresada de la siguiente forma:

$$\eta_{int} = \frac{1 + \frac{S}{D_n} \exp\left(-\frac{W^2}{W_0^2}\right) [A(\alpha) - D_1(\alpha)]}{1 + \frac{S}{D_n} \exp\left(-\frac{W^2}{W_0^2}\right) B} - \frac{\exp(-\alpha W)}{1 + \alpha L_n} - D_2(\alpha) \quad (3.36)$$

donde S es la velocidad de recombinación en la superficie frontal de la celda, D_n es el coeficiente de difusión de los electrones, $L_n = \sqrt{\tau_n D_n}$ es la longitud de difusión. Los Valores A , B , D_1 y D_2 son funciones integrales del coeficiente de absorción α , W representa el ancho de la zona de agotamiento (o también llamada región de carga espacial) y la longitud efectiva Debye es representada por $W_0 = \sqrt{\varepsilon \varepsilon_0 kT / q^2 (N_a - N_d)}$.

La ecuación (3.16) puede ser reducida cuando W y la región de distancia x sean iguales, esto implica que los términos D_1 y D_2 puedan ser despreciados. De manera similar, al calcular los valores de $A(\alpha)$ y B , Las integrales pueden ser remplazadas por multiplicaciones de los valores máximos de los integrandos por su “anchura media”. Las anchuras medias son determinadas por el valor de x en el punto en el que el valor del integrando es más pequeño que el valor pico de un factor de $e=2.71$. Tras aplicar lo anteriormente mencionado, la ecuación (3.16) queda de la siguiente manera:

$$\eta_{int} = \frac{1 + \frac{S}{D_n} \left(\alpha + \frac{2 k_0 - qV}{W kT} \right)^{-1}}{1 + \frac{S}{D_n} \left(\frac{2 \phi_0 - qV}{W kT} \right)^{-1}} - \frac{\exp(-\alpha W)}{1 + \alpha L_n} \quad (3.37)$$

Las ecuaciones anteriores no toman en cuenta la recombinación en la superficie trasera de la capa activa de la celda solar, lo cual puede llevar a pérdidas significantes en caso de capas activas delgadas con una longitud de difusión grande de los portadores minoritarios. Para la derivación de (3.36), la condición de $\Delta n = 0$ cuando $x \rightarrow \infty$.

La Ecuación (3.37) puede ser transformada en la ecuación de Gartner [23] cuando no exista alguna recombinación en la superficie frontal, quedando de la siguiente manera:

$$\eta_{int} = 1 - \frac{\exp(-\alpha W)}{1 + \alpha L_n} \quad (3.38)$$

La Ecuación (3.38) ignora de igual manera la recombinación en la parte posterior de la capa activa. En este caso, la producción fotoeléctrica cuántica causada por procesos en la

región de carga espacial es igual a la absorbancia de esta capa. En otras palabras $1 - e^{-\alpha W}$. Por lo anterior la expresión para el componente de difusión de la producción fotoeléctrica cuántica es:

$$\eta_{diff} = \exp(-\alpha W) \frac{\alpha L_n}{1 + \alpha L_n} \quad (3.39)$$

La Ecuación (3.39) igual en que los caso anteriores ignora la recombinación en la superficie trasera del dispositivo. La ecuación para el componente de arrastre de la generación de fotoeléctrica cuántica puede ser obtenida sustrayendo el término derecho de la ecuación (3.40), tomando en cuenta la recombinación entre la capa de ventana y la capa activa. Por lo tanto la ecuación queda de la siguiente manera (eficiencia de arrastre):

$$\eta_{drift} = \frac{1 + \frac{S}{D_n} \left(\alpha + \frac{2}{W} \frac{\phi_0 - qV}{kT} \right)^{-1}}{1 + \frac{S}{D_n} \left(\frac{2}{W} \frac{\phi_0 - qV}{kT} \right)^{-1}} - \exp(-\alpha W) \quad (3.40)$$

Para el componente de difusión (Eficiencia de difusión) la generación de fotocorriente cuántica que toma en cuenta la recombinación de la superficie trasera de la capa activa (para este trabajo PbS, CdTe y CdSe), es posible utilizar la ecuación de una capa (3.41), la cual es modelada para una celda solar de unión $p-n$ [24].

$$\eta_{dif} = \frac{\alpha L_n}{\alpha^2 L_n^2 - 1} e^{-\alpha W} \times \left\{ \alpha L_n - \frac{\frac{S_b L_n}{D_n} \left[\cosh\left(\frac{d-W}{L_n}\right) - e^{-\alpha(d-W)} \right] + \sinh\left(\frac{d-W}{L_n}\right) + \alpha L_n e^{-\alpha(d-W)}}{\frac{S_b L_n}{D_n} \sinh\left(\frac{d-W}{L_n}\right) + \cosh\left(\frac{d-W}{L_n}\right)} \right\} \quad (3.41)$$

En (3.41) L_n es la longitud de Difusión, S_b es la velocidad de recombinación en la superficie trasera de la capa activa, D_n es el coeficiente de difusión para electrones, y d es el grosor de la capa activa.

La eficiencia total puede ser representada como la suma del componente de arrastre y el componente de difusión.

$$\eta_{int} = \eta_{drift} + \eta_{diff} \quad (3.42)$$

3.6.- Propiedades Eléctricas de una Celda Solar

Con el fin de obtener la eficiencia máxima, el comportamiento de una celda solar puede ser fácilmente representado como un diodo de unión *pn*. Por lo anterior, es posible obtener la curva *I-V* a partir de la ecuación correspondiente al modelo eléctrico representado en la Figura 3.9. La curva *I-V* es formada a partir del traslape de la curva característica de un diodo en la oscuridad y la curva que se forma una vez que la luz genera una corriente a través del circuito [25]. Una vez que la celda solar es iluminada por luz solar esta añade corriente a las corrientes existentes en la oscuridad. El fenómeno anterior es descrito por la siguiente ecuación:

$$I = I_L - I_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1 \right] \quad (3.43)$$

Donde I_L es la corriente generada por luz, I_0 es la corriente de saturación en la oscuridad y n es el factor de idealidad. La Ecuación (3.43) representa la corriente de una celda solar ideal. Generalmente para una celda solar, esta curva es expresada en términos de densidad de Corriente J (A/cm²).

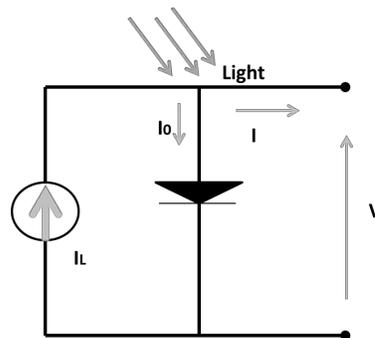


Figura 3. 9.- Modelo equivalente de circuito eléctrico para una celda solar.

Con el fin de obtener un cálculo más preciso para la curva *J-V* de la celda solar, diversos parámetros son tomados en cuenta, tales como la irradiación solar, la eficiencia cuántica (mencionada en la sección anterior) densidad de corriente en corto circuito y el circuito de voltaje abierto. Dichos parámetros serán comentados en las secciones siguientes.

3.6.1.- Corriente en Corto Circuito

La corriente de corto circuito a través de una celda solar ocurre cuando el voltaje que pasa por la celda es igual a 0. La corriente en corto circuito se puede decir que se debe a la generación y colección de portadores los cuales son generados cuando la luz incide en la superficie de la celda solar. Como se puede observar en la Figura 3.9, la cual representa una curva característica $I-V$, la corriente en corto circuito es cruce por cero en el eje x , mientras que el cruce por 0 en el eje y representa el voltaje en circuito abierto, como se mencionó con anterioridad.

La corriente de corto circuito depende de un número de factores los cuales son descritos a continuación: el área de la celda solar, el número de fotones, el espectro de la luz incidente, las propiedades ópticas de la celda y la probabilidad de colección.

Debido a lo mencionado con anterioridad, en este trabajo se han considerado las propiedades ópticas tales como reflexión y absorción, por lo que la densidad de corriente ha sido considerada como la ecuación que se muestra a continuación:

$$J_{SC} = q \sum_i T(\lambda) \frac{\phi_i(\lambda_i)}{h\nu_i} \eta(\lambda_i) \Delta\lambda_i \quad (3.44)$$

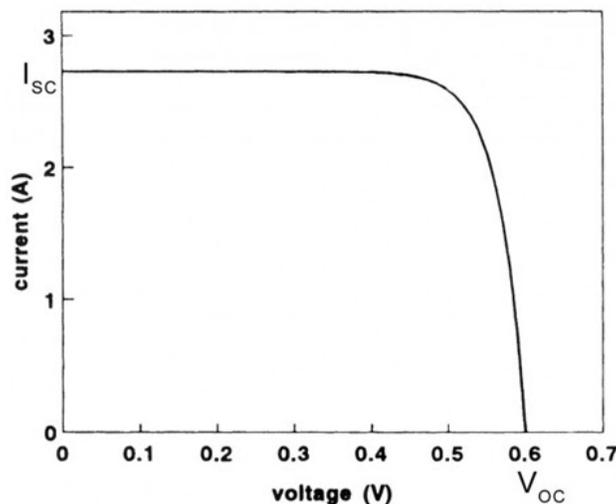


Figura 3. 10.- Curva característica $I-V$ de una celda solar (<https://www.itacanet.org>).

En la cual $T(\lambda)$ es el espectro de transmisión a través de las capas de la heteroestructura, ϕ_i es la densidad de potencia de radiación espectral, η es la eficiencia cuántica, $\Delta\lambda$ es el valor entre las dos longitudes de onda continuas y $h\nu$ es la energía del fotón. Conforme la luz incide en la celda solar, la curva $J-V$ puede ser movida al cuarto cuadrante de donde la potencia puede ser extraída. Para este trabajo se está utilizando la es estándar ASTM G-173-03, bajo las condiciones de AM 1.5 Direct, la cual tiene una densidad de potencia integrada de 900 W/m².

3.6.2.- Densidad de Corriente en oscuridad

La función de la curva $J-V$ puede ser representada de la siguiente manera:

$$J(V) = J_d - J_{ph} \quad (3.45)$$

Donde J_d es la densidad de corriente en oscuridad y J_{ph} es la densidad de corriente generada como resultado del efecto fotovoltaico (para este caso $J_{ph}=J_{SC}$). La densidad de corriente de oscuridad se debe principalmente a la recombinación de portadores que produce el voltaje externo necesario para poder entregar energía a la carga.

De acuerdo a la teoría de generación y recombinación de Sah-Noyce –Shockley[26], la tasa de generación - recombinación en una distancia x en la región de carga espacial es un parámetro de suma importancia al momento de determinar la densidad de corriente $J(v)$.

Lo anterior dado a que esta está directamente relacionada a la corriente de recombinación-generación. La tasa de recombinación-generación es denotada por U y se encuentra por medio de la siguiente ecuación:

$$U(x, V) = \frac{n(x, V)P(x, V) - n_i^2}{\tau_{p0}[n(x, V) + n_1] + \tau_{n0}[P(x, V) + P_1]} \quad (3.46)$$

En la ecuación (3.46) $n(x, V)$ y $P(x, V)$ son la concentración de portadores en las bandas de conducción y de valencia respectivamente, n_i es la concentración intrínseca de portadores, τ_{p0} y τ_{n0} son los tiempos de vida de los huecos y electrones, y n_1 y P_1 son parámetros obtenidos de la energía entre la banda de valencia y el nivel de generación-recombinación.

Como es reportado en [26] por Sah y Noyce, para condiciones donde exista una alimentación inversa grande, una aproximación de U puede ser aplicada.

Bajo dicha condición, la tasa de recombinación puede ser considerada como una constante sobre la región de transición y la corriente de huecos obteniendo una dependencia proporcional a la distancia. Por lo tanto, la ecuación (3.46) puede ser sustituida por:

$$-U = n_i \left[2\sqrt{\tau_{p0}\tau_{n0}} \cosh\left(\frac{E_t - E_i}{kT} + \frac{1}{2} \ln \frac{\tau_{p0}}{\tau_{n0}}\right) \right]^{-1} \quad (3.47)$$

La ecuación (3.47) sobreestima ligeramente la corriente de recombinación-generación dado que U llega a cero cuando se acerca al borde de la región de carga espacial W . Debido a ello la corriente de generación-recombinación considerando lo anterior puede ser definida como:

$$J_{gr} = qUW \quad (3.48)$$

donde q es la carga del electrón.

La corriente del electrón J_e a través de la capa de ventana y la capa activa puede ser comparado nuevamente de manera análoga al fenómeno que ocurre en un diodo pn , por lo que una variación a la Ecuación (3.43) puede ser desarrollada considerando la concentración de electrones en la región de volumen (bulk) de la capa activa, lo que resulta en:

$$J_e = q \frac{n_p L_n}{\tau_n} \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (3.49)$$

y

$$n_p = N_c \exp\left(-\frac{E_g - \Delta\mu}{kT}\right) \quad (3.50)$$

$$N_c = 2 \left(\frac{m_n kT}{h^2}\right)^{3/2} \quad (3.51)$$

En la cual n_p es la concentración de electrones en la capa absorbadora, N_c es la densidad de estado efectiva correspondiente a la banda de conducción, E_g es la energía de banda prohibida en la capa activa, $\Delta\mu$ es la separación entre la energía de Fermi y el pico de la banda de valencia de la capa activa, y m_n es la masa efectiva del electrón.

Considerando todo lo anterior, la densidad de corriente en oscuridad puede ser calculada de la siguiente manera:

$$J_d = J_{gr} - J_e \quad (3.52)$$

3.6.3.- Voltaje de Circuito Abierto

El voltaje de circuito abierto, V_{oc} , es el máximo voltaje disponible desde una celda solar y ocurre cuando la corriente es igual a 0. La ecuación (3.53) calcula el voltaje de circuito abierto cuando la corriente de malla se iguala a cero en la celda solar quedando como:

$$V_{oc} = \frac{nkT}{q} \ln \left(\frac{I_L}{I_0} + 1 \right) \quad (3.53)$$

En esta ecuación V_{oc} depende de la corriente de saturación de la celda solar y de la corriente generada por iluminación. Se puede decir que el V_{oc} es una forma de medir la cantidad de recombinación que existe en el dispositivo.

El V_{oc} también puede ser determinado a partir de la concentración de aceptores de dopaje como se muestra a continuación:

$$V_{oc} = \frac{kT}{q} \ln \left[\frac{(N_A + \Delta n)\Delta n}{n_i^2} \right] \quad (3.54)$$

Donde kT/q es el voltaje térmico, N_A es la concentración de dopaje, Δn es el exceso de concentración de portadores y n_i es la concentración intrínseca.

Es importante mencionar que el V_{oc} también puede ser calculado en función de la banda prohibida; razón por la cual se establecen las relaciones que cuando la corriente de corto circuito disminuye conforme aumenta la banda prohibida, el voltaje de circuito abierto aumenta cuando la energía de banda prohibida aumenta [27].

3.6.4.- Factor de Llenado FF

La corriente de corto circuito y el voltaje de circuito abierto son la máxima corriente y voltaje respectivamente de una celda solar. Sin embargo, en ambos de estos puntos de operación, la energía de la celda es igual a 0. El Factor de Llenado o FF por sus siglas en inglés (Fill Factor) es un parámetro el cuál en conjunto con V_{oc} y J_{SC} , determina la máxima densidad de potencia proveniente de una celda solar.

Una forma simple de representar el FF es por medio gráfico. La gráfica representa una medida de la cuadratura de la celda solar. Dicha cuadratura es creada al encontrar el área del rectángulo más grande que pueda ser ajustado dentro de la curva $J-V$.

Dado que el FF es una medida de cuadratura de la curva $J-V$, una celda solar con un voltaje alto tiene posibilidad de tener un mayor FF.

El FF puede ser determinado empíricamente como:

$$FF = \frac{V_{mp}J_{mp}}{V_{oc}J_{sc}} \quad (3.55)$$

donde V_{mp} es el voltaje máximo y J_{mp} es la densidad de corriente máxima como se muestra en la Figura 3.10 del FF.

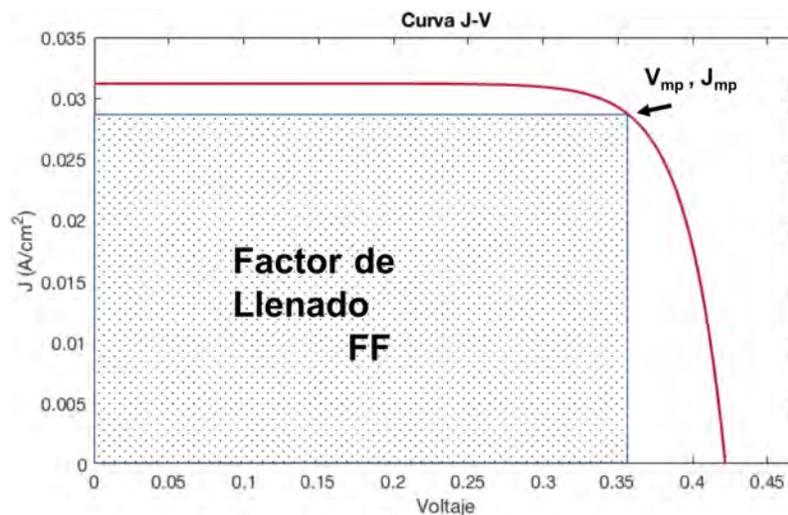


Figura 3. 11.- Representación del Factor de Llenado FF dentro de una curva J-V.

3.6.5.- Resistencia Característica

La resistencia característica de una celda solar R_{ch} es definida como la resistencia de la celda en el punto de potencia máximo. Si la resistencia de la carga la cual está conectada a la celda es igual a R_{ch} , se dice entonces que la celda solar está trabajando en su punto máximo en la carga [28].

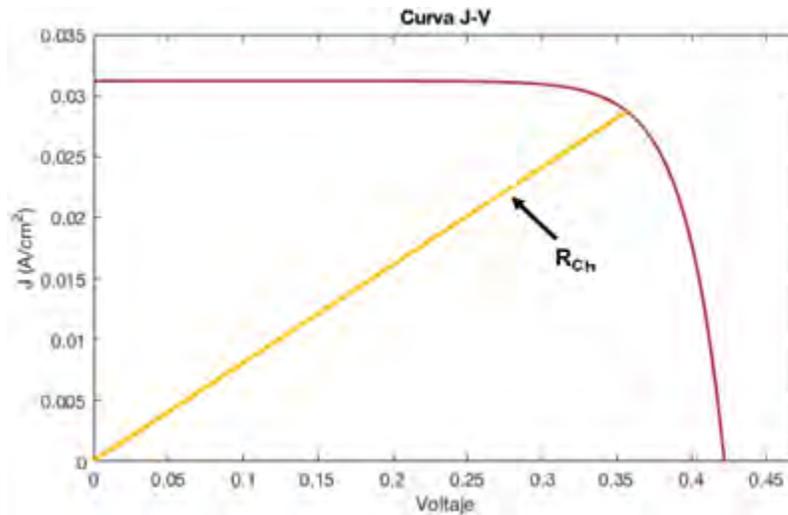


Figura 3. 12.- Representación de la Resistencia Característica dentro de una curva J-V.

La resistencia característica puede ser calculada por medio de la siguiente ecuación:

$$R_{ch} = \frac{V_{mp}}{J_{mp}} \approx \frac{V_{OC}}{J_{SC}} \quad (3.56)$$

donde V_{mp} y J_{mp} son el voltaje máximo y densidad de corriente máxima respectivamente.

3.6.6.- Eficiencia de una Celda Solar η

La eficiencia de una celda solar es la relación de potencia convertida en energía eléctrica y la cantidad de luz total absorbida por la celda. La eficiencia es uno de los parámetros principales utilizados en la actualidad para caracterizar, y por ende, comparar el rendimiento de una celda solar.

Como se ha cubierto a lo largo de este capítulo, la eficiencia depende del rendimiento de la celda con respecto a las pérdidas por absorción y reflexión. Así mismo, la eficiencia también depende de la intensidad de la incidencia de la luz solar y de la temperatura a la cual estará operando la celda bajo observación. En mediciones prácticas, es importante tener en consideración dichos aspectos al momento de realizar las comparaciones entre diversos modelos de celdas solares. Para casos teóricos, las celdas son consideradas que trabajan bajo condiciones de AM 1.5 y a una temperatura de 25° C.

La eficiencia de una celda, de acuerdo a su definición práctica mencionada con anterioridad puede ser calculada de la siguiente manera:

$$\eta = \frac{V_{oc}J_{sc}FF}{P_{in}} \quad (3.57)$$

Donde P_{in} es la potencia de entrada de la celda solar. La potencia máxima es descrita como:

$$P_{max} = V_{oc}J_{sc}FF \quad (3.58)$$

Los capítulos 4 y 5 describen los resultados obtenidos de las celdas estudiadas en este trabajo de tesis.

CAPÍTULO 4 .- SIMULACIÓN Y RESULTADOS DE LA HETERO-ESTRUCTURA

A lo largo de este capítulo se cubrirá la metodología utilizada para la simulación de la hetero-estructura. Los resultados de igual manera, serán analizados. Dentro de dichos resultados se encuentran: la eficiencia cuántica interna, las curvas $J-V$, la potencia máxima de salida, Factor de Llenado (Fill Factor) y la eficiencia máxima η .

De igual manera, se cubrirán aspectos generales de los materiales utilizados como son el CdS como capa de ventana, y los 3 materiales (PbS, CdTe y CdSe) utilizados como ventana activa. Se denotarán los parámetros requeridos por el programa de Simulación de Modelado Matemático (SMM) empleado en Matlab tales como índice de refracción de los materiales, coeficiente de extinción, permitividad relativa, movilidad de portadores, entre otros.

Finalmente se considera un análisis comparativo entre los diferentes casos, comparando las propiedades de caracterización de una celda solar, entre las que se encuentran la densidad de corriente en corto circuito, voltaje de circuito abierto, voltaje máximo, densidad de corriente máxima, densidad de potencia de salida máxima, factor de llenado y eficiencia máxima.

4.1.- Materiales Utilizados Para la Hetero-estructura

La hetero-estructura utilizada para esta investigación, como se ha mencionado en capítulos anteriores consta de 4 principales capas como se muestra en la Figura 4.1. En la Figura se puede observar el modelo en el que está basado el SMM. Dentro del modelo se considera una capa de vidrio la cual sirve como sustrato; después se tiene una capa de Óxido de Indio y Estaño (ITO), la cual funciona como contacto superior de la celda.

La siguiente capa es la encargada de funcionar como ventana para la celda y está compuesta de Sulfuro de Cadmio, debido a sus propiedades como semiconductor. La capa absorbidora, o activa, va inmediatamente después de la ventana.

Como se ha mencionado con anterioridad, esta capa es sustituida para cada estudio realizado en este trabajo: primeramente la celda es simulada suponiendo que la capa activa está compuesta de Sulfuro de Plomo (PbS), después esta capa es intercambiada por Telurio

de Cadmio (CdTe) y finalmente es simulada como Seleniuro de Cadmio (CdSe). Finalmente la Figura 4.1 muestra una capa de Aluminio Al como contacto trasero de la estructura. En este punto es importante mencionar nuevamente que los detalles que concierne a las propiedades y efectos causados por los contactos no son considerados en este trabajo.

En las secciones que se muestran a continuación se describirá de manera breve los materiales utilizados que se han mencionado con anterioridad; de igual manera se mostrarán algunas de las propiedades que fueron requeridas de dichos materiales para el modelado y simulación bajo el SMM.

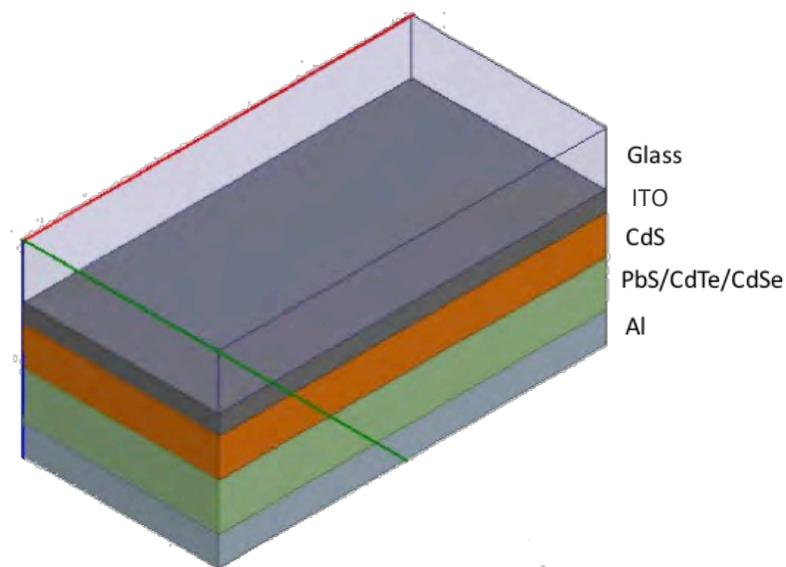


Figura 4. 1.- Hetero-estructura modelada en el SMM. La estructura está compuesta por Vidrio, ITO, CdS, PbS/CdTe/CdsE y Al.

4.1.1.- Óxido de Indio y Estaño ITO

El óxido de Indio y Estaño es una mezcla de óxido de Indio (In_2O_3) y óxido de Estaño (SnO_2) con la fórmula $\text{In}_{2-x}\text{Sn}_x\text{O}_3$. El ITO es un semiconductor que tiene gran conductividad eléctrica. Las capas delgadas de alrededor de 200nm de ITO llegan a ser transparentes en el área de la luz visible. El ITO tiene una densidad aproximadamente de 7 g/cm^3 y es de color amarillento. De acuerdo a su composición, su color puede variar entre azul, verde, amarillo, etc. Este material es considerado actualmente como uno de los materiales conductores transparentes más importantes.

En la industria optoelectrónica es utilizado principalmente como cubierta semiconductor. En la Figura 4.2 se muestra el índice de refracción del ITO utilizado para la simulación presentada, así como el coeficiente de extinción en la Figura 4.3. El índice de refracción determina la reducción de la velocidad de la luz al propagarse a través de un medio, mientras que el coeficiente de extinción (parte imaginaria de n) se relaciona con el decaimiento de la amplitud oscilatoria de un campo incidente en un material. Las gráficas fueron obtenidas a partir de valores presentados en publicaciones de propiedades de materiales [29, 30, 31], y haciendo una interpolación de dichos valores para obtener n y k para cada longitud de onda de nuestro interés.

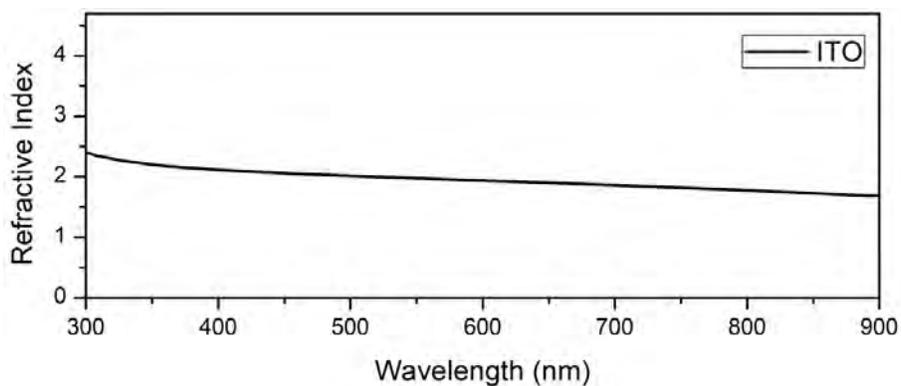


Figura 4. 2.- Índice de refracción (n) para el ITO (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].

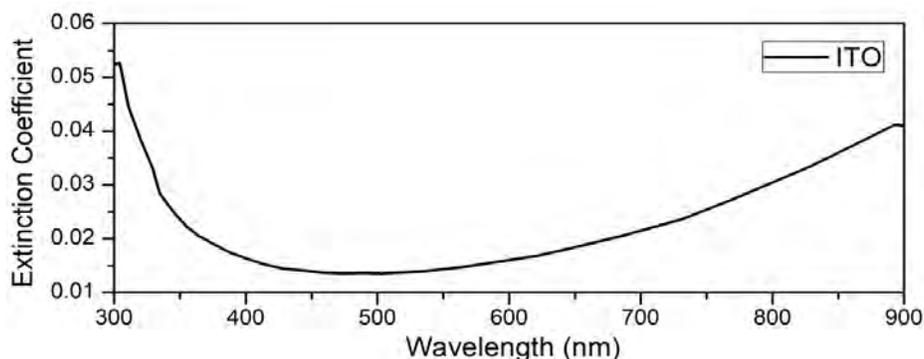


Figura 4. 3.- Coeficiente de extinción (k) para el ITO (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].

4.1.2.- Sulfuro de Cadmio CdS

El Sulfuro de Cadmio es un compuesto inorgánico el cual es representado por la fórmula química CdS. En su representación física, posee un color amarillo y es generalmente utilizado como semiconductor en aplicaciones ópticas y electrónicas. El CdS tiene un peso molecular de 144.47, un peso atómico promedio de 72.24 y un número atómico promedio de 32. El sulfuro de cadmio puede tener tanto la estructura Wurtzita (w-CdS) o Sphalerite (c-CdS). El c-CdS y el w-CdS crecidos artificialmente tienen una variedad relativamente amplia de parámetros de “red” (lattice) dependiendo en los defectos y en la concentración de impurezas.

El w-CdS posee una banda prohibida fundamental ancha de aproximadamente 2.5 eV a 300K [32]. El material ha llegado a ser llamativo para dispositivos ópticos no lineales, celdas solares heterogéneas, y otros dispositivos opto electrónicos en la región espectral del azul – UV [33]. Debido a su naturaleza hexagonal (wurtzita), es ópticamente anisotópico.

Por otra parte, el CdS también puede ser cristalizado en la modificación cúbica de mezcla de Zinc (zinc blende), resultando como c-CdS. Al utilizar la técnica de crecimiento epitaxial por haces moleculares (MBE), el cual permite un crecimiento epitaxial controlado al vacío, y en conjunto con un sustrato adaptado (110) InP es posible crecer cristales de CdS cúbicos con relativa facilidad [33]. Ambos, el w-CdS y el c-CdS son semiconductores directos.

Dentro de los parámetros requeridos por el SMM para el modelado y análisis de resultados, se encuentra el índice de refracción y el coeficiente de extinción. Para dicho modelado, tanto el índice de refracción como el coeficiente de extinción no fueron considerados como constante, lo cual quiere decir que cada valor utilizado depende directamente de la longitud de onda considerada. A continuación la Figura 4.4 muestra la base de datos utilizada para el índice de refracción para el CdS, mientras que la Figura 4.5 presenta el coeficiente de extinción para el mismo material.

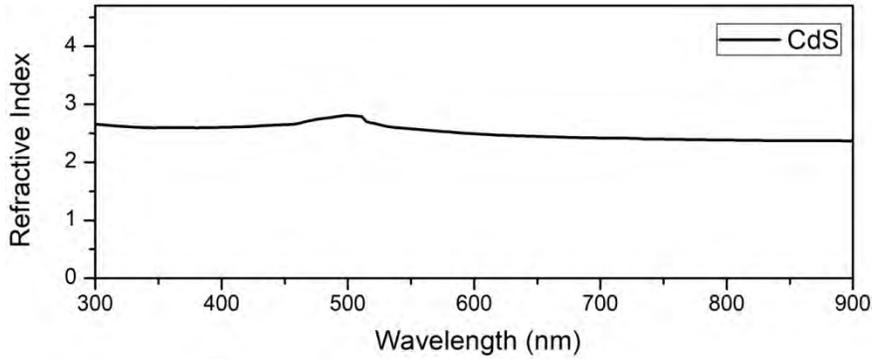


Figura 4. 4.- Índice de refracción (n) para el CdS (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].

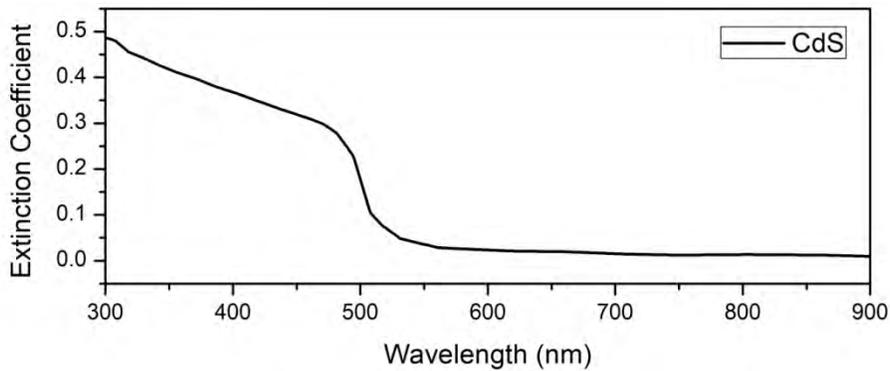


Figura 4. 5.- Coeficiente de extinción (k) para el CdS (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].

4.1.3.- Sulfuro de Plomo PbS

El sulfuro de plomo (PbS) es un semiconductor polar el cual se cristaliza en una estructura cristal tipo “Rocksalt”. Este material exhibe propiedades inusuales, que hasta posiblemente únicos en relación a otros materiales semiconductores. El PbS posee una constante dieléctrica alta, alta movilidad y una banda prohibida fundamentalmente angosta cuyo coeficiente de temperatura es positivo. El material ha sido uno de los principales sujetos de estudio recientemente debido a la importancia tecnológica en cuanto a su uso en una gran variedad de aplicación de dispositivos optoelectrónicos en el rango Infrarrojo.

El PbS dentro del grupo semiconductor IV-VI, ha llamado bastante la atención debido a su banda prohibida directa pequeña de 0.41 eV a 300 K y su gran excitación de radio de Bohr de 18 nm.

Entre sus principales aplicaciones específicas se encuentra el fungir como material absorbedor solar. Para la deposición del PbS, diversos métodos se han utilizado, tales como depósito químico, electrodeposición y “haz epitaxial molecular”. Al igual que en las secciones anteriores, las Figuras 4.6 y 4.7 denotan el índice de refracción y el coeficiente de extinción utilizados para el SMM.

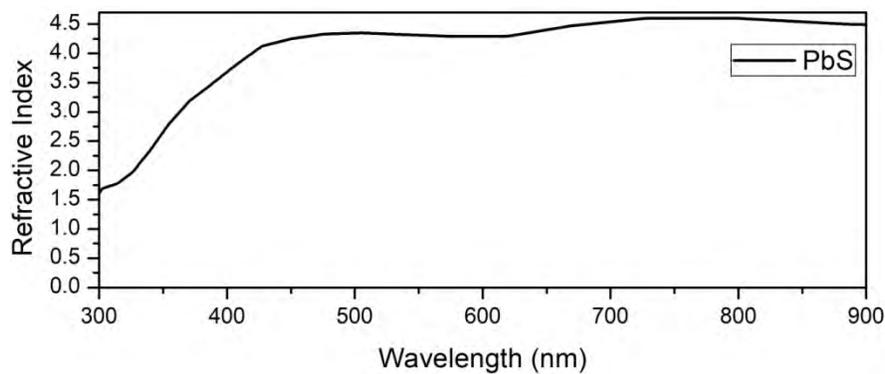


Figura 4. 6.- Índice de refracción (n) para el PbS (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].

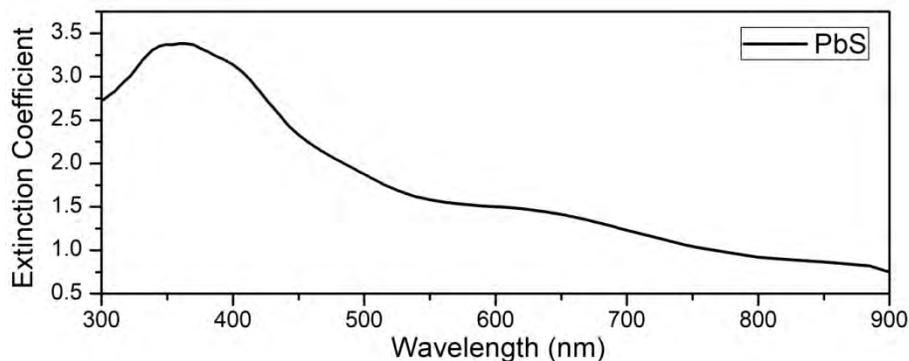


Figura 4. 7.- Coeficiente de extinción (k) para el PbS (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].

4.1.4.- Telururo de Cadmio CdTe

El telururo de cadmio (CdTe) es un semiconductor con banda prohibida directa (1.5 eV a 300 K) el cual se cristaliza cúbicamente en la mezcla de Zinc.

El CdTe ha sido dedicado al desarrollo de cristales semi aislados para aplicaciones de pruebas radiográficas (como detectores de rayos gamma) y para dispositivos ópticos-acústicos.

Como películas delgadas, este material también ha sido utilizado para celdas solares, dispositivos de imagen de cristal líquido y óptica para el rango IR.

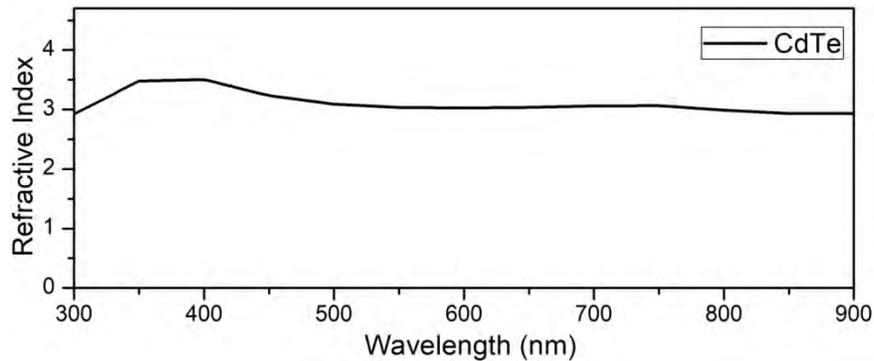


Figura 4. 8.- Índice de refracción (n) para el CdTe (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].

Dentro del ámbito comercial actual, las celdas solares basadas en CdTe representan el segmento más grande de producción de módulos de películas delgadas a nivel mundial [34]. Dentro de los beneficios de celdas solares basadas en CdTe se encuentra la alta absorción debido a su energía de banda prohibida, la cual se acopla de manera adecuada con el espectro solar y su gran habilidad de convertir la luz solar en electricidad. Dentro de otras ventajas se encuentra el bajo costo de manufactura, lo cual también cumple con uno de los objetivos de este trabajo. Al igual que en los casos anteriores, las Figuras 4.8 y 4.9 representan el índice de refracción y el coeficiente de extinción respectivamente. El índice de refracción indica como la luz es transmitida a través del material, mientras que el coeficiente de extinción indica la atenuación de la luz a través este.

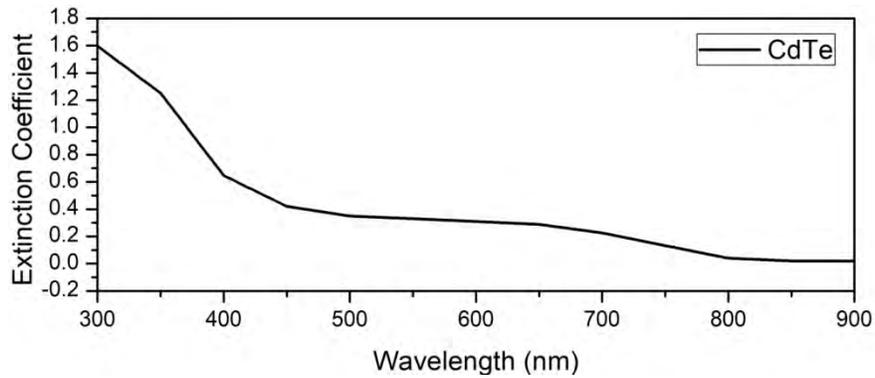


Figura 4. 9.- Coeficiente de extinción (k) (interpolado) para el CdTe utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].

4.1.5.- Seleniuro de Cadmio CdSe

El Seleniuro de Cadmio (CdSe) es un miembro de los componentes semiconductores de la familia II-VI. Al igual que el CdS, el CdSe puede cristalizarse tanto en forma de wurtzita (w-CdSe) o en forma cúbica modificado con mezcla de Zinc (c-CdSe). Utilizando la técnica de MBE y en sustratos adecuados es posible crecer c-CdSe relativamente sencillo. Actualmente se encuentra en trabajo el desarrollo y la aplicación del c-CdSe para aplicaciones electrónicas.

Por otra parte, las aplicaciones del w-CdSe son principalmente celdas fotovoltaicas, materiales foto conductivos, transistores de películas delgadas, grabadores de datos ópticos. En el caso del w-CdSe, el límite de absorción fundamental, alrededor de 1.7 eV, corresponde a las transiciones desde la banda más alta de valencia a la banda de conducción más baja cuando $k=0$. Nuevamente la Figura 4.10 muestra el índice de refracción n del CdSe, mientras que en la Figura 4.11 se puede observar el coeficiente de absorción k .

En las secciones a continuación se tratará la metodología utilizada para el modelado y simulación de la celda solar haciendo las variaciones de la capa activa como se ha mencionado con anterioridad.

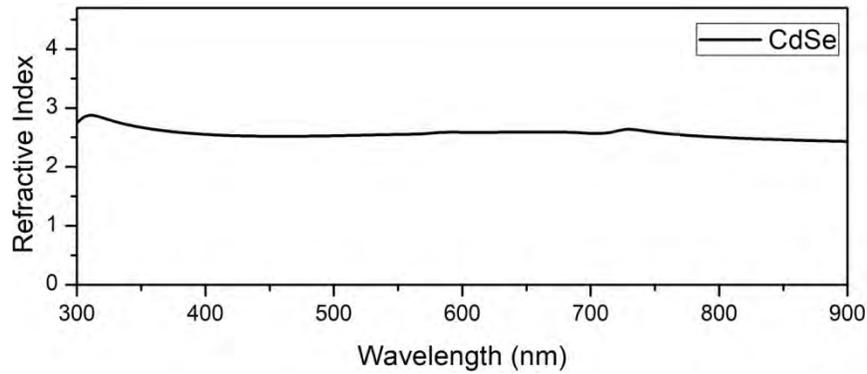


Figura 4. 10.- Índice de refracción n para el CdTe (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].

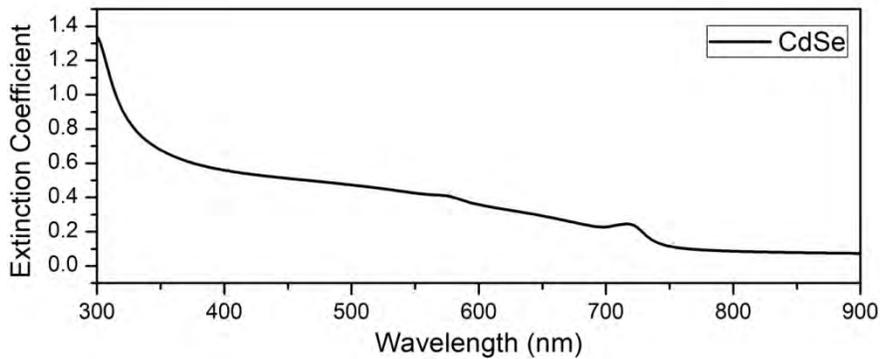


Figura 4. 11.- Coeficiente de extinción k para el CdSe (interpolado) utilizado durante la simulación y modelado de la hetero-estructura presentada en este trabajo. Los valores son considerados como una base de datos que va desde los 300nm hasta los 900nm [29, 30, 31].

4.2.- Cálculo de la Eficiencia Óptica de la Celda Solar

El modelado de la estructura está basado en las ecuaciones y teoría descrita en el capítulo 3. Bajo esta teoría, se procedió a desarrollar un programa en Matlab. Como primer paso, fue necesario determinar la reflexión, transmitancia, coeficiente de transmisión y la absorbancia de las capas de la estructura, parámetros que han sido considerados al momento de determinar la corriente de corto circuito para cada caso modelado.

Una vez conociendo los parámetros mencionados con anterioridad, se procedió a encontrar la eficiencia cuántica interna, la cual como se mencionó en capítulos anteriores, es la suma de la eficiencia cuántica de deriva η_{drift} y la eficiencia cuántica de difusión η_{drift} .

Ciertos parámetros fueron requeridos para efectuar dichos cálculos como la diferencia de concentración de donadores y aceptores, el ancho de la región de carga espacial, permitividad del material, entre otros. Dichos parámetros serán cubiertos a lo largo de este capítulo.

4.2.1.- Cálculo del Coeficiente de Transmisión

El cálculo del coeficiente de transmisión es requerido dado que cuando la luz incide a través de la unión entre la capa de ventana CdS y la capa activa (PbS, CdTe, CdSe) cierta parte de la radiación solar es perdida debido a efectos de reflexión y absorción.

Las pérdidas de reflexión se deben generalmente a las propiedades reflectivas de los materiales que intervienen en la estructura, comenzando desde el vidrio, pasando por el ITO, después por la capa de ventana y finalmente por la capa activa. De igual manera, las pérdidas por absorción ocurren en la unión entre la capa ventana CdS y la capa de ITO. Debido a lo anterior, en los cálculos y simulaciones presentadas en este trabajo se han considerado dichas pérdidas con referencia a la luz transmitida que estaría llegando hasta la capa activa para cada caso de modelado en particular.

Considerando la teoría de la Fresnel presentada en el Capítulo 3 y utilizando las ecuaciones (3.25) y (3.26) el coeficiente de transmisión que alcanza la capa activa, como se mencionó con anterioridad, fue calculada y puede ser observada en la Figura 4.12.

La Figura 4.12 muestra que el coeficiente de transmisión registra valores para los 3 materiales que van desde 0.88 hasta 0.93 dentro del rango de los 300 hasta los 900 nm, siendo el valor más bajado correspondiente para el PbS y el más alto para el CdSe. Una vez que se consideran los efectos de absorción en la simulación, el efecto de transmisión decae hasta valores que van desde 0.21 hasta 0.87.

Se puede observar también que conforme la longitud de onda va aumentando también lo hace el espectro de transmisión. De igual manera a 300 nm una vez que se considera la absorción, el coeficiente de transmisión decrece alrededor de un 70% mientras que en el rango de los 500 nm $T(\lambda)$ decrece un 0.38%.

Dentro de este aspecto, el coeficiente de transmisión es menor que uno debido a los parámetros de absorción y reflexión. $T(\lambda)$ afecta directamente al momento de calcularse la densidad de corriente de corto circuito J_{SC} y por consiguiente tendrá efecto sobre la eficiencia de las celdas solares. A continuación se cubrirá el cálculo de la eficiencia cuántica.

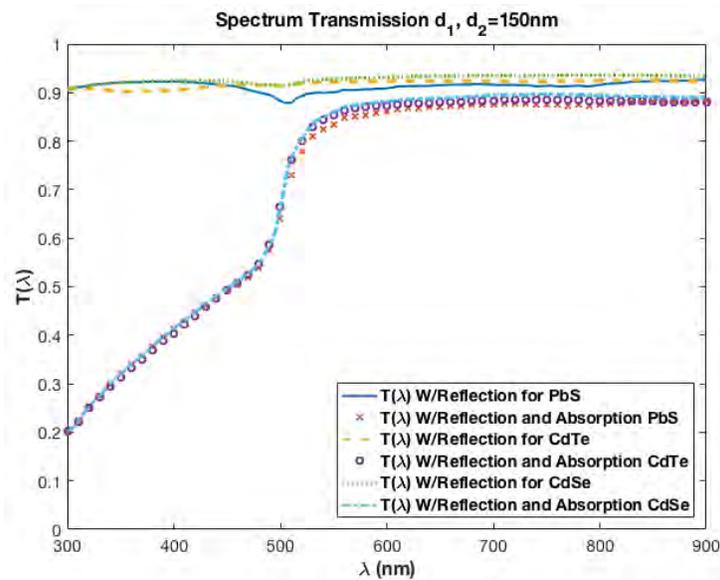


Figura 4. 12.- Coeficiente de Transmisión para los tres modelos: Cds/Pbs, Cds/CdTe y Cds/CdSe.

4.2.2.- Estimación de la Eficiencia Cuántica Interna

Para la estimación de la Eficiencia Cuántica Interna (IQE) es necesario conocer el tamaño de la región de carga espacial W . Utilizando los rangos propuestos en [35] con respecto a la concentración de diferencia de donadores y aceptores N_a-N_d , y la ecuación $W = \left[\frac{(2\epsilon_r\epsilon_0(\phi_0 - qV))}{q^2(N_a - N_d)} \right]^{1/2}$ es posible determinar el dicho valor para cada material correspondiente a la capa activa. La Figura 4.13 muestra la relación entre dicha densidad y el tamaño de la región de carga espacial.

El rango de N_a-N_d va desde $10^{12}/cm^3$ hasta $10^{18}/cm^3$. Debido a que en una celda solar lo que se busca es evitar la recombinación entre huecos y electrones, el tamaño de W debe mantener un valor menor que $0.6 \mu m$; al ser mayor este valor, la eficiencia de deriva alcanza valores mayores a 1 y por consiguiente también lo hace la eficiencia cuántica interna.

De acuerdo a la Figura 4.13, para el PbS el tamaño de la región es de $W=0.28 \mu\text{m}$ lo que corresponde a $N_a - N_d = 10^{17}/\text{cm}^3$; para el CdTe el ancho es de $W=0.26 \mu\text{m}$ o $N_a - N_d = 10^{17}/\text{cm}^3$; finalmente para el CdSe el tamaño de la región de carga espacial es de $W=0.56 \mu\text{m}$ que equivale a $N_a - N_d = 10^{17}/\text{cm}^3$.

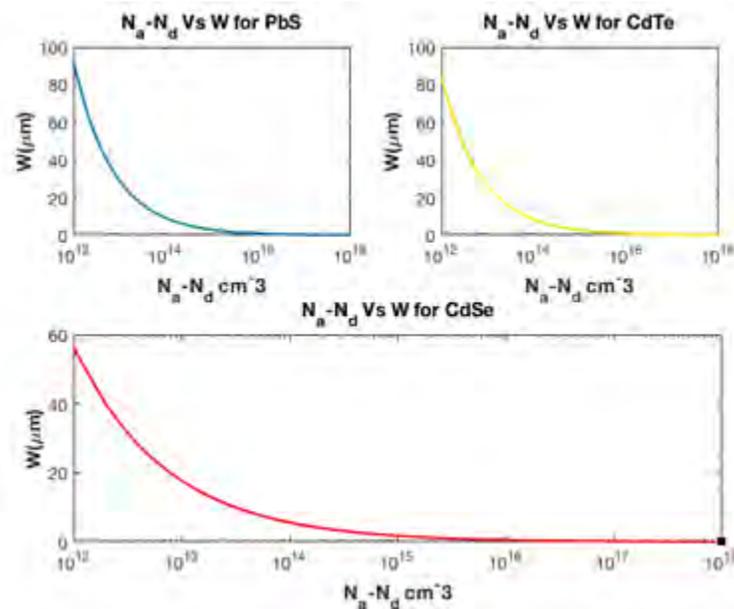


Figura 4. 13.- Concentración de donadores y aceptores N_a-N_d para el PbS (Azul), CdTe (Amarillo) y CdSe (Rojo).

Para la estimación de la Eficiencia Cuántica Interna, las ecuaciones (3.40) y (3.41) son utilizadas. En este punto es importante recordar que la eficiencia cuántica interna está compuesta por la suma de sus 2 componentes, los cuales son la eficiencia de deriva y la eficiencia de difusión. La Figura 4.14 a) muestra la eficiencia de difusión, mientras que la parte b) denota la eficiencia de deriva de la celda cuando es modelada utilizando PbS como la capa activa para ambos casos. El grosor de la capa activa varía desde 0.5 hasta $2 \mu\text{m}$ para el caso de la eficiencia de difusión con W fija.

De la parte a) podemos observar que el componente de difusión de la EQI puede ser controlada conforme el grosor de la capa activa aumenta, lo que lleva a un valor máximo de 44% a una longitud de onda de 880 nm y con un grosor $d_{\text{pbs}} = 2 \mu\text{m}$; por otra parte la η_{Diff} obtiene un valor mínimo de 0.02% a una longitud de onda de 340 nm con un grosor de $d_{\text{pbs}} = 0.5 \mu\text{m}$.

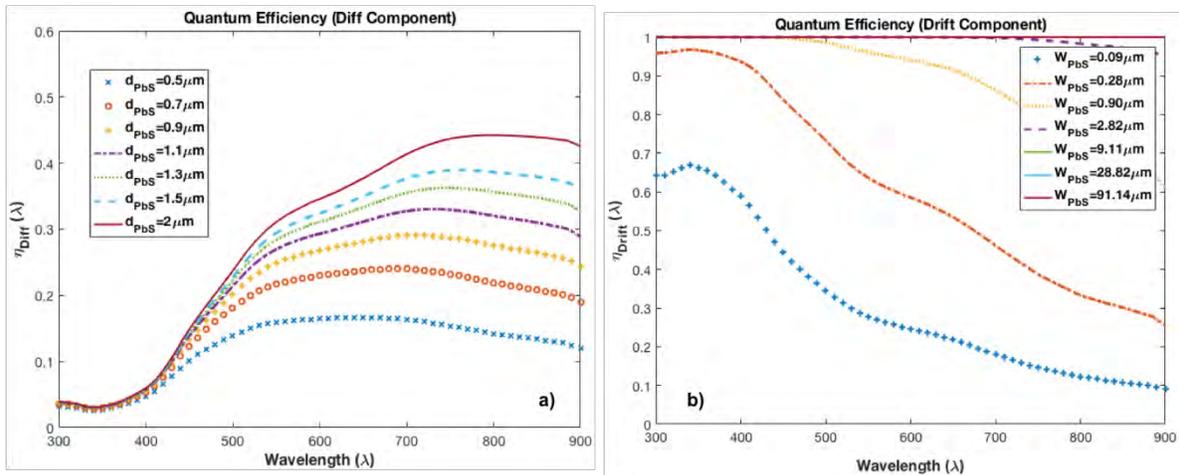


Figura 4. 14.- Componentes de difusión a) y de deriva b) para el modelado de la celda solar con la unión CdS/PbS. El valor de W fue fijado a $0.28 \mu m$. La Figura muestra los parámetros de la eficiencia cuántica interna en el rango de 300 a 900 nm, teniendo resultados más óptimos cuando el grosor de la capa activa es de $2 \mu m$.

De manera similar se calculó ambos componentes de la eficiencia cuántica interna para la estructura con el CdTe como capa activa. La Figura 4.15 a) muestra la eficiencia de difusión variando el ancho de la región de carga espacial W , mismos valores que han sido tomados de la Figura 4.13. Como se puede observar en la Figura 4.15 b), conforme W aumenta, la eficiencia de deriva se va acercando a la unidad debido al efecto de recombinación entre electrones y huecos. Para este modelo de CdS/CdTe el valor máximo obtenido para la eficiencia de deriva es 0.54 con un grosor $d_{CdTe} = 2 \mu m$ y el valor de W ha sido fijado como $W = 0.56 \mu m$.

Finalmente la Figura 4.16 representa los componentes de la EQI para la estructura correspondiente a la unión CdS/CdSe. Como se mencionó con anterioridad e igual que en los casos anteriores, el componente de difusión a) obtiene valores mayores conforme el grosor de la capa activa va aumentando.

El valor máximo de la eficiencia de difusión fue de 0.54 a una longitud de onda de 455 nm. Para este modelo el valor de W fijado fue de $W = 0.56 \mu m$.

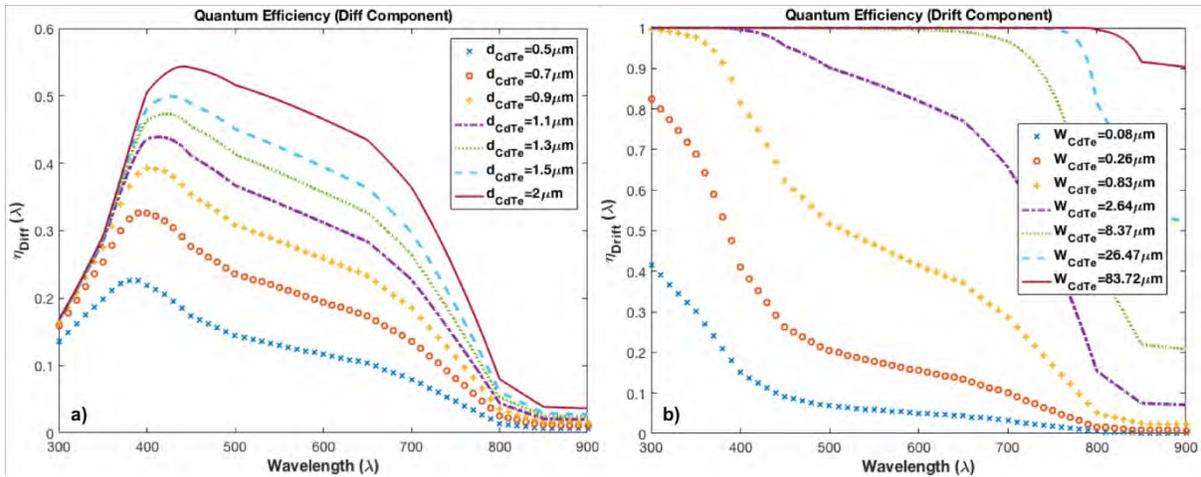


Figura 4. 15.- Componentes de Difusión a) y de Arrastre b) para el modelado de la celda solar con unión CdS/CdTe con un valor fijado para a) de $0.26 \mu\text{m}$. Se denota una mejor eficiencia cuando el grosor de la capa activa obtiene un valor mayor.

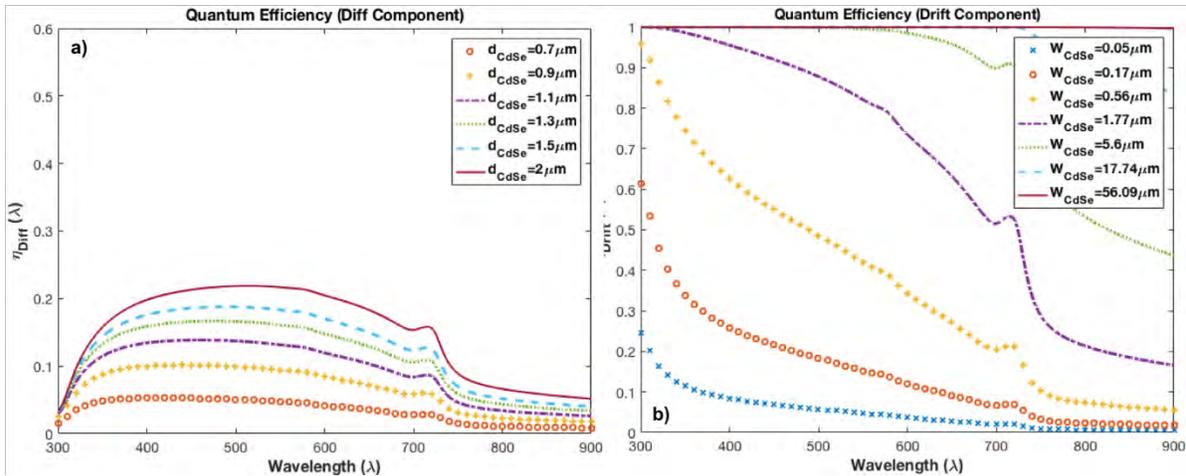


Figura 4. 16.- Componentes de difusión a) y de deriva b) para el modelo de CdS/CdSe. El Valor de la región de carga espacial W fue establecido como $W=0.56 \mu\text{m}$ para la estimación del componente de difusión.

Una vez que se determinaron la eficiencia de difusión y la de deriva, se pudo encontrar la eficiencia cuántica interna para cada modelado sumando ambos componentes ($\eta_{Diff} + \eta_{Drift}$).

Los resultados obtenidos de dichas sumas han sido manejados como matrices (base de datos) para ser utilizados al momento de calcular J_{SC} .

Los valores utilizados para la obtención de los resultados mostrados con anterioridad se presentan en la Tabla 4.1 [18, 26, 31,35].

Tabla 4. 1.- Set de parámetros utilizados para el cálculo de la Eficiencia Cuántica Interna EQI

Parámetros	Materiales			Unidades
	PbS	CdTe	CdSe	
E_g	1.32	1.8	1.7	eV
ϵ_r	17.2	10.16	9.5	-
$\phi_0 - q\psi$	0.7	1	0.48	eV
Na-Nd	10^{18}	10^{18}	10^{17}	cm^{-3}
W	0.28	0.26	0.56	μm
S		10^7		cm/s
D_n	25.8	25	5.5	cm/s
S_b		10^7		cm/s
T		300		K
T_n		10^{-9}		s
T_p		10^{-9}		s
m_0		9.1093×10^{-31}		Kg
m	0.25	0.119	0.11	Kg
n_i		10^{10}		cm^{-3}

4.3.- Cálculo de los Parámetros Eléctricos de la Celda Solar

En esta sección se cubrirán los parámetros que corresponden a las propiedades eléctricas de una celda solar. Primeramente se mostrará el procedimiento que se utilizó para obtener la densidad de corriente J_{SC} , utilizando la eficiencia cuántica interna obtenida en la sección anterior. Posteriormente se hablará sobre la estimación de la curva J-V para el análisis de la celda, así como de los valores obtenidos para la densidad de potencia máxima. De igual manera se cubrirá los factores de llenado FF obtenidos variando el grosor de la capa activa de cada modelo (CdS, CdTe, CdSe) y finalmente se presenta los valores obtenidos para la eficiencia máxima η para cada caso.

4.3.1.- Determinación de la Densidad de Corriente de Corto Circuito J_{SC} y Densidad de Corriente en Oscuridad J_d .

Como se mencionó en la sección 4.2.1 las pérdidas generadas por la transmisión óptica y pérdidas por reflexión han sido consideradas para la determinación de J_{SC} . Dichos

cálculos han sido efectuados bajo el estándar de AM 1.5 y utilizando las ecuaciones (3.35) y (3.44).

Para el caso del modelo con la unión CdS/PbS el valor máximo absoluto fue de $J_{SC}=31.12 \text{ mA/cm}^2$, $J_{SC}= 16.6 \text{ mA/cm}^2$ para el modelo CdS/CdTe y $J_{SC}=17.6 \text{ mA/cm}^2$ para el caso de CdS/CdSe. La similitud de J_{SC} entre los casos del CdTe y el CdSe es debido a la relación tan parecida que resultó de la EQI, la cual afecta directamente la corriente a causa de las pérdidas generadas al momento de la recolección de portadores de carga. Los valores de J_d fueron calculados utilizando la Ecuación (3.53). Una vez que se conocían los parámetros de J_{SC} y J_d se pudo obtener la curva característica J-V para cada Celda Solar.

4.3.2.- Curva Característica J-V, Densidad de Potencia y Factor de Llenado

De las Figuras 4.17 – 4.19 a) se puede observar las curvas características J-V para los 3 casos bajo estudio en esta tesis. Los valores fijados para el Voltaje de circuito abierto van desde 0 hasta 0.45 V con un tiempo de vida del electrón de $\tau_n = 10^{-9}$ segundos a una temperatura de $T=300 \text{ K}$. El Factor de Llenado es calculado por el SMM haciendo uso de la Ecuación (3.55). Dado que el Factor de Llenado puede ser definido como el área máxima de un rectángulo bajo la curva J-V, en las Figuras 4.17 – 4.19 a) existe una pequeña variación entre 0.77 y 0.78. Esto puede ser observado a mayor detalle en las Tablas 4.2 - 4.4. El Factor de Llenado puede ser incrementado dependiendo de la resistividad del material, al igual que se puede aumentar al extender el tiempo de vida de los portadores [36].

Por otra parte, las Figuras 4.16 – 4.18 b) muestran la máxima densidad de potencia de salida para cada celda solar en función del voltaje aplicado. El máximo valor obtenido se presenta cuando el grosor de la capa activa es de $d=2 \text{ }\mu\text{m}$ para todos los casos. Dichos valores son $P_m=0.010 \text{ W/cm}^2$ a 0.35 V para la unión CdS/PbS, $P_m=0.005 \text{ W/cm}^2$ a 0.37 V para el caso CdS/CdTe y $P_m=0.006 \text{ W/cm}^2$ a 0.38 V para CdS/CdSe. Finalmente la Eficiencia máxima de cada celda fue calculada utilizando el SMM.

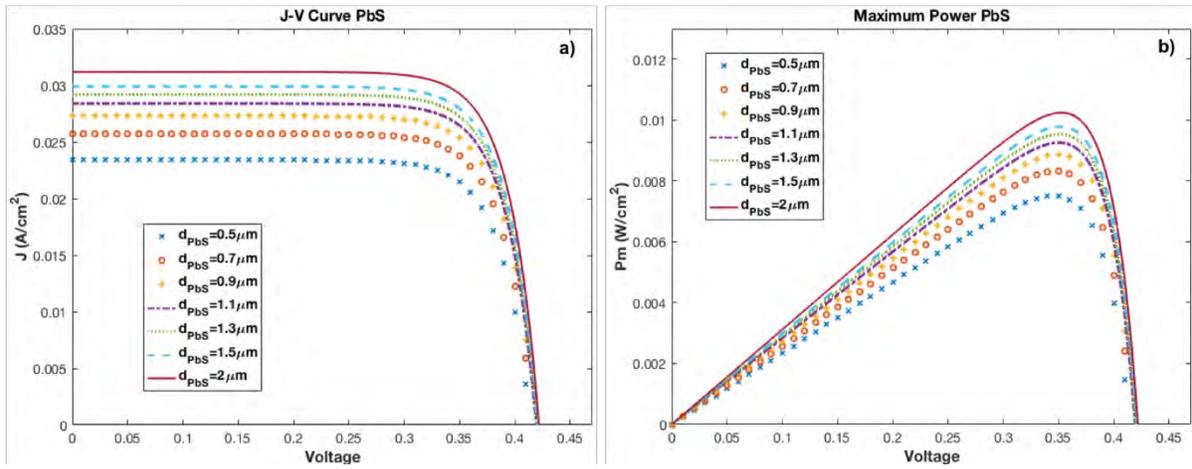


Figura 4. 17.- Curva J-V a) y máxima densidad de potencia de salida b) para la unión CdS/PbS, en función del Voltaje.

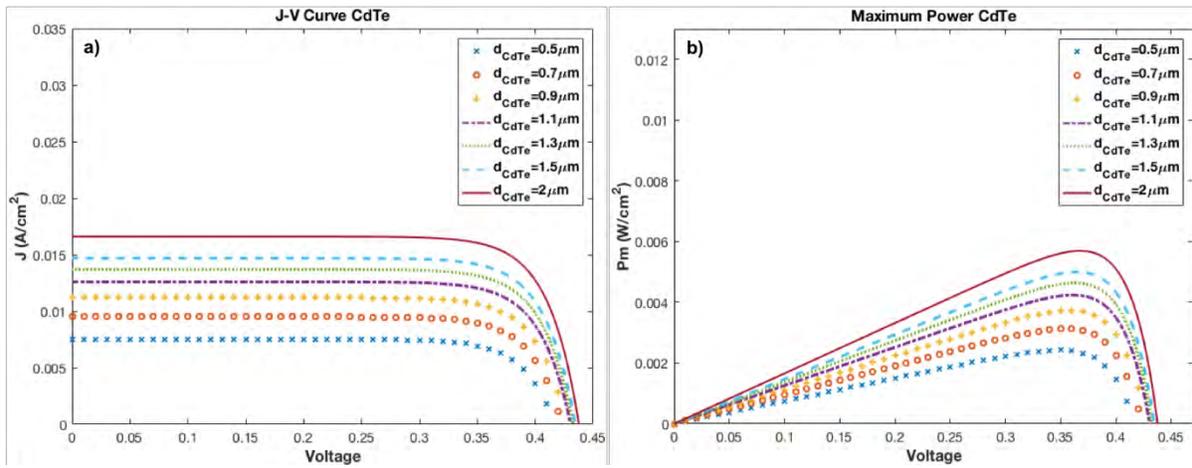


Figura 4. 18.- Curva J-V a) y máxima densidad de potencia de salida b) para la unión CdS/CdTe, en función del Voltaje.

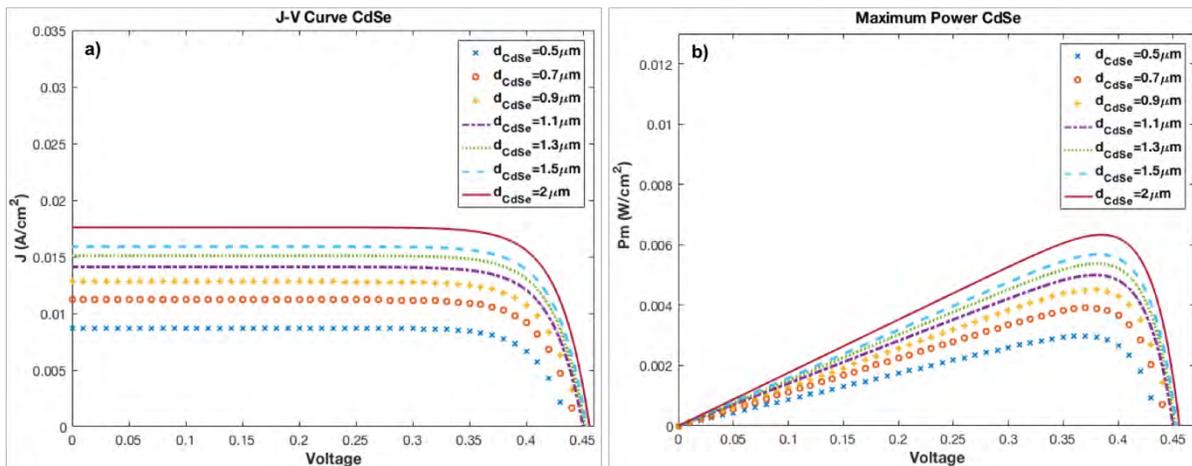


Figura 4. 19.- Curva J-V a) y máxima densidad de potencia de salida b) para la unión CdS/CdSe, en función del Voltaje.

4.3.3.- Eficiencia Máxima de las Celdas Solares CdS/PbS, CdS/CdTe y CdS/CdSe

Utilizando la Ecuación (3.57) las eficiencias mínimas obtenidas fueron 7.52, 2.43 y 2.98% para el PbS, CdTe y CdSe como capas activas respectivamente, con un grosor de $d=0.5 \mu\text{m}$.

Tabla 4.2.- Parámetros obtenidos por el SMM para la hetero-estructura con unión CdS/PbS

d (μm)	Jsc (A/cm^2)	Voc (V)	P (W/cm^2)	Vm (V)	Jm (A/cm^2)	FF	η (%)	Rch (Ω)
0.5	-0.0234	0.4143	0.00752	0.3458	0.02174	0.775	7.52	17.3
0.7	-0.0257	0.4167	0.008318	0.3484	0.02387	0.776	8.32	15.17
0.9	-0.0273	0.4183	0.008875	0.3501	0.02534	0.777	8.88	14
1.1	-0.0284	0.4193	0.00926	0.3501	0.02644	0.777	9.26	13
1.3	-0.0292	0.42	0.00954	0.3518	0.02711	0.777	9.54	12.66
1.5	-0.0299	0.4206	0.009786	0.3519	0.02780	0.778	9.79	12.47
2	-0.0312	0.4217	0.01024	0.3553	0.02882	0.778	10.24	12.21

Tabla 4.3.- Parámetros obtenidos por el SMM para la hetero-estructura con unión CdS/CdTe

d (μm)	Jsc (A/cm^2)	Voc (V)	P (W/cm^2)	Vm (V)	Jm (A/cm^2)	FF	η (%)	Rch (Ω)
0.5	-0.0075	0.4169	0.00243	0.3493	0.0070	0.777	2.43	50.21
0.7	-0.0095	0.4232	0.00313	0.3553	0.0088	0.778	3.13	40.33
0.9	-0.0112	0.4275	0.00373	0.3588	0.0104	0.779	3.73	34.51
1.1	-0.0126	0.4305	0.00420	0.3622	0.0116	0.774	4.20	31.24
1.3	-0.0137	0.4326	0.00463	0.3641	0.0127	0.781	4.63	28.63
1.5	-0.0147	0.4344	0.00500	0.3648	0.0137	0.783	5.00	26.62
2	-0.0166	0.4376	0.00569	0.3674	0.0155	0.783	5.69	23.72

Tabla 4.4.- Parámetros obtenidos por el SMM para la hetero-estructura con unión CdS/CdSe

d (μm)	Jsc (A/cm^2)	Voc (V)	P (W/cm^2)	Vm (V)	Jm (A/cm^2)	FF	η (%)	Rch (Ω)
0.5	-0.0087	0.4374	0.00298	0.3683	0.0081	0.783	2.98	45.52
0.7	-0.0112	0.4439	0.00391	0.3744	0.0104	0.786	3.91	35.85
0.9	-0.0128	0.4474	0.00451	0.3769	0.0120	0.787	4.51	31.50
1.1	-0.0141	0.4499	0.00500	0.3787	0.0132	0.788	5.00	28.68
1.3	-0.0151	0.4517	0.00538	0.3813	0.0141	0.788	5.38	27.02
1.5	-0.0159	0.4530	0.00568	0.3821	0.0149	0.788	5.68	25.70
2	-0.0176	0.4556	0.00633	0.3848	0.0165	0.789	6.33	23.39

Por otra parte, las eficiencias máximas obtenidas fueron 10.24, 5.69 y 6.33% en el mismo orden con $d=2 \mu\text{m}$.

Las Tablas 4.2 - 4.4 resumen los valores calculados por SMM. En ellas se muestran la densidad de corriente en corto circuito J_{sc} , voltaje de circuito abierto, máxima densidad de potencia de salida P_m , voltaje máximo V_m , máxima densidad de corriente J_m , factor de llenado FF, y la resistencia característica R_{ch} para cada hetero-estructura. El máximo valor obtenido entre los 3 modelos corresponde a la unión CdS/PbS, obteniendo un valor de 10.24% con un grosor de $d=2 \mu\text{m}$. Por otra lado, el valor mínimo encontrado para η corresponde a la combinación con CdTe, resultando 2.43% para un grosor de $d=0.5 \mu\text{m}$.

CAPÍTULO 5.- EFECTOS EN LA DISTRIBUCIÓN DEL CAMPO ELÉCTRICO DEBIDO A LA VARIACIÓN DE GEOMETRÍAS EN CELDAS CON NANO-HUECOS

Este capítulo se basa en el estudio e interpretación de las consecuencias de variar las propiedades de los huecos, tales como altura, diámetro y material de una celda unitaria solar. Se reportan los resultados de dos principales casos: el primero se basa en la variación del tamaño de la celda unitaria, con ausencia de nano partículas de oro (Au). El segundo caso representa las investigaciones realizadas al variar los tamaños de las nano partículas de oro, así como la geometría del nano hueco.

Después, se cubrirá el proceso de sustituir la estructura de la celda unitaria por CdSe, variando el material de las nano partículas por 3 metales a la vez: Platino, Mercurio, Titanio y Paladio. En estos estudios se analiza el efecto de plasmón de las nano partículas de metal con el fin de estudiar el comportamiento de la dispersión de la luz incidente (campo eléctrico) dentro de los nano huecos.

Los estudios se llevan a cabo utilizando el software COMSOL en un análisis bidimensional.

5.1- Diseño del Modelo de Simulación

El modelo del arreglo de Nano Huecos de Silicio, SiNH por sus siglas en inglés, se diseña a base de celdas unitarias, la cual es mostrada en la Figura 5.1, y consta de una estructura de material semiconductor con un nano hueco. Esta celda unitaria tiene una profundidad H , un diámetro D , una periodicidad P y una fracción de llenado (Filling Fraction, FFr).

El FFr se define como la relación entre el área ocupada por el Silicio y el área ocupada por el aire. La Figura 5.1 a) muestra el diseño de la celda unitaria dibujada en COMSOL, mientras que la Figura 5.1 b) ilustra una matriz de 5x5 celdas unitarias.

Las pruebas que se le realizan al modelo son primeramente el análisis de la variación del campo eléctrico a través del hueco, cuando la celda unitaria no contiene ningún tipo de nano partículas. Después se hace el mismo procedimiento para analizar la estructura con la adición de tres nano partículas de oro; las partículas se depositan de la siguiente manera: dos

en la parte superior del nano hueco mientras que la tercera se deposita en el fondo del hueco, esto simulando que las nano partículas son depositadas en la superficie de la estructura de la Figura 5.1 b). Lo anterior puede ser llevado a cabo en el ámbito experimental por medio de depósito térmico de capas delgadas de oro sobre la muestra de la celda como se menciona en [37]. Posteriormente el tamaño de las nano partículas se fija a un valor de 100 nm ya que a partir de esas dimensiones se reporta [1] que, para las nano partículas de oro, la dispersión domina la absorción parásita dentro de la misma partícula.

Como forma de excitación se define un puerto en el que incide una onda plana sobre la superficie de la celda. Para los primeros análisis se varió el ángulo de incidencia con una longitud de onda fija de 800 nm con el fin de observar el comportamiento general de la celda unitaria. Posteriormente el análisis se modificó de tal forma que la onda plana incida de manera normal a la celda unitaria (90°). El rango de análisis para la fuente normal incidente abarca entre los 374 THz hasta los 674 THz, que corresponde desde los 400 hasta los 800 nm. El hueco de la celda solar tiene una dimensión $H= 2000$ nm y un diámetro $D= 320$ nm, como se muestra en la Figura 5.1.

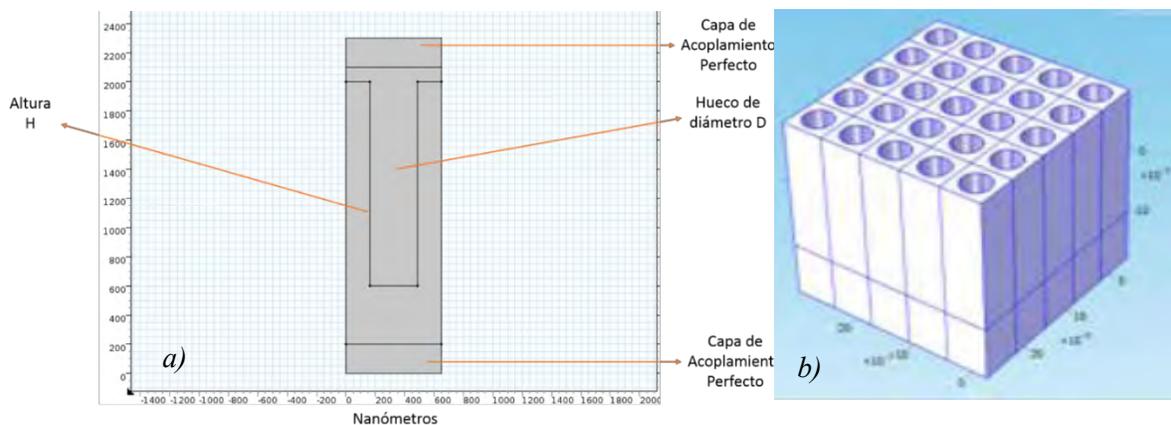


Figura 5. 1.- Modelado de la celda unitaria para la depósito de nano partículas a). La variación de materiales se hace tanto de la estructura base, como la de los metales utilizados como nano partículas. En b) se observa como la celda es formada por las celdas unitarias, en un arreglo 5x5.

5.2.- Simulación con Nano Partículas de Oro

Como se mencionó en la sección anterior, como fuente de excitación se utilizó una onda plana. Los primeros resultados obtenidos pertenecen al modelo de la celda unitaria con la ausencia de nano partículas de oro; el análisis se llevó a cabo con una frecuencia de onda

incidente fija, mientras que el ángulo de incidencia varía de 0 a 180°. En la Figura 5.2 se observan los casos en donde se presentó una variación más significativa del campo eléctrico dependiendo del ángulo de incidencia de la luz. En la Figura 5.2 a) se observa el campo eléctrico en la celda unitaria correspondiente a una excitación incidente a 90°, mientras que en la Figura 5.2 b) se observa una incidencia de 95°. De las Figuras 5.2 podemos notar como el modelo simula de manera adecuada la captura de energía dependiendo de la dirección en la cual la onda plana atraviesa la nano estructura.

El siguiente análisis efectuado fue el de la inserción de las nano partículas de oro. Para este análisis se hicieron algunos cambios en comparación a las primeras pruebas. Los cambios realizados constan de un ángulo de incidencia fija a 90°, y lo que se varía es la frecuencia de la señal incidente, o longitud de onda debido a la relación que existe entre estos dos parámetros de $f = c/\lambda$ donde c es la velocidad de la luz. Para este caso en particular, la frecuencia establecida va desde los 374 THz hasta los 674 THz. En las Figuras 5.2 se puede observar que efectivamente la radiación incidente está siendo dispersada por la presencia de nano huecos y que esta dispersión también depende del ángulo de incidencia, mostrando mayor intensidad del campo eléctrico de 1.83×10^5 V/m (0.000183 V/nm) a una longitud de onda de 800 nm y cuando dicha incidencia es con dirección normal (90°).

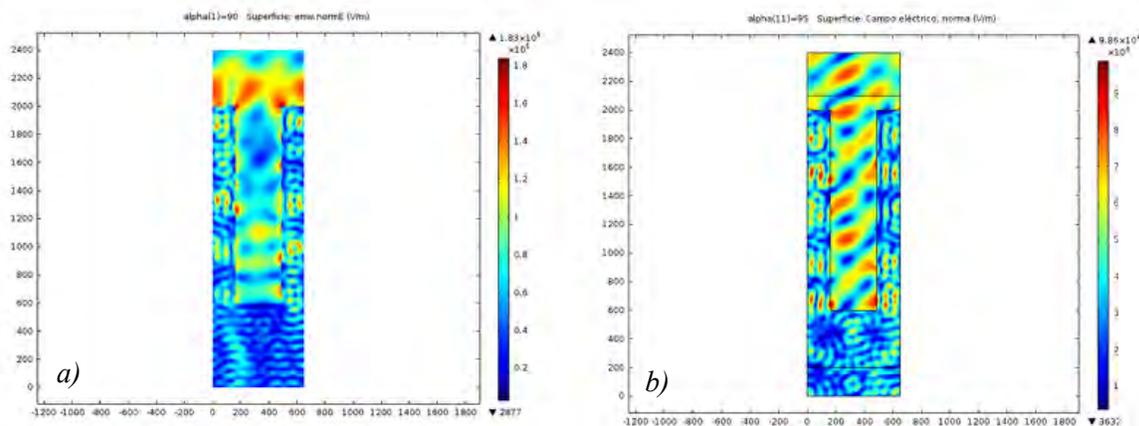


Figura 5. 2.- Variación del campo eléctrico para la celda unitaria con un ángulo de incidencia de 90° a); variación del campo eléctrico con un ángulo incidente de 95° b). Ambos casos con una longitud de onda de 800 nm.

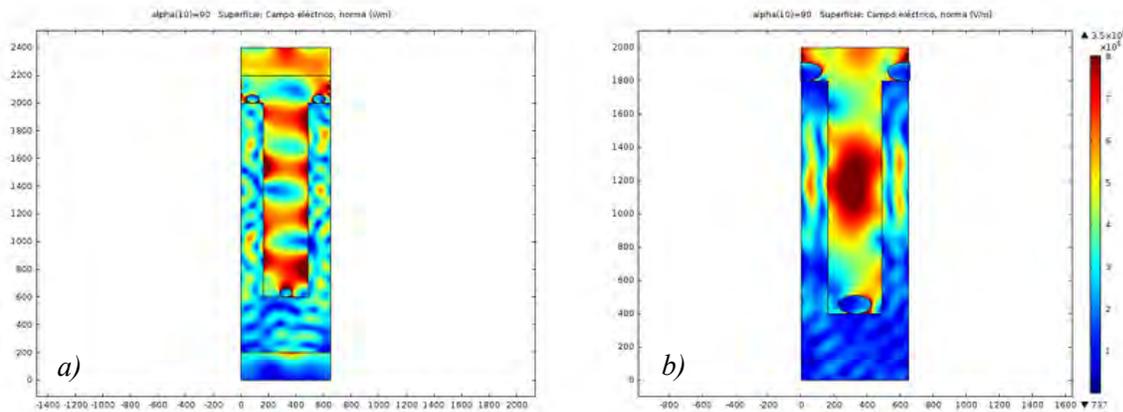


Figura 5. 3.- Se observa la adición de nano partículas de oro al diseño original con variación de tamaños: 55x35 nm en a); de igual manera se aprecia el campo eléctrico para una celda unitaria con nano partículas uniformes con dimensión 100x55 nm en b). Ambos casos son simulados con una frecuencia de 574 THz en donde se mostró una mayor intensidad.

Por otra parte, la Figura 5.3 a) muestra el caso en donde nano partículas (NP) de oro son incorporadas al modelo de la celda unitaria, teniendo 2 en la superficie y una en el fondo del pozo. Los resultados indican que la adición de nano partículas aumenta la energía dispersada en los nano huecos y en la superficie de la celda unitaria. Lo anterior debido a que se produce un acoplamiento entre las frecuencias de onda incidente y la frecuencia de oscilación de plasmón de las NPs de oro, provocando el efecto de plasmón de superficie [38]. En la Figura 5.3 b) se puede apreciar que se presenta un efecto de plasmones en el interior del hueco al igual que en el caso a).

Así mismo se puede observar como la dispersión de la energía se ve afectada por las nano partículas dentro de la estructura. Igualmente, en la Figura 5.3 b) se observa que, al aumentar el tamaño de las nano partículas (en comparación al caso a)), a una dimensión de 100x55 nm para las tres, la intensidad del campo eléctrico aumentó hasta el valor máximo de 3.5×10^6 V/m (0.0035 V/nm), concentrándose principalmente en el centro del nano hueco. También podemos decir a partir de este segundo análisis en donde se añaden las nano partículas, la frecuencia que mostró una mejor respuesta de dispersión fue de 574 THz.

Una vez obtenidos los resultados esperados tras añadir nano partículas a la celda unitaria, se estudian los comportamientos del campo eléctrico y su dispersión con respecto a las variaciones de geometría de dicha celda unitaria.

Para este caso, se procedió a mantener de manera fija el tamaño de las nano partículas de oro a $100 \times 55 \text{ nm}$, y a una periodicidad P de 650 nm . La variación a la estructura que se llevó a cabo fue suavizar los bordes tanto por encima como por el fondo del hueco presente en la celda unitaria, con el fin de estudiar como interviene la geometría directamente en el comportamiento de dicha celda. Las nano partículas se mantuvieron en la misma posición que el modelo original.

La Figura 5.4 muestra el resultado y el modelado de dicha modificación. En la parte a) de la Figura 5.4 se puede apreciar el campo eléctrico para los 574 THz , frecuencia con la cual se obtuvo una mejor respuesta en el resultado de la Figura 5.3. En la parte b) se observa la intensidad del campo eléctrico para la frecuencia máxima analizada de 674 THz . Los resultados nos indican que a 574 THz se sigue obteniendo la mayor magnitud del campo eléctrico en el hueco, llegando este hasta los $1.26 \times 10^7 \text{ V/m}$ (0.0126 V/nm). A la frecuencia máxima el valor más alto alcanzado es de $1.28 \times 10^6 \text{ V/m}$ (0.00128 V/nm). Es importante recordar que el modelo presentado está en la magnitud de nanómetros.

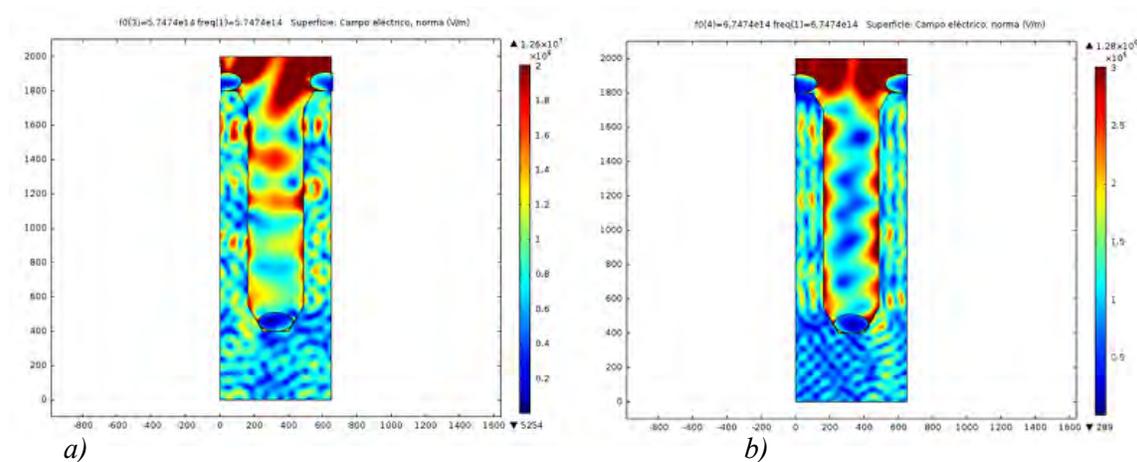


Figura 5. 4.- Se muestran los resultados en a) del campo eléctrico para la estructura modificada con bordes más suaves y con nano partículas de oro de $100 \times 55 \text{ nm}$. La estructura mostrada corresponde a un ángulo de incidencia de 90° con una frecuencia de 574 thz . La parte b) de la figura muestra el campo eléctrico para una longitud de onda de 444 nm .

5.3.- Simulación de Celda Unitaria de CdSe con Variación de Nano Partículas Metálicas Nobles: Platino Pt, Mercurio Hg, Titanio Ti y Paladio Pl.

La misma celda descrita en la sección 5.1 fue utilizada para la simulación de la celda compuesta por CdSe y metales nobles. Igual que en caso anterior, el pozo de la celda está compuesta por aire.

La investigación desarrollada durante este proceso consiste en el análisis del comportamiento de las celdas unitarias con la adición de nano partículas de metales nobles con un diámetro de 100 nm para ser comparadas con el comportamiento de las nano partículas de oro. El fin es encontrar una correlación entre diferentes metales nobles y la estructura formada por Seleniuro de Cadmio que aumenten la dispersión y la intensidad del campo eléctrico al generar fuerte acoplamiento de los electrones libres con el haz de luz incidente como consecuencia de los fotones absorbidos. De esta manera se buscan opciones que puedan reemplazar las ya estudiadas estructuras de Silicio con nano partículas de oro, en las cuales ya se han reportado excelentes resultados [1].

Cuando se utilizan nano partículas de metales nobles, para ciertos casos como el oro y la plata, la resonancia es máxima y su frecuencia se produce en el campo visible del espectro electromagnético [39]. Esta resonancia se forma cuando el tamaño de las nano partículas es menor que la longitud de onda de la radiación incidente (luz solar). Para este estudio el tamaño de las nano partículas cumple con dichos requisitos. Los metales nobles utilizados en esta simulación son: titanio, paladio, platino y mercurio.

Al igual que en el estudio presentado en la sección anterior, las nano partículas de los diferentes metales nobles fueron depositados de la siguiente manera: dos en la parte superior de la celda unitaria (costados) y una en el fondo de la celda (las 3 partículas del mismo metal para cada análisis). Para todos los casos se consideró que el material que compone la celda unitaria es Seleniuro de Cadmio.

Como fuente de excitación se utilizó una onda electromagnética con una potencia de 900 W/m^2 (AM 1.5 Direct), la cual simula la luz solar. La configuración de la fuente de excitación se tomó que tuviera una longitud de onda desde los 444 hasta los 800 nm, lo cual abarca parte del rango de la luz radiada por el sol. Diferentes configuraciones con respecto al ángulo de incidencia de la onda fueron analizadas.

Los ángulos de incidencia estudiados van desde los 0 hasta los 120 grados. Se llegó a notar que los resultados alcanzaban sus máximos valores a diferentes ángulos de incidencia, dependiendo del material del cual estaba compuesta la celda unitaria. Para el caso del Seleniuro de Cadmio el máximo resultado obtenido se encontró a una incidencia de 60 grados.

La misma configuración de análisis se llevó a cabo para los metales nobles empleados; titanio, paladio platino y mercurio. Como primer paso, lo que se buscaba era encontrar un nivel comparable de dispersión del campo eléctrico para estas diferentes configuraciones de CdSe y los metales nobles con respecto a las ya reportadas para la combinación de Silicio y Oro. Se ha reportado que entre mayor sea la dispersión del campo eléctrico en los confinamientos de la celda, ésta logrará una mayor absorción de la luz incidente y así aumentará la eficiencia de la celda. De igual manera, se ha reportado que la adición de las nano partículas de metales nobles son las que logran esta deseada dispersión en el campo eléctrico [40, 41, 42].

Para el primer caso, se investigó la dispersión para la celda de CdSe con las tres nano partículas de platino. El resultado mostrado en la Figura 5.5 pertenece a una configuración de un ángulo de incidencia de 60° a una frecuencia de 474 THz. La imagen muestra la dispersión en forma de gráfica de arcoíris, donde el color rojo simula el mayor valor. Como se puede observar dicha Figura, con la combinación de CdSe y platino se logra cierta dispersión del campo eléctrico en el confinamiento de la celda, o también llamado pozo. El valor máximo obtenido para esta configuración es de 2×10^5 V/m (0.0002 V/nm).

El segundo análisis corresponde a la misma configuración que la del caso anterior, solo que esta vez las nano partículas de platino fueron remplazadas por mercurio. Los resultados pueden ser observados en la Figura 5.6. En dicha Figura se puede observar que al igual que en el caso donde se depositan nano partículas de oro y platino existe una dispersión en el campo eléctrico. También, es posible observar que dicha dispersión se encuentra en una mayor magnitud que en el caso del platino. El máximo valor alcanzado para esta combinación es de 3.5×10^5 V/m (0.00035 V/nm).

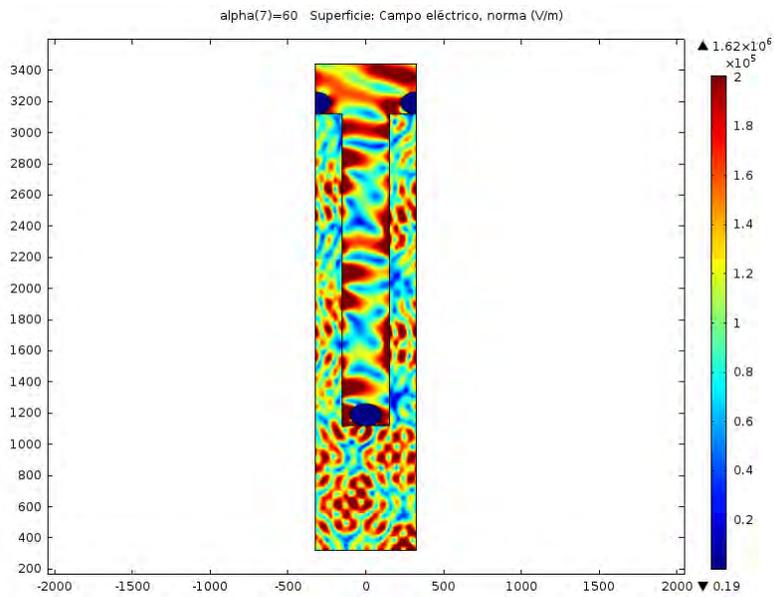


Figura 5. 5.- *Dispersión del campo eléctrico de la celda unitaria de seleniuro de cadmio con nano partículas de platino. La configuración corresponde a un ángulo de incidencia de 60° a una frecuencia de 474 THz.*

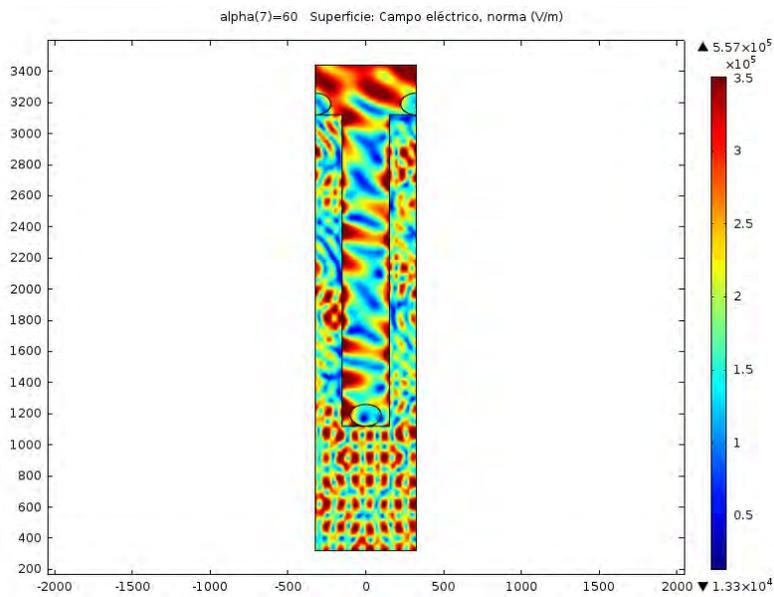


Figura 5. 6.- *Dispersión del campo eléctrico de la celda unitaria de seleniuro de cadmio con nano partículas de mercurio. La configuración corresponde a un ángulo de incidencia de 60° grados a una frecuencia de 474 THz.*

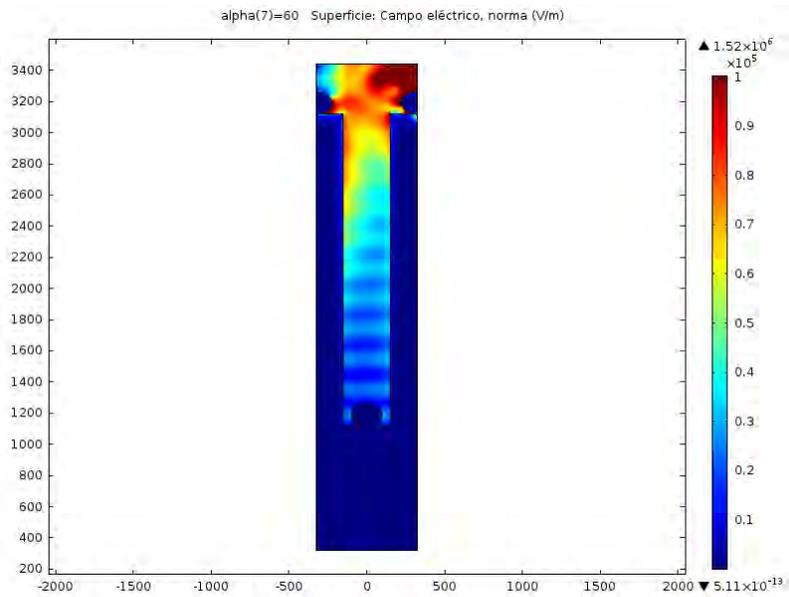


Figura 5. 7.- *Dispersión del campo eléctrico de la celda unitaria de seleniuro de cadmio con nano partículas de titanio. La configuración corresponde a un ángulo de incidencia de 60 grados a una frecuencia de 474 THz.*

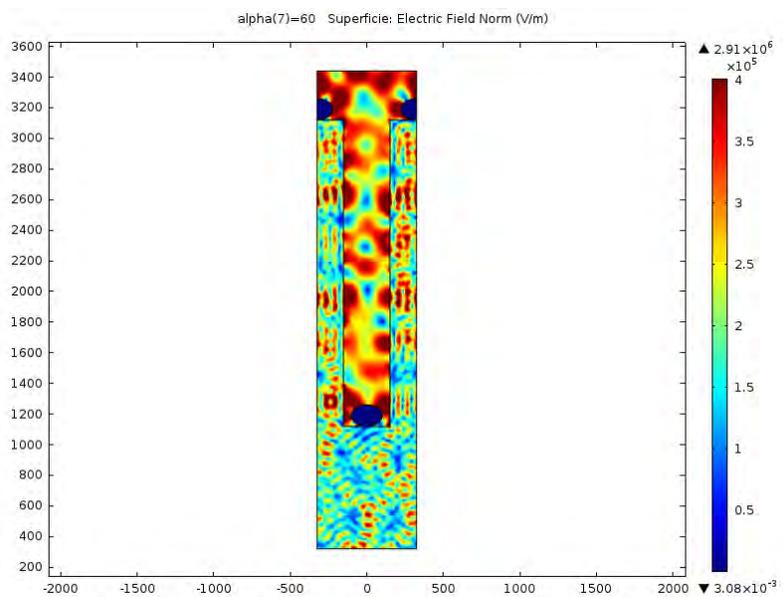


Figura 5. 8.- *Dispersión del campo eléctrico de la celda unitaria de seleniuro de cadmio con nano partículas de paladio. La configuración corresponde a un ángulo de incidencia de 60° a una frecuencia de 474 THz.*

El tercer caso, corresponde a la combinación de seleniuro de Cadmio y Titanio. Los resultados pueden ser observados en la Figura 5.7. De los resultados investigados, esta combinación fue la que arrojó una correlación de menor calidad, logrando como valor máximo solo 1×10^5 V/m (0.0001 V/nm), debido a que el acoplamiento entre la frecuencia de oscilación del material y la luz incidente no ha sido tan favorable. En la Figura 5.7 se puede observar como el pozo de la nano estructura cuenta casi en su totalidad con la ausencia de la reflexión que se busca como objetivo en esta investigación. La configuración de la celda unitaria y la incidencia de luz para esta combinación fue una vez más la misma que en los casos anteriores. También en la Figura 5.7 se puede observar cómo se presenta solo cierta dispersión de mayor magnitud en la parte superior del pozo.

El último caso corresponde a la combinación añadiendo nano partículas de Paladio. La Figura 5.8 muestra la dispersión del campo eléctrico dentro del pozo cuando la luz incide en la estructura de la celda unitaria e interactúa con las nano partículas de Paladio. La Figura 5.8 indica que para este caso también existe la dispersión que se busca a lo largo de este trabajo. El valor máximo obtenido para esta correlación es 4×10^5 V/m (0.0004 V/nm), lo cual nos indica que es el valor máximo entre las combinaciones analizadas, teniendo entre los casos estudiados el mejor acoplamiento entre la frecuencia de resonancia de plasmón de la nano partícula y la resonancia de la luz incidente simulando la energía solar.

Se busca en un futuro determinar las eficiencias de las celdas solares analizadas en esta tesis, estudiando cómo los plasmones de superficies localizadas intervienen en la absorción de la energía solar y cómo afecta el desempeño de las celdas solares.

CAPÍTULO 6.- CONCLUSIONES Y TRABAJO A FUTURO

Un modelo matemático por medio de simulación fue implementado para estudiar y comparar los parámetros que más afectan la eficiencia máxima η en celdas solares.

Tres celdas solares en configuración de hetero-estructura han sido modeladas basadas en n-CdS como capa de ventana y para cada caso se ha sustituido la capa activa por PbS, CdTe y CdSe.

El estudio fue basado en los cálculos para el ancho de la región espacial, espectro de transmisión, absorción, eficiencia cuántica interna, densidad de corriente de corto circuito, densidad de corriente en oscuridad, factor de llenado, densidad de potencia máxima de salida y la eficiencia máxima para las 3 hetero-estructuras simuladas. Las simulaciones y análisis fueron hechas tomando en consideración las pérdidas generadas por la reflexión y absorción de la luz a través de todas las capas.

Los resultados indican que uno de los parámetros que más se relaciona directamente con la eficiencia máxima η es la concentración de la diferencia de donadores y aceptores, dado que este valor está ligado de manera estrecha con el ancho de la región de carga espacial, el cual es un parámetro crítico para determinar la eficiencia cuántica interna. Los resultados también muestran que el grosor de la capa activa juega un papel importante al momento de determinar la eficiencia máxima.

Con respecto a la eficiencia máxima obtenida por el SMM, considerando los casos bajo las mismas condiciones, se puede decir que la celda solar compuesta por la unión CdS/PbS es la que obtiene una mayor eficiencia, con un total de $\eta=10.24\%$ en comparación al $\eta=5.69\%$ del CdTe y al $\eta=6.33\%$ para CdSe.

Los valores obtenidos son similares a valores reportados en la literatura con anterioridad. La mejora del Factor de Llenado puede modificar de manera directa la eficiencia de la celda solar. Este valor es afectado por la corriente de recombinación en la región de carga espacial de la unión pn . A baja corriente de recombinación se genera una mayor cuadratura en el Factor de Llenado.

Los máximos valores obtenidos fueron logrados bajo las mismas circunstancias: Grosor de la capa del contacto frontal ITO de 150 nm; grosor de la capa ventana CdS= 150nm; grosor de la capa activa (CdS, CdTe, CdSe) = 2 μm , $\tau=10$ nS, $W_{\text{PbS}}= 0.28$ μm , $W_{\text{CdTe}}= 0.26$ μm , $W_{\text{CdSe}}= 0.56$ μm y velocidad de recombinación de $S=10^7$ cm/s.

Con respecto a la segunda parte principal de esta tesis, se estudió el efecto de la dispersión de campos electromagnéticos dentro de una celda solar por medio de la inserción de nano partículas de metales nobles en pozos cuánticos, retardando así el efecto de recombinación entre los huecos y los electrones.

Variaciones a los elementos que componen la celda unitaria de una celda solar con nano huecos fueron aplicadas con el fin de observar la alteración del campo eléctrico presentado en la estructura con diferentes metales nobles en celdas de CdSe. Los resultados iniciales muestran que la mayor intensidad de voltaje para cada caso, al igual que la energía de dispersión se presentan cuando la onda plana tiene un ángulo de incidencia de 60 (grados) a una frecuencia de 744 THz.

De igual manera, los resultados denotan que se produce un mayor nivel de dispersión cuando las nano partículas de metal son depositadas en estructuras basadas en CdSe comparado con estructuras de Silicio.

El agregar nano partículas a la estructura mejora el efecto de dispersión. La energía del plasmón de una nano partícula de metal noble depende de parámetros como el tamaño, forma y de la relación de aspecto. Los resultados también demostraron que la resonancia del plasmón de superficie depende de la distribución espacial y de las propiedades [38] de la estructura que rodea las nano partículas. El análisis mostró que el Paladio fue el metal que mostró mejor correlación con la estructura de CdSe 4×10^5 V/m (0.0004 V/nm). A futuro se busca llevar a cabo las investigaciones de celdas con modelado de hetero-estructura basadas en CdS a nivel práctico.

Así mismo, se buscará hacer comparaciones del SMM con softwares ya publicados como AMPS 1D y crear una interfaz más amigable para el usuario, que haga el SMM una herramienta práctica y sencilla de utilizarse al momento de analizar diferentes materiales dentro de una celda solar tipo tandem (hetero-estructura)

Por parte de la investigación de nano partículas, se continuará con la investigación con el fin de poder definir las eficiencias generadas por los materiales analizados y fusionar ambos modelos, añadiendo NPs a la unión de celdas de heteroestructuras para así retardar la recombinación de electrones – huecos por medio de la dispersión del campo eléctrico.

REFERENCIAS

1. Pudasaini, P.R.; Ayon, A.A, Plasmon enhanced light trapping for thin film silicon solar cells application. Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 38th IEEE, 2012.
2. Pudasaini, P.R.; Ayon, A.A, Plasmon enhanced optical absorption in silicon nanohole arrays for thin film solar cells applications. Design, Test, Integration and Packaging of MEMS/MOEMS (DTIP), Symposium on, 2012.
3. M. A. Green, K. Emery, Y. Hisikawa, W. Warta, and E. D. Dunlop, "Solar cell efficiency tables (Version 45)," Prog. Photovoltaics, vol. 23, pp. 1–9, 2015.
4. Russell M. Geisthardt, Marko Topic, Senior Member, IEEE, and James R. Sites, Status and Potential of CdTe Solar-Cell Efficiency, IEEE JOURNAL OF PHOTOVOLTAICS, VOL. 5, NO. 4, JULY 2015, 1217-21
5. Standard Tables for Reference Solar Spectral Irradiances: Direct Normal and Hemispherical on 37° Tilted Surface, ATSM G173-03, 2012.
6. T.A. Gessert n, S.-H. Wei, J. Ma, D.S. Albin, R.G. Dhere, J.N. Duenow, D. Kuciauskas,A. Kanevce, T.M. Barnes, J.M. Burst, W.L. Rance, M.O. Reese, H.R. Moutinho, Research strategies toward improving thin-film CdTe photovoltaic devices beyond 20% conversion efficiency, Solar Energy Materials & Solar Cells 119 (2013) 149–155
7. Martin A. Green, Keith Emery, Yoshihiro Hishikawa, Wilhelm Warta, Ewan D. Dunlop, Solar cell efficiency tables (version 41) Progress in Photovoltaic Volume21, Issue1, January 2013, Pages 1-11, <https://doi.org/10.1002/pip.2352>
8. Emmanuel Saucedo-Flores "Modelado del confinamiento y la luminiscencia en nanopartículas de seleniuro" Revista Iberoamericana de Ciencias, ISSN 2334-250
9. Wikimedia Foundation (2012). Maxwell's Equations. eM Publications.
10. Carlos Alberto Vila Burguete, Simulación de Zonas de Fresnel para Enlaces de Microondas Terrestres. 2005. Colección de tesis digitales. Universidad de las Américas Puebla, México.
11. David M. Pozar, Microwave Engineering, (2005). Third edition. Wiley.

12. Wang Li-Li; "The improvement of luneburg lens antenna's analysis method," *Antennas Propagation and EM Theory (ISAPE)*, 2010 9th International Symposium on, vol., no., pp.30-32, Nov. 29 2010-Dec. 2 2010
13. Murray, W. and Barnes, W. (2007), *Plasmonic Materials*. *Adv. Mater.*, 19: 3771-3782.
14. Richard J. D. Tilley, *Colour and the Optical Properties of Materials: An Exploration of the Relationship Between Light, the Optical Properties of Materials and Colour*, (2011). John Wiley & sons. 2013.
15. Zhou, Gong-du, *Fundamentals of structural chemistry*, Singapore: World Scientific, 1993.
16. Li, Sheng S. *Semiconductor Physical Electronics*, 2nd edition (July 10, 2006). Springer;
17. Jia-Ming Liu, *Photonic devices*, (2005), Cambridge: Cambridge Univ. Press.
18. *Semiconductor Material and Device Characterization*. Dieter K. Schroder. 3rd Edition. Jun 2015, Wiley-IEEE Press.
19. Peter Hawkes, *Advances in Electronics and Electron Physics*, 1st Edition, 1991. Academic Press.
20. Jacques I. Pankove, *Optical Processes in Semiconductors*, Dover Publications; 2nd Revised ed. edition (November 18, 2010).
21. Atef, Mohamed, Zimmermann, Horst. *Optoelectronic Circuits in Nanometer CMOS Technology*. (2016). Springer International Publishing.
22. George Frederick Burkhard. *Exciton Recombination in the Fullerene Phase of Bulk Heterojunction Organic Solar Cells*. (2011). Dissertation for Ph.D. Degree, Stanford University.
23. *Analysis of Current-Voltage Characteristics of Illuminated Cadmium Selenide-Polysulfide Junctions* JOSEPH REICHMAN and MICHAEL A. RUSSAK *Photoeffects at Semiconductor-Electrolyte Interfaces*. March 2, 1981, 359-368
24. Sze, S. M. *Physics of semiconductor devices*. Wiley-Interscience Publication, New York: Wiley, 1981, 2nd ed.
25. F. A. Lindholm, J. G. Fossum and E. L. Burgess, "Application of the superposition principle to solar-cell analysis," in *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 26, no. 3, pp. 165-171, March 1979. doi: 10.1109/T-ED.1979.19400

26. C. Sah, R. N. Noyce and W. Shockley, "Carrier Generation and Recombination in P-N Junctions and P-N Junction Characteristics," in Proceedings of the IRE, vol. 45, no. 9, pp. 1228-1243, Sept. 1957.
27. P. Baruch, De Vos, A., Landsberg, P. T., and Parrott, J. E., "On some thermodynamic aspects of photovoltaic solar energy conversion", Solar Energy Materials and Solar Cells, vol. 36, pp. 201-222, 1995.
28. Signal Processing for Solar Array Monitoring, Fault Detection, and Optimization. Mahesh Banavar, Henry Braun, et.al. Synthesis Lectures on Power Electronics. September 2012. Arizona State University.
29. E.F Schubert, 2004. <https://www.ecse.rpi.edu/~schubert/Educational-resources/Materials-Refractive-index-and-extinction-coefficient.pdf>
30. T. M. Bieniewski and S. J. Czyzak. Refractive indexes of single hexagonal ZnS and CdS crystals, J. Opt. Soc. Am. 53, 496-497 (1963)
31. Mohamed, Hussein. (2013). Dependence of efficiency of thin-film CdS/CdTe solar cell on optical and recombination losses. Journal of Applied Physics. 113. 10.1063/1.4794201
32. L. Ward, in Handbook of Optical Constants of Solids II, edited by E. D. Palik (Academic, Boston, 1991), p. 579.
33. Optical Constants of Crystalline and Amorphous Semiconductors pp 497-509.
34. <https://www.nrel.gov/pv/cadmium-telluride-solar-cells.html>
35. L. A. Kosyachenko, E. V. Grushko, O. L. Maslyanchuk and X. Mathew, "Effect of absorber layer parameters on charge collection in thin-film CdS/CdTe solar cells," 2008 33rd IEEE Photovoltaic Specialists Conference, San Diego, CA, USA, 2008, pp. 1-4.
36. Kosyachenko, Leonid & V. Grushko, E. (2010). Open-Circuit Voltage, Fill Factor, and Efficiency of a CdS/CdTe Solar Cell. Semiconductors. 44. 1375-1382.
37. D. Wang, et al., Formation of precise 2D Au particle arrays via thermally induced dewetting on pre-patterned substrates. Beilstein Journal of Nanotechnology, 2011.
38. Plasmons in metal nanostructures. Carsten Sonnichsen. Dissertation der Fakultät für Physik der Ludwig-Maximilians-Universität München, vorgelegt von Carsten Sonnichsen aus Hamburg. München. 2001.

39. Resonancia del Plasmón de la superficie (RPS); propiedades optoelectrónicas. Laureano Cornejo. La revolución nanotecnológica. Nuevas Tecnologías y Materiales 2015.
40. D. Derkacs, S. H. Lim, P. Matheu, W. Mar, and E. T. Yu. Improved performance of amorphous silicon solar cells via scattering from surface plasmon polaritons in nearby metallic nanoparticles. *Applied Physics Letters* 2006 89:9.
41. Seok-Soon Kim, Seok-In Na, Jang Jo, Dong-Yu Kim, and Yoon-Chae Nah. Plasmon enhanced performance of organic solar cells using electrodeposited Ag nanoparticles. *Applied Physics Letters* 2008 93:7.
42. Wang, D. H., Kim, D. Y., Choi, K. W., Seo, J. H., Im, S. H., Park, J. H., Park, O. O. and Heeger, A. J. (2011), Enhancement of Donor–Acceptor Polymer Bulk Heterojunction Solar Cell Power Conversion Efficiencies by Addition of Au Nanoparticles. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 50: 5519-5523.
43. T. M. Bieniewski and S. J. Czyzak. Refractive indexes of single hexagonal ZnS and CdS crystals, *J. Opt. Soc. Am.* 53, 496-497 (1963)
44. The physical properties of glass. Dennis Glyn Holloway, Vol. 24 Wykeham science series, Wykeham Publications, 1973.
45. H.A. Mohamed, Theoretical study of the efficiency of CdS/PbS thin film solar cells, *Solar Energy* 108 (2014) 360–369
46. Elementary Processes in Organic Photovoltaics. Karl Leo. 2017. Springer International Publishing
47. Exciton Recombination in the Fullerene Phase of Bulk Heterojunction Organic Solar Cells. George Frederick Burkhard. April 2011. Stanford University
48. Wu, Kaifeng et al. “Ultrafast Exciton Quenching by Energy and Electron Transfer in Colloidal CdSe nanosheet–Pt Heterostructures †Electronic Supplementary Information (ESI) Available: Synthesis Details, Transient Absorption Set-Ups, NS and NS–Pt Spectra Fitting, Kinetics Fitting Model and Parameters, Details about the Exciton Diffusion Controlled Energy Transfer Model. *Chemical Science* 6.2 (2015): 1049–1054. PMC. Web. 17 Sept. 2018.
49. Christiana Honsberg, Stuart Bowden, PVCDROM. PVEducation.org, 2011.
50. E. D. Pallik, Handbooks of Optical Constants of Solids. Vol. 01, 1998.

51. E. Garnett and P. Yang, Light Trapping in Silicon Nanowire Solar Cells Nano Letters, vol. 10 2010.