

**UNIVERSIDAD DE SONORA**  
**DIVISIÓN DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES**  
**Departamento de Investigación En Física**

**ESTUDIO DE PROPIEDADES ELÉCTRICAS Y DISEÑO DE  
DISPOSITIVOS MEDIANTE SIMULACIONES NUMÉRICAS**



**Para obtener el grado académico de:  
MAESTRO EN CIENCIAS  
(FÍSICA)**

**Presenta:**

**ING. ENRIQUE TROYO VEGA**

# 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

## **AGRADECIMIENTOS**

A mis padres por todo lo que han hecho por mí, por haberme educado y por priorizar mis estudios y bienestar ante todo, y a mi hermana por el apoyo y comprensión.

A CONACYT por el apoyo económico y académico y al DIFUS por abrirme las puertas.

A mi director Dr. Dainet Berman Mendoza por su apoyo y disposición cuando lo necesité.

A mi co-director y amigo Dr. Luis Patricio Ramírez Rodríguez por la guía recibida en la realización del presente trabajo, y más aún por el apoyo y la orientación que siempre he recibido de su parte.

A mi director “informal” y amigo Dr. Temístocles Mendívil Reynoso por sus comentarios oportunos al contenido de esta tesis y por su disposición para transmitirme sus conocimientos.

A mis sinodales por revisar y evaluar el presente trabajo.

Al Dr. Santos Jesús Castillo por la enorme cantidad de conocimiento académico que me ha regalado y por acogerme en su equipo de trabajo desde el primer momento.

Dr. Mario Flores Acosta por motivarme e invitarme a realizar mis estudios en el DICTUS.

Al grupo de trabajo del laboratorio de semiconductores y a mis compañeros y amigos de cubículo: Mayra, Yoleivys, Carlos y Osnaider.

Al Dr. Kotaro Tagawa por recibirme en la Universidad de Tottori.

El presente trabajo es parte del proyecto PRODEP denominado “Nanopartículas y películas delgadas” cuyo responsable es Dr. Luis Patricio Ramírez Rodríguez

*A la memoria de mi abuelo, Gilberto Vega Sánchez.*

# ÍNDICE DE CONTENIDO

<b>INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>1</b>
<b>CAPÍTULO 1. ELEMENTOS DE LA FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO Y TEORÍA ELECTOMAGNÉTICA.....</b>	<b>5</b>
1.1. Clasificación Eléctrica de los Materiales.....	5
1.2. Materiales Cristalinos.....	9
1.3. Electrón en un Potencial Periódico.....	11
1.4. Teoría de Bandas.....	12
1.5. Teoría Electromagnética.....	18
<b>CAPITULO 2. FÍSICA DE SEMICONDUCTORES.....</b>	<b>29</b>
2.1. Densidad de Estados.....	29
2.2. Concentración de Portadores en Equilibrio.....	31
2.3. Concentración de Portadores Fuera de Equilibrio.....	37
2.4. Mecanismos de Transporte de Portadores.....	39
2.5. Fenómenos de Creación y Aniquilación de Carga.....	44
2.6. Modelo Deriva-Difusión.....	49
<b>CAPITULO 3. UNIÓN PN Y CELDA SOLAR.....</b>	<b>50</b>
3.1. Efecto Fotovoltaico.....	50
3.2. Unión PN.....	51
3.3. Unión MS.....	63
3.4. Celda Solar.....	63
<b>CAPITULO 4. RESULTADOS.....</b>	<b>77</b>
4.1. Transporte en un Semiconductor Tipo p.....	77
4.2. Propiedades Electromagnéticas y Ópticas de Perfil de Aire y Semiconductor Tipo N.....	81
4.3. Unión PN.....	85
4.4. Celda solar de Si Mono Cristalino.....	93
<b>CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS.....</b>	<b>105</b>
<b>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>108</b>

## INTRODUCCIÓN

En la naturaleza, una de las cantidades que se conserva en un proceso es la energía. En el entendimiento del ser humano, este concepto ha formado parte de las actividades diarias y después de un largo proceso iterativo y constante se ha establecido en la intuición humana. Así, la experiencia y la intuición advierten a las personas de la interacción fenómeno-energía: la recarga de combustible en un automóvil, la intensidad con la que brilla una bombilla o la velocidad que adquiere un objeto al caer son algunos ejemplos de cómo el concepto energía está presente en el entendimiento de las personas sin la necesidad de tener un fundamento teórico en Física [1].

Empero aunque el concepto físico de energía es adquirido a través de la experiencia, su definición formal resulta paradójicamente algo más complejo. Probablemente la definición más extendida de energía sea la de aquella propiedad de los cuerpos capaz de realizar trabajo, que a través del tiempo puede ser almacenada o transferida a otros objetos, pero jamás creada o destruida. Esta definición es técnicamente correcta, aunque, aún en nuestros días la interpretación física no es del todo clara. En este sentido el significado real de energía hoy en día sigue siendo un reto para físicos y filósofos, sin embargo por fortuna no se precisa un conocimiento fuera de lo establecido en física e ingeniería debido a la naturaleza descriptiva más no explicativa del presente trabajo. Entonces solamente cabría añadir lo discutido por Feynman acerca del mencionado concepto: no se sabe lo que es energía, solo sabemos que es un número que se conserva en la naturaleza a través del tiempo [1].

En la actualidad la economía depende fuertemente del desempeño de la industria energética. Prueba de ello es la relación que existe entre las crisis económicas de los últimos años y el aumento del precio del petróleo, así como el crecimiento económico que han experimentado países del medio oriente como consecuencia de explotación de hidrocarburos. La utilización de combustibles fósiles como principal fuente de energía ha impactado en las esferas del planeta y son varias las publicaciones que afirman que las emisiones de la quema de combustibles fósiles son la principal causa de la irrupción en el balance del efecto invernadero natural. Este punto representa la principal preocupación a nivel global en cuanto al ambiente se refiere, por ello que las naciones se unieron para diseñar políticas ambientales pertinentes a

la situación a finales de la década de los ochenta y para disminuir la emisión de gases de efecto invernadero (GEI) en la década de los noventa.

El problema de los combustibles fósiles no radica solamente en los impactos negativos hacia el ambiente, si no en que son finitos. Se estima que en el mundo, de las reservas de hidrocarburos: 1,000 billones de barriles han sido consumidos y 1,300 billones de barriles son reservas probadas, lo que representa una producción de sesenta años a la tasa actual de explotación [2]. Por tanto, la transición de energías de origen fósil a alternativas es inevitable debido a motivos económicos y de abastecimiento, y en menor medida ambientales. Las alternativas a las energías de origen fósil principalmente son las energías renovables, que se definen como aquellas energías que provienen de una fuente virtualmente inagotable. De las tecnologías en energías renovables la más promisoría a ser el sustituto de combustibles fósiles es la fotovoltaica constituyéndose esta una de las justificaciones principales del presente trabajo.

La energía solar que llega anualmente a la tierra es  $\approx 5.46 \times 10^{24} J$  y solamente el 0.01% de esta energía es necesaria para satisfacer las necesidades de consumo de los seres humanos [3], es por ello que desde la segunda mitad del siglo XX la investigación en celdas fotovoltaicas ha marcado la pauta en la innovación en energías renovables. La consecuencia de esto ha sido el aumento exponencial en los años más recientes del consumo de energía renovable en general [4].

El primer uso práctico de celdas solares fue en el área aeroespacial en los años cincuenta [5]. Luego, rápidamente el uso práctico de celdas solares se distribuyó en actividades económicas y domésticas. A la fecha, se reconocen tres generaciones de celdas: primera generación, corresponde a la tecnología del silicio y actualmente sigue siendo la más popular en el mercado; segunda generación, corresponde a la tecnología de películas delgadas, tecnología que promete disminuir significativamente los precios; tercera generación, corresponde a la tecnología de altas eficiencias, esta tecnología es de un costo económico mayor a la media.

El presente trabajo se enfoca en el estudio de una celda solar de primera generación, no obstante, la mayor parte de la física discutida en el marco teórico describe a las tres generaciones de celdas solares que funcionan bajo el efecto fotovoltaico, salvo algunas

excepciones en el que otros efectos diferentes al fotovoltaico (electroquímicos) producen corriente, como las celdas solares sensibilizadas por colorante.

En investigación e ingeniería, existe una necesidad de describir la realidad fehacientemente, con la finalidad de comprender la naturaleza. La simulación numérica es una alternativa computacional que replica la experiencia y arroja resultados que, en muchas ocasiones, no son evidentes.

Para simular, primero es necesario definir un modelo. Sobre esto, es imperativo aclarar que un modelo no es más que una representación simplificada de carácter cualitativo o cuantitativo de un sistema de la realidad, por tanto, desde un punto de vista matemático, no es posible obtener resultados idénticos a los que en la naturaleza suceden. Para ello, habría que recopilar todas las variables del universo que influyen en él, y evidentemente es una tarea imposible. Lo usual es tomar en cuenta solo las variables que representan una influencia verdaderamente importante.

Para el caso del presente trabajo se realizaron aproximaciones y suposiciones en la física con la finalidad de obtener una matemática más asequible. En los capítulos del trabajo se encontrara que las suposiciones que se hacen son: aproximación de Boltzmann, condición de baja inyección, regiones cuasi-neutrales infinitas, aproximación de deplexión, tasa de generación uniforme y principio de superposición de corrientes.

El objetivo del presente trabajo es la descripción de las propiedades ópticas y eléctricas de una heterounión así como la reproducción del efecto fotovoltaico de una celda solar de silicio. Los objetivos específicos son simular: zona de deplexión en celda solar (densidad de carga espacial), densidad de impurezas donadoras y aceptoras en la celda, campo eléctrico y vector de Poynting en el aire y dentro de la celda, perfil de generación de portadores (iluminación), potencial eléctrico en la celda (iluminación y no iluminación), campo eléctrico en la celda (iluminación y no iluminación), densidad de portadores de carga (iluminación y no iluminación), diagrama de bandas de energía (iluminación y no iluminación) y curva característica IV para diferentes configuraciones. Lo anterior se realizara utilizando el paquete comercial COMSOL.

Todas estas simulaciones representan lo sustantivo del trabajo, sin embargo son precedidas por simulaciones de decaimiento en el tiempo y la distancia de un semiconductor tipo p (sección 4.1) , de las propiedades electromagnéticas y ópticas de perfil de aire y semiconductor tipo n (sección 4.2) y de una unión PN (sección 4.3).

El método utilizado es el método de elemento finito (FEM por sus siglas en ingles). Es una técnica numérica que resuelve fenómenos físicos modelados por ecuaciones diferenciales parciales y un conjunto de condiciones de frontera. Este método surgió en la década de los 50's con un artículo relacionado con el cálculo de estructuras, el éxito del método llamó la atención de los matemáticos y en 1978 se publicó el método desde el punto de vista matemático [6]. Actualmente el FEM es muy utilizado por medio de paquetes computacionales en aplicaciones en física e ingeniería, debido a que permite hacer particiones sobre geometrías complicadas.

El estudio de dispositivos optoelectronicos por medio de simulaciones no es un asunto nuevo. Específicamente en celdas solares, el primer programa computacional que simulaba las propiedades físicas de una celda fue desarrollado por Mark S. Lundstrom a partir de su tesis de doctorado [7]. Luego, le siguieron simulaciones numéricas como las de De Moulin y Lundstrom y Gray [8] [9]. Más recientemente, para el presente trabajo se estudiaron los resultados de [10, 11, 12, 13] además de los resultados presentados por Samuele Lilliu en la COMSOL Conference 2013 en Bangalore, India y la bibliografía adjunta en COMSOL Multiphysics.

Para la simulación por medio de FEM se utilizó el paquete computacional COMSOL Multiphysics, software que permite la solución de problemas con distintas físicas, con acoplamiento o independencia de las variables a resolver. El software se divide en doce módulos de física: *AC/DC*, *Acoustics*, *Chemical Species Transport*, *Electrochemistry*, *Fluid Flow*, *Heat Transfer*, *Optics*, *Plasma*, *Radio Frequency*, *Structural Mechanics*, *Semiconductors* y *Mathematics*.

El presente trabajo se estructura en cuatro capítulos: el capítulo I expone la física básica para el estudio de celdas solares, donde el objetivo es introducir los conceptos básicos de teoría de bandas y teoría electromagnética; el capítulo II discute más a fondo la física de los materiales semiconductores, con herramientas importantes de mecánica cuántica, mecánica estadística y

fenómenos de transporte; el capítulo III versa sobre los tipos de uniones en dispositivos semiconductores, con una discusión centrada en la unión PN y las bases de celdas solares; el capítulo IV muestra los principales resultados de la simulación. El trabajo finaliza con las conclusiones de las simulaciones y las perspectivas a futuro.

# CAPÍTULO 1. ELEMENTOS DE LA FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO Y TEORÍA ELECTROMAGNÉTICA

El primer capítulo muestra la teoría básica para el estudio de semiconductores y celdas solares, bajo el enfoque de la teoría del estado sólido y teoría electromagnética. Los objetivos de la inclusión de estas teorías son el estudio de la teoría de bandas y el fundamento de la propagación de ondas electromagnéticas.

## 1.1 Clasificación Eléctrica de los Materiales

Los materiales se clasifican según la conveniencia del área de estudio y aplicaciones. La clasificación puede ser según sus propiedades mecánicas, químicas, de estructura o eléctricas, entre otras. En física del estado sólido la clasificación más utilizada es según las propiedades eléctricas: metal o conductor, semiconductor y aislante o no conductor.

Una de las propiedades eléctricas más utilizada es la conductividad  $\sigma$ , seguida de su inversa multiplicativa la resistividad  $\rho$ , ambas son propiedades intensivas de la materia porque su valor es independiente de la cantidad de sustancia. Otro parámetro que describe la capacidad de conducción es la densidad de portadores libres  $n$ , materiales con alta densidad de portadores libres son susceptibles a conducir carga en la presencia de fuerzas externas, por lo que existe una relación directa entre  $\sigma$  y  $n$ .

**Tabla 1.1.** Valores típicos de conductividad y densidad de portadores libres [14].

Tipo de sólido	Conductividad ( $\sigma$ )	Den. de Port. ( $n$ )	Ejemplo
Metal	$>10^4$	$>10^{17}$	Au, Cu, Pb, Ag
Semiconductor	$10^{-8} - 10^4$	$<10^{17}$	Si, Ge, GaAs, InSb
Aislante	$<10^{-8}$	$\ll 1$	SiO <sub>2</sub> , CaF <sub>2</sub>

De los tres grandes grupos, los metales son los materiales históricamente más utilizados [15]. Son elementos químicos con una alta densidad de portadores y por ende su conductividad es alta, además de ser capaces de donar; por otro lado los aislantes son materiales con una baja densidad de portadores (en ocasiones nula) por lo que su resistividad es alta. Generalmente no donan electrones porque su banda de valencia está casi llena; el grupo complementario es el de

los semiconductores. Un semiconductor es un material que presenta propiedades eléctricas intermedias entre metal y aislante. Los semiconductores poseen una cantidad moderada de portadores libres, y de aquí, su conductividad es moderada en referencia a metales y aislantes. La propiedad que ha hecho a los semiconductores sumamente populares es la posibilidad de la modificación de su conductividad al introducir impurezas al material (dopaje).

El principal uso de semiconductores se encuentra en dispositivos electrónicos. En celdas solares promueven la transformación de radiación solar en corriente eléctrica y es por ello que el presente trabajo está centrado en materiales semiconductores. No obstante, esta introducción del concepto semiconductor no es completamente precisa. En realidad lo que distingue a metales, semiconductores y aislantes es la dependencia de su conductividad con la temperatura [14]:

$$\sigma_m = \frac{\sigma_0}{1 + \alpha(T - T_0)} \quad (1.1)$$

$$\sigma_s = \sigma_0 e^{\frac{\alpha}{T}} \quad (1.2)$$

donde  $\sigma_m$  y  $\sigma_s$  son la conductividad de metal y semiconductor respectivamente,  $\sigma_0$  es la conductividad inicial,  $\alpha$  es el coeficiente de expansión,  $T$  es la temperatura y  $T_0$  es la temperatura inicial. Las ecuaciones (1.1) y (1.2) son de naturaleza empírica pero poseen garantía de fiabilidad después de años de investigación. En este sentido, semiconductores y aislantes pertenecen a un mismo grupo y metales a otro. La teoría moderna de la física del estado sólido explica el por qué la separación en dos grupos y ofrece un tratamiento para la obtención de las propiedades electrónicas de cristales.

### 1.1.1 Clasificación de Semiconductores

En semiconductores la clasificación más utilizada es según su nivel de dopaje, que los subdivide dos tipos: intrínsecos y extrínsecos. Los semiconductores intrínsecos son aquellos en estado puro y perfectamente cristalizados [16], no poseen ningún tipo de impureza y la concentración de portadores libres solo depende de la temperatura según (1.2). El número de electrones libres es igual al número de espacios electrónicos disponibles (huecos), que a su vez es igual a una concentración denominada intrínseca:

$$n_i(T) = n(T) = p(T) \quad (1.3)$$

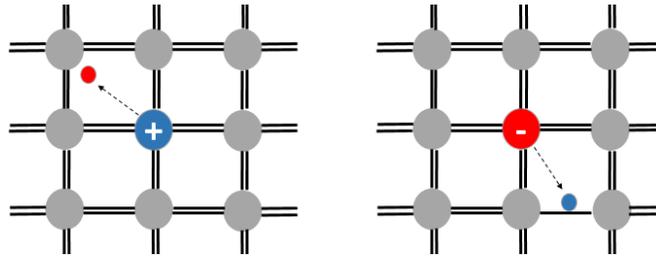
donde  $n_i$  es la concentración intrínseca,  $n$  es la densidad de electrones y  $p$  es la densidad de huecos. Esto significa que en semiconductores hay dos tipos de portadores libres: electrones y huecos. Los tres semiconductores intrínsecos más utilizados son silicio (Si), germanio (Ge) y arseniuro de galio (GaAs) [17]. Sobre los portadores libres es imperativo comentar lo siguiente: un hueco es un vacío en la órbita de valencia debido a la ausencia de un electrón, y por ende no es una partícula per-se. Sin embargo, la experiencia ha establecido que resulta conveniente tratar la ausencia de un electrón como partícula, con masa igual a la de los electrones y carga contraria a la de electrón [18].

Los semiconductores extrínsecos son aquellos que han pasado por un proceso de dopaje y en consecuencia poseen impurezas que incorporan portadores libres, aunque también existe dependencia de la temperatura en un porcentaje menor [17]. El dopaje puede ser por introducción de impurezas que aporten electrones o huecos, surgiendo de aquí dos tipos de semiconductores extrínsecos: tipo n y tipo p.

La figura 1.1-a muestra un semiconductor tipo n; se forma al incorporar un número determinado átomos que donan electrones libres denominados “impurezas donadoras”  $N_d$ . El cristal de Si posee un número de coordinación de cuatro, entonces las impurezas donadoras son átomos con valencia mayor a cuatro, aunque generalmente se utilizan elementos del grupo VA. Al completarse la regla del octeto con solo cuatro electrones del átomo donador, el electrón no enlazado queda libre para conducir. Los portadores mayoritarios en un semiconductor tipo n son los electrones y los portadores minoritarios son los huecos.

La figura 1.1-b muestra un semiconductor tipo p; se forma al incorporar un número determinado de “impurezasceptoras”  $N_a$  que en este caso carecen de electrones para completar la regla del octeto (donan huecos). Para el cristal de Si las impurezasceptoras son átomos con valencia menor a cuatro, aunque generalmente se utilizan elementos del grupo IIIA. Para completar la regla del octeto hace falta un electrón, en consecuencia existe un hueco en la banda de valencia disponible para conducir. Los portadores mayoritarios en un semiconductor tipo p son huecos y los portadores minoritarios son electrones.

Cuando se agregan un numero de impurezas bajo se dice que el material es un semiconductor no degenerado, y por el contrario, cuando se agregan un número de impurezas alto se dice que el material es un semiconductor degenerado [19]. Para el presente trabajo el interés se enfocara en semiconductores no degenerados.



**Figura 1.1.** Cristal de Si en 2D. a) Dopaje con impureza donadora (grupo V) y b) dopaje con impureza aceptora (grupo III).

Otra clasificación útil de semiconductores es según su composición química. Semiconductores del grupo cuatro de la tabla periódica se denominan semiconductores tipo IV y se conocen como semiconductores elementales. El diamante, grafito,  $\alpha$ -Sn, Si, Ge conforman este grupo, mientras que el Pb no se considera semiconductor. Los semiconductores con composición química III-V, II-VI y I-VI se denominan compuestos.

## 1.2 Materiales Cristalinos

Los materiales también se clasifican según su estructura. Aquellos con un arreglo ordenado y periódico se denominan cristales y por el contrario aquellos que no cumplen con estas características son llamados amorfos. En general las propiedades electrónicas de sólidos son expresadas de mejor manera en cristales [20]. Los semiconductores pueden presentarse en forma cristalina o amorfa, aunque la primera representa una inmensa mayoría, en consecuencia el estudio se enfocara en semiconductores cristalinos.

La periodicidad de cristales se plasma en un conjunto de puntos en el espacio denominado red [21]. La red no es una estructura en sí, sino un objeto matemático en donde se acomodan el átomo o el conjunto de átomos denominados base. En el caso ideal un cristal es la repetición infinita de la base en la red. La posición de los puntos de red en el espacio se establece por

medio de vectores linealmente independientes a partir de un origen cualquiera. La red es el conjunto de todos los vectores posición:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (1.4)$$

donde  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$  son vectores de traslación fundamentales [22] y  $\mathbf{R}$  es el vector generador de red. Los vectores de traslación fundamentales poseen propiedades de ortogonalidad y forman una base matemática para el espacio de la red. El volumen creado a partir de estos tres vectores concurrentes es

$$V_p = \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 \quad (1.5)$$

donde  $V_p$  también es llamada celda elemental. Si los vectores de traslación fundamentales son primitivos el volumen  $V_p$  se denomina celda primitiva. No existe una celda de menor volumen que una celda primitiva y existen diversas formas de celdas elementales [20,22]. La traslación de la celda elemental a todas las posiciones  $\mathbf{R}$  produce la configuración espacial del cristal y la red que se describe por la ecuación (1.4) se denomina red de Bravais. La tabla 1.2 muestra las redes de Bravais, los sistemas y las condiciones de cada tipo.

**Tabla 1.2.** *Redes de Bravais [20].*

Sistema	Condición
Triclínica	<i>Todos los ángulos diferentes</i>
Monoclínica	$\alpha = \gamma = 90^\circ$
Ortorómbica	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	$a = b, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Cúbica	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonal	$a = b, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Hexagonal	$a = b, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

### 1.2.1 Estructura Cristalina Típica de Semiconductores

La experiencia ha indicado que los materiales semiconductores tienen una tendencia a elegir redes de Bravais tipo cúbicas, sobre todo las fcc. También hay semiconductores que poseen redes tipo hexagonal, aunque representan una minoría relativa. Es costumbre que algunas

redes adopten el nombre del material más representativo de dicha red. La tabla 1.3 muestra las tres estructuras cristalinas más comunes y ejemplos de semiconductores que presentan dichas estructuras.

**Tabla 1.3.** *Materiales con estructura de diamante, blenda de zinc y wurzita.*

Estructura	Material
Diamante	Diamante, Ge, Si, $\alpha$ -Sn
Blenda de Zinc	AlAs, AlP, AlSb, BN, BP, GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb, CdS, CdSe, CdTe, $\beta$ -HgS, HgSe, HgTe, ZnS, ZnSe, ZnTe, $\gamma$ -CuBr, $\gamma$ -CuCl, $\gamma$ -CuI
Wurzita	AlN, BN, GaN, InN, CdS, CdSe, ZnO, ZnS, ZnSe, $\beta$ -AgI

### 1.3 Electrón en un Potencial Periódico

Cuando se estudia la dinámica de un electrón en un sólido, nos enfrentamos a un problema de muchos cuerpos, ya que existen interacción electrón - electrón y electrón-ion, por lo anterior no es posible hablar de los niveles energéticos de los átomos individuales, sino de los niveles de energía de todos los átomos [23]. En esta parte de la tesis, se estudiara el comportamiento de un solo electrón inmerso en un potencial periódico espacial. El potencial no se ve alterado al realizar una traslación de la forma  $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$  es decir,

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (1.6)$$

La ecuación (1.6) es la condición que asegura que todos los potenciales del cristal sean iguales. Es común representar la forma de los potenciales de un cristal como funciones deltas de Dirac o como barreras de potencial rectangulares con periodicidad infinita (Kronig-Penney). Para el fin del presente, se utilizara la segunda.

La descripción del estado físico de un electrón es por medio de una función de onda, variable que debe satisfacer la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (1.7)$$

donde  $\psi(\mathbf{r}, t)$  es la función de onda,  $V(\mathbf{r}, t)$  es el potencial,  $m$  es la masa y  $\hbar$  la constante de Planck reducida. La función de onda en cristales es de la forma:

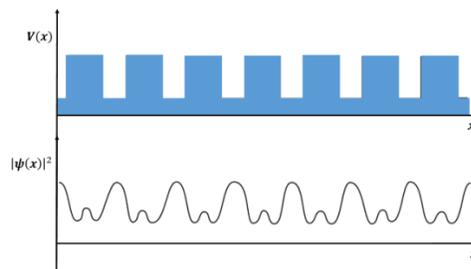
$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.8)$$

donde  $\mathbf{k}$  es el vector de onda y  $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  se denomina función de Bloch. La ecuación (1.8) se denomina teorema de Bloch-Floquet [14, 15, 19, 22]. Sustituyendo la función de Bloch periódica se obtiene la propiedad:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad (1.9)$$

Esto significa que existe una invariancia en la función de onda cuando  $r \rightarrow r + R$ . La función periódica  $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  tiene la propiedad análoga a (1.6):

$$U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.10)$$



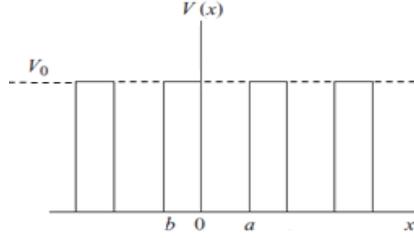
**Figura 1.2.** a) Potencial periódico en un material periódico. b) Probabilidad de función de onda de un electrón en la red. El potencial periódico produce una periodicidad espacial de la función de onda de acuerdo al teorema de Bloch.

## 1.4 Teoría de Bandas

La estructura energética de sólidos es la suma de los eigenvalores de energía de los electrones. Para sistemas con pocos electrones, esto no representa un problema difícil de resolver, sin embargo para sólidos el estudio de electrones individuales no es conveniente, y el mejor enfoque es el del estudio de un colectivo de electrones. La estructura energética del colectivo de electrones en sólidos se denomina bandas de energía y la teoría que describe las bandas de energía se denomina teoría de bandas.

### 1.4.1 Modelo Kronig-Penney

El modelo considera el seguimiento de un solo electrón en una sola dimensión, sin embargo el resultado es generalizable a tres dimensiones. Cada átomo fijo en el cristal produce un potencial de barrera rectangular de altura  $V_0$  [24].



**Figura 1.3.** Representación de la energía potencial de la base en una red cristalina. La forma rectangular corresponde a una idealización que fija a  $V_0$  constante y facilita la solución de la ecuación de Schrödinger.

El espectro de eigenvalores de energía se obtiene al resolver la ecuación de Schrödinger. La figura 1.3 muestra el potencial periódico y las regiones en que se divide el problema. La región I corresponde a  $0 < x < a$  y la región II a  $-b < x < 0$ . La solución de la ecuación de Schrödinger para la parte I y II es  $\psi_I(x) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx}$  y  $\psi_{II}(x) = Ce^{Qx} + De^{-Qx}$  donde  $A, B, C$  y  $D$  son las amplitudes de la función de onda y  $K$  y  $Q$  son los términos asociados a la energía de la función de onda, definidos como  $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  y  $Q = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ .

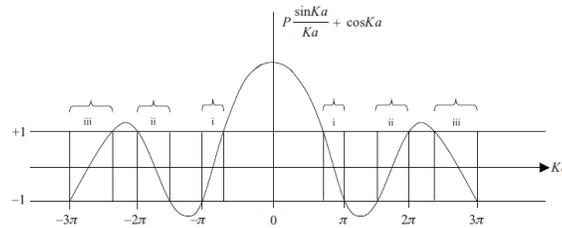
Los valores de las amplitudes se obtienen con las condiciones de frontera del sistema:  $\psi(x)$  y  $\frac{d\psi(x)}{dx}$  deben ser continuas y suaves en  $x = 0$  y la función de onda debe tener la forma de (1.8) y (1.9) en  $x = a$  y  $x = -b$ . Las soluciones de la ecuación de Schrödinger en las dos regiones son

$$\begin{aligned}
 A + B &= C + D \\
 iK(A - B) &= Q(C - D) \\
 Ae^{iKa} + Be^{-iKa} &= (Ce^{-Qb} + De^{Qb})e^{ik(a+b)} \\
 iK(Ae^{iKa} - Be^{-iKa}) &= Q(Ce^{-Qb} + De^{Qb})e^{ik(a+b)}
 \end{aligned}$$

Este sistema de ecuaciones solo tiene solución si su determinante es igual a cero; luego resolviendo el sistema y tomando en cuenta los supuestos propuestos en [24] se obtiene

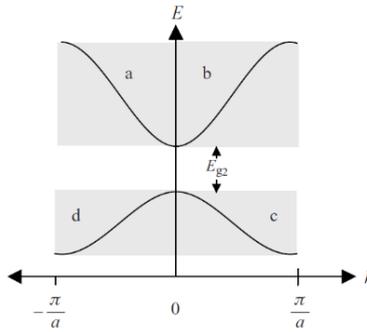
$$\cos ka = P \frac{\sin Ka}{Ka} + \cos Ka$$

Esta ecuación solo acepta soluciones entre los extremos 1 y -1, lo que restringe los valores de  $Ka$  como se muestra en la figura 1.4.



**Figura 1.4.** Gráfica de  $P \frac{\sin Ka}{Ka} + \cos Ka$  contra  $Ka$ . Los corchetes indican las regiones donde existe solución [14, 15, 19, 21, 24].

La energía y  $K$  están relacionadas y entonces se puede asociar esta relación con la solución grafica de la gráfica anterior. La figura 1.4 muestra las energías permitidas y prohibidas del sistema según  $Ka$ , luego, debido a que  $K$  es un término asociado a la energía, es conveniente “replotear” la gráfica fijando  $Ka$  en el eje energético como variable dependiente del vector de onda  $k$  (de la función de Bloch). La figura 1.5 muestra el esquema de su zona reducida energía-momento. Las regiones en gris se denominan bandas permitidas y la región en blanco se denomina banda prohibida o “band gap”.



**Figura 1.5.** Esquema de zona reducida que corresponde al diagrama de bandas simplificado de los materiales, donde el band gap es la diferencia entre la menor energía de conducción y la máxima energía de valencia, situación suficiente para escribir las propiedades eléctricas de sólidos [24].

### 1.4.2 Diagrama de Bandas

La figura 1.6 muestra los diagrama de bandas de a) Si y b) GaAs. La separación entre curvas corresponde a brechas energéticas entre portadores de carga, no obstante, no es necesario conocer todos los gaps energéticos de los portadores ya que solo los electrones con menor energía de la banda de conducción y los huecos con mayor energía de la banda de valencia dominan el comportamiento electrónico de los sólidos, esto es:

$$E_g = E_c - E_v \quad (1.11)$$

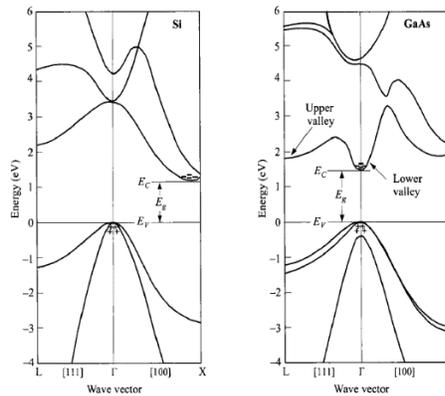
De acuerdo con (1.1) y (1.2) la conductividad de los materiales depende de la temperatura, por ende el band gap de los materiales también. Experimentalmente se ha encontrado que

$$E_g = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (1.12)$$

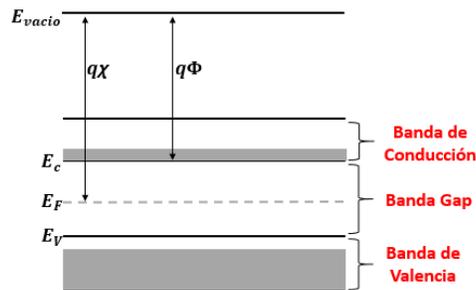
Donde  $E_g(0)$  es la energía del band gap al cero absoluto y  $\alpha$  y  $\beta$  son parámetros experimentales [25]. La figura 1.7 muestra el diagrama de bandas simplificado de acuerdo a (1.11). La diferencia entre  $E_{vacio}$  y  $E_c$  se llama afinidad electrónica  $\chi$  y es la energía necesaria para desprender un electrón de la banda de conducción hacia el vacío. La línea discontinua es un nivel energético imaginario denominado nivel de Fermi, y se define como la energía para la cual la probabilidad de encontrar el electrón en ese nivel vale  $\frac{1}{2}$  [19, 22, 25], entonces, la interpretación del nivel de Fermi corresponde al valor medio de energía de los portadores de carga en un material [26]. En el cero absoluto (0 K) corresponde a la parte superior del

conjunto de niveles de energía de electrones. La diferencia entre el nivel de vacío y la energía de Fermi se denomina función de trabajo  $\Phi$ .

Las bandas en el diagrama de bandas simplificados son: Banda de valencia: Lugar energético donde se encuentran los electrones de valencia. También se denomina banda menor parcialmente llena ya que por lo general es la que posee mayor cantidad de electrones. La conducción es llevada a cabo por huecos y su nivel energético mayor es  $E_v$ ; Banda de conducción: Lugar energético donde se encuentran los electrones de conducción. También se denomina banda mayor parcialmente vacía ya que por lo general es la que posee menor cantidad de electrones. La conducción es llevada a cabo por electrones y su nivel energético menor es  $E_c$ ; Banda prohibida (band gap): Diferencia energética entre  $E_c$  y  $E_v$  que es la energía necesaria para que un electrón conduzca. Se denomina prohibida porque no existe conducción en esta región. La magnitud del band gap determina la clasificación eléctrica de la materia.

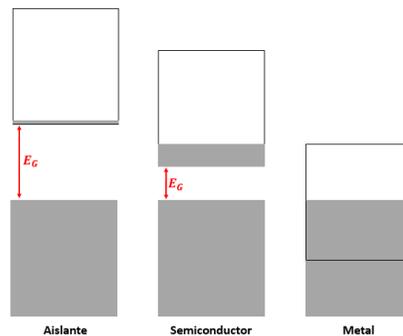


**Figura 1.6.** Diagrama de bandas de energías de a) Si (band gap indirecto) y b) GaAs (band gap directo). Los signos “+” indican concentración de huecos y “-” indican concentración de electrones [20].



**Figura 1.7.** Diagrama de bandas de energía simplificado.

La figura 1.8 muestra la estructura de bandas típica de metales, semiconductores y aislantes. Se asumirá que un material con ausencia de band gap es un conductor, con band gap entre 0 y 4 eV es un semiconductor, y con band gap mayor a cuatro eV es un aislante. El nivel de Fermi varía según la concentración de portadores en cada caso; en metales se sitúa en la superficie, en aislantes se encuentra aproximadamente en la mitad del band gap y en semiconductores existen tres posibles casos según el tipo: en intrínsecos se encuentra muy cercano a la mitad del band gap, en tipo n se encuentra muy cercano a  $E_c$  y en tipo p se encuentra muy cercano a  $E_v$  [20].



**Figura 1.8.** Diagrama de bandas de energía de aislante, semiconductor y metal. El color gris representa la población de electrones y hace evidente las definiciones “parcialmente llena” y “parcialmente vacía”.

### 1.4.3 Masa Efectiva

La teoría de bandas impone que las partículas en los sólidos se encuentran sujetas a fuerzas externas de naturaleza periódica. La consecuencia más importante de la presencia del potencial periódico en cristales es el cambio de las propiedades del electrón; existe una magnitud física que contiene todos los cambios debido a efecto de las interacciones partícula-potencial denominado masa efectiva  $m^*$ . El concepto de masa efectiva es una poderosa abstracción, ya que representa toda la información de la estructura de bandas, cerca del tope de la banda de valencia o cerca del fondo de la banda de conducción [14].

El movimiento de un electrón se describe según su función de onda. La velocidad de grupo, que es la velocidad con la que las variaciones de la amplitud de onda se propagan en el medio:

$$\mathbf{v}_G = \nabla_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \quad (1.13)$$

donde  $\omega_k$  es la velocidad angular. Luego, la fuerza del electrón según la hipótesis de De Broglie es

$$\mathbf{F}_{\text{ext}} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} \quad (1.14)$$

donde el origen de la fuerza es externo (potencial periódico). El lado derecho de la ecuación anterior se refiere a un cambio en el momento del cristal provocado por fuerzas externas; la presencia de fuerzas externas cambia las características del electrón. De la segunda ley de Newton se observa que

$$m^* \mathbf{a} = m^* \frac{d\mathbf{v}_G}{dt}$$

Sustituyendo (1.13) en esta ecuación se obtiene

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2} \quad (1.15)$$

definido como masa efectiva. El uso de la masa efectiva solo tiene justificación en el caso del electrón ligado, ya que en el caso del electrón libre la masa efectiva coincide con la masa inercial y se cumple  $m^* = m$ . En el caso más general o cuando existe anisotropía, la masa efectiva precisa una representación tensorial. La interpretación física de la masa efectiva es la que justifica el uso del concepto hueco en la banda de valencia.

## 1.5 Teoría Electromagnética

La carga  $q$  es una propiedad fundamental de la materia y al igual que la masa o el volumen está presente en toda partícula [27]; con respecto a éstas, presenta dos grandes diferencias: puede ser de signo negativo y solo se presenta en cantidades discretas (carga elemental). En un principio denominada “masa eléctrica”, la carga es la causa de los campos en teoría electromagnética.

### 1.5.1. Ecuaciones Fundamentales

Coulomb es quien comienza el desarrollo formal de la electricidad y el magnetismo al publicar en 1785 [28], la primera de las ecuaciones fundamentales, la ley de Coulomb:

$$\mathbf{F} = \frac{q_1 q_2 (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{4\pi\epsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} \quad (1.16)$$

donde  $\mathbf{F}$  es fuerza entre las dos cargas,  $\mathbf{r}_1$  y  $\mathbf{r}_2$  son vectores de posición,  $q_1$  y  $q_2$  son las cargas de las partículas y  $\epsilon$  es la permitividad eléctrica del medio. A Coulomb le siguieron Ampere y Faraday con investigaciones del campo eléctrico y magnético por separado. Subsecuentemente Maxwell y Hertz condensaron todo el conocimiento de la teoría electromagnética en un conjunto de ecuaciones conocidas como “Ecuaciones de Maxwell”. En teoría clásica de campos estas ecuaciones son las que gobiernan la interacción electromagnética, que en su forma diferencial estas ecuaciones son:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (1.17 - a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.17 - b)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.17 - c)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.17 - d)$$

donde  $\mathbf{E}$  es el campo eléctrico,  $\mathbf{D}$  es el desplazamiento eléctrico,  $\mathbf{H}$  es el campo magnético,  $\mathbf{B}$  es el campo de inducción magnética,  $\mathbf{J}$  es la densidad de corriente y  $\rho$  es la densidad de carga. Los campos se relacionan por medio de las llamadas ecuaciones constitutivas [28]:

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} \quad (1.18 - a)$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu} \mathbf{B} \quad (1.18 - b)$$

donde  $\mu$  es la permeabilidad magnética. Se hace la suposición de que los campos están en un medio lineal, homogéneo, isotrópico y no dispersivo.

Implícitamente las ecuaciones de Maxwell cumplen con leyes de conservación de la carga, energía y momento lineal [27, 28]. La figura 1.9 muestra un volumen de control diferencial  $V$  delimitado por una superficie de control cerrada  $S$ . La carga que cambia dentro del volumen es la misma que la que atraviesa la superficie cerrada:

$$\frac{dq}{dt} = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dv = - \oint_S \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{s}$$

Haciendo uso del teorema de Gauss la ecuación de balance es

$$\int_v \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \right] dv = 0$$

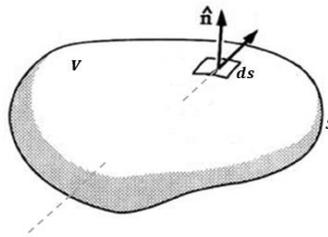
luego, definiendo

$$\mathbf{J} = \rho \mathbf{v} \quad (1.19)$$

y debido a que la igualdad es igual a cero

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (1.20)$$

La ecuación (1.19) es la densidad de corriente que aparece en la Ley de Ampere-Maxwell y la ecuación (1.20) se llama ecuación de continuidad porque expresa la ley de conservación de la carga eléctrica.



**Figura 1.9.** Volumen de control diferencial usado para resolver las ecuaciones de balance, donde es recomendable elegir geometrías de alta simetría. La ecuación de continuidad en el medio continuo se obtiene bajo el enfoque Euleriano.

Por otro lado, la fuerza de que recibe una partícula cargada en presencia de un campo electromagnético es

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (1.21)$$

donde  $\mathbf{F}$  es la fuerza de la partícula y  $\mathbf{v}$  es la velocidad de la partícula en el medio. A esta fuerza se le denomina fuerza de Lorentz. Las ecuaciones (1.16), (1.17), (1.20) y (1.21) son las ecuaciones fundamentales de la teoría electromagnética, a partir de estas ecuaciones se obtienen relaciones importantes para la electrostática y la electrodinámica que describen la física de semiconductores.

Por la ley de Coulomb sabemos que la fuerza entre las cargas es de naturaleza central, entonces el campo eléctrico es un sistema conservativo y por consecuencia es derivable de un potencial escalar. De (117-a) se obtiene el campo eléctrico en su forma integral, luego con la identidad  $\frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} = -\nabla \left( \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right)$  [28] el campo eléctrico diferencial es

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi \quad (1.22)$$

donde  $\varphi$  es el potencial eléctrico. Aplicando el operador divergencia a esta última ecuación y sustituyendo (117-a) se obtiene

$$\nabla^2\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon} \quad (1.23)$$

denominada ecuación de Poisson. Es una ecuación importante en electrodinámica y describe la relación entre el potencial en un punto y la fuente que lo produce. Cuando  $\rho = 0$  la ecuación de Poisson es

$$\nabla^2\varphi = 0 \quad (1.24)$$

La ecuación (1.24) se denomina ecuación de Laplace y describe los fenómenos electrostáticos.

### 1.5.2. Cargas en Movimiento

De particular interés es la descripción de sistemas físicos donde las cargas se encuentran en movimiento. El conjunto de cargas en movimiento se denomina corriente eléctrica:

$$I = \frac{dq}{dt} = \int_s \mathbf{J} \cdot d\mathbf{s} \quad (1.25)$$

donde  $I$  es la intensidad de corriente eléctrica y el segundo término de la ecuación está en su representación integral, la cual brinda información acerca de la velocidad del conjunto de partículas. A partir de la ecuación de continuidad se puede obtener una relación de la densidad de corriente y el campo eléctrico. En un campo el movimiento de cargas se describe igualando la segunda ley de Newton con la ley de Coulomb:

$$\mathbf{v} = \mu\mathbf{E} \quad (1.26)$$

donde  $\mathbf{v}$  es la velocidad de deriva,  $\mathbf{E}$  es el campo eléctrico y  $\mu = \frac{q\tau_s}{m}$  se denomina movilidad [15]. Sustituyendo esta ecuación en (1.19) se obtiene

$$\mathbf{J} = nq\mu\mathbf{E} = \sigma\mathbf{E} \quad (1.27)$$

donde  $\sigma = nq\mu$  se define como la conductividad del medio [21, 22]. La ecuacion (1.27) se conoce como la Ley de Ohm. Es una ecuacion lineal y al igual que (1.18) es una ecuacion constitutiva. Para fines practicos, las suposiciones de 1.5.1 aplican tambien para la ley de Ohm, de otra forma  $\sigma$  precisaria una representacion tensorial.

Debido a que la carga puede ser de positiva o negativa, el vector velocidad de la ecuacion (1.26) puede tener dos direcciones (opuestas). Sin embargo esto no significa la existencia de dos densidades de corrientes con distinta direccion. La densidad de corriente fluye en direccion del campo electrico y de manera mas general la conductividad del medio es

$$\sigma = q(n\mu_n + p\mu_p) \quad (1.28)$$

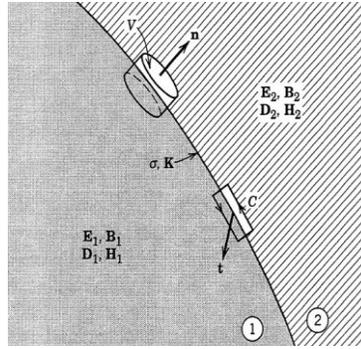
donde  $\mu_n$  y  $\mu_p$  son la movilidad de cargas negativas y positivas respectivamente. La ley de Ohm queda entonces queda expresada como

$$\mathbf{J} = nq\mu_n\mathbf{E} + pq\mu_p\mathbf{E} \quad (1.27)$$

La ecuacion (1.27) se llama densidad de corriente de deriva [29].

### 1.5.3. Condiciones de Frontera

Las ecuaciones diferenciales son los instrumentos matemáticos que describen la interacción electromagnética. Empero, estas ecuaciones carecen de significado cuando no existen condiciones que restrinjan su comportamiento. Los elementos que incorporan un significado físico a las ecuaciones diferenciales son las condiciones de frontera y condiciones iniciales [6]. Las condiciones de frontera para el electromagnetismo se obtienen a partir de las ecuaciones de Maxwell y los teoremas de Gauss y Stokes. La figura 1.10 muestra la “caja de píldoras” y el “lazo amperiano” utilizados por el teorema de Gauss y Stokes respectivamente. En el caso límite de la interface entre dos medios la altura  $h \rightarrow 0$ .



**Figura 1.10.** Objetos matemáticos (caja de píldora y lazo amperiano) utilizados por los teoremas de Gauss y Stokes. Los objetos son orientados de tal forma en que  $\hat{n}$  sea normal a la superficie y  $\hat{t}$  sea tangencial a esta [28].

Con el teorema de Gauss, la Ley de Gauss en su forma integral es

$$\oint_s \mathbf{D} \cdot d\mathbf{s} = \int_v \rho dv \quad (1.29 - a)$$

$$\oint_s \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = 0 \quad (1.30 - a)$$

descomponiendo en sus integrales de superficie

$$\int_{s_1} \mathbf{D} \cdot d\mathbf{s}_1 + \int_{s_2} \mathbf{D} \cdot d\mathbf{s}_2 + \lim_{h \rightarrow 0} \int_{s_3} \mathbf{D} \cdot d\mathbf{s}_3 = \lim_{h \rightarrow 0} \rho \Delta s \quad (1.29 - b)$$

$$\int_{s_1} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s}_1 + \int_{s_2} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s}_2 + \lim_{h \rightarrow 0} \int_{s_3} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s}_3 = 0 \quad (1.30 - b)$$

donde  $S_1$  y  $S_2$  son las superficies de las tapas de la “caja de píldoras” y  $S_3$  es la superficie del cuerpo. Resolviendo queda

$$D_{2n} - D_{1n} = \sigma \quad (1.31)$$

$$B_{2n} = B_{1n} \quad (1.32)$$

Las ecuaciones (1.31) y (1.32) son las condiciones de frontera debido a la Ley de Gauss. Luego con el teorema de Stokes, la Ley de Ampere-Maxwell y la Ley de Faraday en su forma integral son

$$\oint_l \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = \int_s \left[ \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right] \cdot d\mathbf{s} \quad (1.33 - a)$$

$$\oint_l \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = - \int_s \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{s} \quad (1.34 - a)$$

descomponiendo en sus integrales de línea

$$\int_{l_1} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l}_1 + \lim_{h \rightarrow 0} \int_{l_2} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l}_2 - \int_{l_3} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l}_3 - \lim_{h \rightarrow 0} \int_{l_4} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l}_4 = \lim_{h \rightarrow 0} \mathbf{J} \Delta l \quad (1.33 - b)$$

$$\int_{l_1} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l}_1 + \lim_{h \rightarrow 0} \int_{l_2} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l}_2 - \int_{l_3} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l}_3 - \lim_{h \rightarrow 0} \int_{l_4} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l}_4 = 0 \quad (1.34 - b)$$

donde  $l_1$  y  $l_3$  son las líneas inferior y superior del “lazo amperiano” y  $l_2$  y  $l_4$  son las líneas derecha e izquierda (altura). Resolviendo

$$H_{2t} - H_{1t} = K \quad (1.35)$$

$$E_{2t} = E_{1t} \quad (1.36)$$

Las ecuaciones (1.35) y (1.36) son las condiciones de frontera debido a la Ley de Ampere-Maxwell y la Ley de Faraday. Las ecuaciones (1.31), (1.32), (1.35) y (1.36) dan un significado físico a la matemática de la teoría electromagnética y se utilizan en problemas descritos por las ecuaciones fundamentales.

#### 1.5.4 Energía, Campo y Ondas Electromagnéticas

Como se mencionó, la ecuación (1.20) indica la conservación de carga local. Siguiendo el principio de conservación de carga y energía se obtiene la energía electrostática asociada al campo eléctrico, que es [28]

$$W_e = \frac{\epsilon}{2} \int E^2 dV \quad (1.37)$$

y de igual forma, el trabajo requerido para obtener corrientes eléctricas, asociado al campo magnético es

$$W_m = \frac{1}{2\mu} \int B^2 dV \quad (1.38)$$

y de aquí, la densidad de energía es

$$u = \frac{1}{2\mu} B^2 + \frac{\epsilon}{2} E^2 \quad (1.39)$$

Estas ecuaciones son relevantes porque indican que el campo electromagnético almacena energía, y la cantidad de ésta depende de la magnitud de los campos y los coeficientes de permitividad eléctrica y permeabilidad magnética. Por tanto, y como propiedad clásica de los campos, la energía se transporta a medida en que se avanza en un medio material.

La fuerza electromagnética sobre una corriente eléctrica se calcula mediante la ecuación (1.21), entonces el trabajo realizado sobre una carga  $q$  es  $\mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = q\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}dt$ , luego, el trabajo en el tiempo es

$$\frac{dW}{dt} = \int \mathbf{E} \cdot \mathbf{J} dV \quad (1.40)$$

sustituyendo (1.17-c) en (1.40) el integrando es igual a

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{J} = \mathbf{E} \cdot \left( \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{B} - \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right)$$

Aplicando la relación  $\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{B})$  y usando la ley de Faraday se tiene

$$\mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) = -\mathbf{B} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B})$$

como  $\mathbf{B} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial B^2}{\partial t}$  se obtiene entonces

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{J} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{\mu} B^2 + \epsilon E^2 \right) - \frac{1}{\mu} \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B})$$

entonces queda

$$\frac{dW}{dt} = \int \mathbf{E} \cdot \mathbf{J} dV = \int \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{\mu} B^2 + \epsilon E^2 \right) - \frac{1}{\mu} \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \right] dV$$

finalmente, se obtiene el teorema de Poynting

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{d}{dt} \int u dV - \frac{1}{\mu} \int (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \cdot d\mathbf{s}$$

El primer término del lado derecho representa la energía total, mientras que el segundo término del lado derecho es el cambio de energía que se transporta hacia afuera del volumen  $V$ . A esto último se le conoce como vector de Poynting [28]:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\mu} \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (1.41)$$

El vector de Poynting es esencial en el estudio de propagación de ondas electromagnéticas y energía para celdas solares ya que es usado como indicador de la cantidad de energía que llega al dispositivo como radiación incidente y a partir de éste se obtienen relaciones de la energía absorbida y reflejada en el dispositivo (transmitancia y reflectancia) desde un enfoque clásico.

Por otro lado en el estudio de propagación de ondas electromagnéticas se resuelve la ecuación de onda, la cual es una ecuación diferencial parcial de segundo orden lineal en la posición y en el tiempo. Las condiciones de frontera que se desarrollaron en la presente sección son consideradas para resolver la propagación de las ondas electromagnéticas en el espacio y distintos medios. La ecuación de onda es

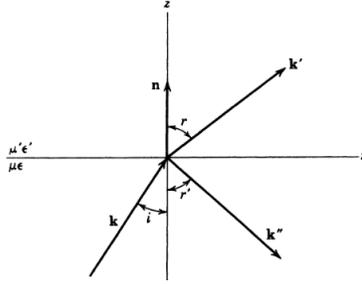
$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.42)$$

la solución a la ecuación diferencial es de la forma conocida como onda plana

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad (1.43 - a)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad (1.43 - b)$$

de donde se satisface la triada  $\mathbf{E} \times \mathbf{B} = \mathbf{k}$ . Como ejemplo particular pero muy útil se describirá la propagación de la luz a través de dos medios semiinfinitos considerando que las ondas son monocromáticas.



**Figura 1.11.** Onda incidente  $\mathbf{k}$  sobre el plano de incidencia de dos medios materiales diferentes dando origen a una onda refractada  $\mathbf{k}'$  y una onda reflejada  $\mathbf{k}''$ .

De las ecuaciones (143) y de acuerdo a los desarrollos en [28], el campo eléctrico y magnético incidente se puede expresar como

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \quad (1.44 - a)$$

$$\mathbf{B} = \frac{\sqrt{\mu\epsilon}}{|\mathbf{k}|} \mathbf{k} \times \mathbf{E} \quad (1.44 - b)$$

el campo electromagnético transmitido es de la forma

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E}'_0 e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \quad (1.45 - a)$$

$$\mathbf{B}' = \frac{\sqrt{\mu'\epsilon'}}{|\mathbf{k}'|} \mathbf{k}' \times \mathbf{E}' \quad (1.45 - b)$$

y el campo electromagnético reflejado es

$$\mathbf{E}'' = \mathbf{E}''_0 e^{i(\mathbf{k}''\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \quad (1.46 - a)$$

$$\mathbf{B}'' = \frac{\sqrt{\mu''\epsilon''}}{|\mathbf{k}''|} \mathbf{k}'' \times \mathbf{E}'' \quad (1.46 - b)$$

Es importante definir que  $k = \sqrt{\mu\epsilon}\omega$  donde  $k = k''$ ; además,  $k' = \sqrt{\mu'\epsilon'}\omega$ . Cuando la onda electromagnética está linealmente polarizada y el campo eléctrico son perpendicular al plano de incidencia se dice que el campo está en la situación transversal eléctrica, y tiene la siguiente relación entre los campos. Utilizando las ecuaciones (1.43-1.46) y las condiciones de frontera

se obtienen las siguientes relaciones entre el haz transmitido y reflejado con respecto al incidente

$$\frac{E'_o}{E_o} = \frac{2n\cos\theta_i}{n\cos\theta_i + \frac{\mu}{\mu'}\sqrt{n'^2 - n^2\text{sen}^2\theta_i}} \quad (1.47 - a)$$

$$\frac{E''_o}{E_o} = \frac{n\cos\theta_i - \frac{\mu}{\mu'}\sqrt{n'^2 - n^2\text{sen}^2\theta_i}}{n\cos\theta_i + \frac{\mu}{\mu'}\sqrt{n'^2 - n^2\text{sen}^2\theta_i}} \quad (1.47 - b)$$

De igual forma cuando la onda electromagnética esta linealmente polarizada y el campo eléctrico es paralelo al plano de incidencia se dice que el campo está en la situación transversal magnética y se obtiene

$$\frac{E'_o}{E_o} = \frac{2nn'\cos\theta_i}{\frac{\mu}{\mu'}n'^2\cos\theta_i + n\sqrt{n'^2 - n^2\text{sen}^2\theta_i}} \quad (1.47 - c)$$

$$\frac{E''_o}{E_o} = \frac{\frac{\mu}{\mu'}n'^2\cos\theta_i - n\sqrt{n'^2 - n^2\text{sen}^2\theta_i}}{\frac{\mu}{\mu'}n'^2\cos\theta_i + n\sqrt{n'^2 - n^2\text{sen}^2\theta_i}} \quad (1.47 - d)$$

Los resultados (1.47) se conocen como relaciones de Fresnel [28] y, otorgan información acerca del campo incidente, campo refractado y campo reflejado bajo polarización cualesquiera.

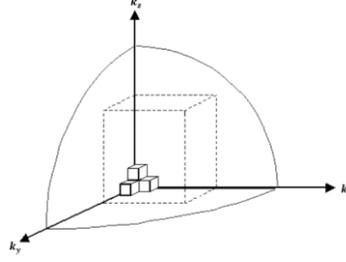
## CAPÍTULO 2. FÍSICA DE SEMICONDUCTORES

En esta sección se desarrolla los conceptos básicos en semiconductores que describen los fenómenos de transporte que ocurren en dicho material. Se comienza definiendo la densidad de estados, luego se discute la concentración de portadores en equilibrio y fuera de equilibrio, la dependencia de la temperatura y los mecanismos de transporte. Se concluye con las ecuaciones del modelo deriva- difusión el cual es empleado en las simulaciones del presente trabajo.

### 2.1 Densidad de Estados

Para describir el comportamiento de los semiconductores, se introduce el concepto de concentración de portadores en un semiconductor, esto es, el número de estados disponibles para cada configuración de energía. Aunque es una cantidad discreta, amerita un trato de variable intensiva debido al elevado número de portadores en materiales semiconductores, convirtiendo la variable de interés en una densidad de estados. Se hace la suposición de que las partículas están confinadas en el material siguiendo el modelo de un pozo cuántico infinito [31].

La solución más general de la ecuación de Schrödinger dentro del pozo unidimensional de ancho  $L$  es una función de senos y cosenos; al tomar en cuenta las condiciones de frontera del problema se obtiene espectro discreto del vector de onda  $k_x = \frac{n\pi}{L}$ , realizando el mismo procedimiento para  $k_y$  y  $k_z$  [32]. La figura 2.1 muestra el espacio  $k$  de las partículas, donde los vectores en el pozo no aceptan cantidades negativas y la combinación de sus posiciones solamente genera una octava parte de una esfera, en consecuencia el octante en el espacio  $k$  representa el volumen de momentos donde se sitúa el número de estados disponibles del problema.



**Figura 2.1.** Octante positivo del espacio de momentos de los estados del material [31].

Por lo tanto el número total de estados por unidad de volumen de momentos es

$$N = (2) \left(\frac{1}{8}\right) \left(\frac{4}{3} \pi k^3\right) \left(\frac{L}{\pi}\right)^3$$

donde el factor dos es debido al spin de los electrones. De aquí, el número de estados por unidad de energía es

$$\frac{dN}{dE} = \frac{dN}{dk} \frac{dk}{dE} = \frac{L^3}{\pi^2} k^2 \frac{dk}{dE}$$

La energía de los portadores es igual a la de una partícula libre; incluyendo la derivada de  $k$  con respecto a la energía y al dividir el término izquierdo de la ecuación anterior entre el volumen del pozo queda

$$g(E) = \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3} m^{*\frac{3}{2}} \sqrt{E} \quad (2.1)$$

donde  $g(E)$  se define como la densidad de estados. Con base a lo anterior, es posible describir una densidad de estados para los portadores en la banda de conducción y otra para la banda de valencia. Entonces,

$$g_c(E) = \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3} m_e^{*\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_c} \quad (2.2 - a)$$

$$g_v(E) = \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3} m_h^{*\frac{3}{2}} \sqrt{E_v - E} \quad (2.2 - b)$$

donde  $g_c$  y  $g_v$  son las densidades de estados en la banda de conducción para electrones y en la banda de valencia para huecos respectivamente [31, 32, 33, 34, 35].

## 2.2 Concentración de Portadores en Equilibrio

Una de las características más sobresalientes de los materiales semiconductores es que la concentración de portadores libre es variable, por ello es necesario cuantificar la cantidad presente de estos en semiconductores. Para electrones la concentración de portadores en la banda de conducción es

$$n = \int_{E_c}^{tope B_c} g_c(E)f(E)dE \quad (2.3)$$

donde  $f(E)$  es la distribución Fermi-Dirac definida como [32]

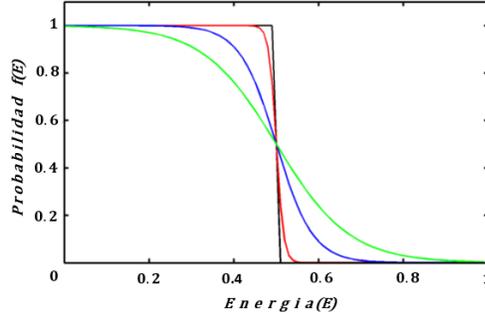
$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)}} \quad (2.4)$$

donde  $E_F$  es el nivel de Fermi y  $k_B$  es la constante de Boltzmann. La ecuación (2.4) representa la probabilidad de ocupación de fermiones para cada nivel de energía. La figura 2.2 ilustra la función Fermi-Dirac y su dependencia con la energía para varias temperaturas. En el caso de que la energía sea muy superior a la energía del cero absoluto (caso temperatura ambiente) la función de Fermi tiende a cero, por lo que el límite superior de integración aumenta hasta infinito. Luego, la ecuación (2.3) se puede escribir como

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g_c(E)f(E)dE \quad (2.5)$$

Análogamente, la concentración de huecos en un semiconductor es

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} g_v(E)[1 - f(E)]dE \quad (2.6)$$



**Figura 2.2.** Distribución de probabilidad Fermi-Dirac con distinta configuración según la temperatura: 0 K (negro), >0 K (rojo y azul) y >>0 K (verde).

Entonces, la integración de la ecuación (2.5) muestra que la concentración de portadores es

$$n = N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{\frac{1}{2}} \left( \frac{E_F - E_c}{k_B T} \right) \quad (2.7)$$

tomando  $N_c = 2 \left[ \frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right]^{\frac{3}{2}}$ , y

$$F_{\frac{1}{2}} \left( \frac{E_F - E_c}{k_B T} \right) = \int_{E_c}^{\infty} \frac{\left[ \frac{E - E_c}{k_B T} \right]^{\frac{1}{2}} dE}{1 + e^{\left( \frac{E - E_c}{k_B T} \right)}} \quad (2.8)$$

donde  $N_c$  es la densidad efectiva de estados en la banda de conducción y  $F_{\frac{1}{2}}$  es una integral de orden  $\frac{1}{2}$  denominada integral de Fermi. Para semiconductores no degenerados esta integral puede sustituirse por una distribución Maxwell-Boltzmann, que simplifica las ecuaciones de densidad de portadores. La figura 2.3 muestra las condiciones de no degeneración para semiconductores, definiendo que existe degeneración cuando  $E_c - E_F < 3k_B T$  y  $E_F - E_V < 3k_B T$  [24]. Para semiconductores no degenerados podemos escribir que [16, 19, 21, 24, 29, 31, 36]:

$$F_{\frac{1}{2}} \left( \frac{E_F - E_c}{k_B T} \right) \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{\left( \frac{E_F - E_c}{k_B T} \right)} \quad (2.9)$$

llamada aproximación de Boltzmann. Cuando la energía es mucho mayor a la energía de Fermi, la distribución Fermi-Dirac se aproxima a una distribución Maxwell-Boltzmann, en

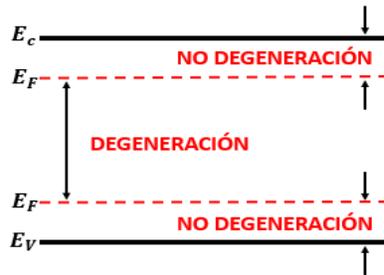
consecuencia cuando  $\lim_{E \gg E_F} f(E) \rightarrow f_{MB}(E)$  también es llamada aproximación de Boltzmann [36]. El presente trabajo solo tratara semiconductores no degenerados haciendo valida la aproximación de Boltzmann en todos los casos, además de que la temperatura será 300 K. Sustituyendo (2.9) en (2.7) se obtiene la concentración de electrones en un semiconductor no degenerado:

$$n_0 = N_c e^{\left(\frac{E_F - E_c}{k_B T}\right)} \quad (2.10 - a)$$

Análogamente la concentración de huecos es

$$p_0 = N_v e^{\left(\frac{E_v - E_F}{k_B T}\right)} \quad (2.10 - b)$$

donde la densidad efectiva de estados en la banda de valencia es  $N_v = 2 \left[ \frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right]^{\frac{3}{2}}$ .



**Figura 2.3.** Diagrama de bandas de energía con los límites de degeneración. Un número elevado de portadores de carga hace las  $E_F$  se acerquen a  $E_c$  o  $E_v$ .

### 2.2.1 Concentración de Portadores en Semiconductores Intrínsecos

La concentración de portadores intrínseca se obtiene sustituyendo las ecuaciones de energía de Fermi intrínseca por la energía de Fermi de (2.10-a) y (2.10-b):

$$n_0 = N_c e^{\left(\frac{E_i - E_c}{k_B T}\right)} \quad (2.11 - a)$$

$$p_0 = N_v e^{\left(\frac{E_v - E_i}{k_B T}\right)} \quad (2.11 - b)$$

como la concentración de electrones y huecos es igual a la concentración intrínseca se establece la igualdad:

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{\left(\frac{-E_g}{2k_B T}\right)} \quad (2.12)$$

se sigue entonces que el producto de portadores mayoritarios con portadores minoritarios es constante según:

$$pn = n_i^2 \quad (2.13)$$

La ecuación (2.13) se conoce como ley de acción de masas, ecuación muy poderosa que en equilibrio termodinámico permite hallar rápidamente la concentración de electrones o huecos en semiconductores no degenerados, o viceversa; para el caso degenerado, la ecuación (2.13) es una desigualdad.

La concentración de portadores puede expresarse como un término independiente de la densidad de efectiva de estados, tomándose como referencia la energía de Fermi intrínseca. Se despejan las densidades efectivas de estados (2.11-a) y (2.11-b) y se sustituyen en (2.10-a) y (2.10-b) resultando en

$$n_0 = n_i e^{\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right)} \quad (2.14 - a)$$

$$p_0 = n_i e^{\left(\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right)} \quad (2.14 - b)$$

donde la concentración de portadores es la concentración intrínseca que crece según la aproximación de Boltzmann.

### 2.2.2 Concentración de Portadores en Semiconductores Extrínsecos

La conducción en las bandas solo es llevada a cabo cuando las impurezas se encuentran en estado ionizado. Cuando el sistema adquiere energía suficiente, los portadores de carga de las impurezas pasan a sus respectivas bandas. La energía necesaria para desprender a un portador de carga de una impureza se denomina energía de ionización.

Las impurezas se denominan superficiales si su energía de ionización es menor a  $k_B T$ , y profundas si su energía de ionización es mayor [25, 29, 31]. Se puede entender a las impurezas como sistemas hidrogenoides [37]. Además, las energías que se calculan mediante el modelo de Bohr concuerda razonablemente con energías de ionización obtenidas experimentalmente [25].

Los semiconductores extrínsecos poseen una carga neutra a pesar de haber sido dopados debido al balance entre cargas fijas y móviles, es decir

$$p + N_d^+ - n - N_a^- = 0 \quad (2.15)$$

donde  $N_d^+$  y  $N_a^-$  son el número total de impurezas donadoras yceptoras ionizadas respectivamente, definidas como

$$N_d^+ = \frac{N_d}{1 + 2e^{\left(\frac{E_F - E_d}{k_B T}\right)}} \quad (2.16 - a)$$

$$N_a^- = \frac{N_a}{1 + 4e^{\left(\frac{E_a - E_F}{k_B T}\right)}} \quad (2.16 - b)$$

Los coeficientes del factor exponencial 2 y 4 que aparecen en (2.16-a) y (2.16-b) corresponden al grado de degeneración de electrones y huecos en sus respectivas bandas [31]. En un semiconductor tipo n no existen impurezasceptoras, en un semiconductor tipo p no existen impurezas donadoras y en ambos la concentración de portadores minoritarios es aproximadamente cero; esto junto con (2.10), (2.15) y (2.16) proporcionan las equivalencias:

$$N_c e^{\left(\frac{E_F - E_c}{k_B T}\right)} = \frac{N_d}{1 + 2e^{\left(\frac{E_F - E_d}{k_B T}\right)}} \quad (2.17 - a)$$

$$N_v e^{\left(\frac{E_v - E_F}{k_B T}\right)} = \frac{N_a}{1 + 4e^{\left(\frac{E_a - E_F}{k_B T}\right)}} \quad (2.17 - b)$$

de donde se obtienen la energía de Fermi para semiconductores tipo n y p de forma numérica.

### 2.2.2.1 Régimen de Temperatura en Semiconductores Extrínsecos

Existen rangos de temperatura en los cuales se puede clasificar el comportamiento de los materiales [25]. Cuando la energía térmica no es suficiente para ionizar las impurezas, la mayoría de los portadores de carga quedan unidos a los átomos donadores o aceptores. Esto ocurre a temperaturas bajas, y el rango en el que ocurre se denomina régimen de deionización o de congelamiento (freeze out) [22, 25, 36]. Temperaturas mayores al cero absoluto hacen

que el régimen de deionización disminuya drásticamente, más aun, temperaturas elevadas (temperatura ambiente que por convención es 300 K) hacen que los denominadores de (2.16) y (2.17) tiendan a la unidad, por lo que la ecuación (2.15) queda

$$p + N_d - n - N_a = 0 \quad (2.18)$$

de esta ecuación surgen varias expresiones según la temperatura y tipo de semiconductor. Por ejemplo, siguiendo el mismo razonamiento que el realizado para obtener la energía de Fermi de manera gráfica, un semiconductor tipo n presenta la igualdad

$$n = N_d \quad (2.19)$$

que significa que la densidad de portadores solo depende del grado de dopaje en el material, excluyendo aportaciones de otras densidades. El rango de temperatura en el cual la concentración de electrones es igual a la concentración de impurezas donadoras se llama régimen de saturación. A temperaturas mayores el régimen de saturación se pierde y la concentración de huecos puede seguir despreciándose, la ecuación (2.19) se vuelve entonces

$$n = N_d + p \quad (2.20)$$

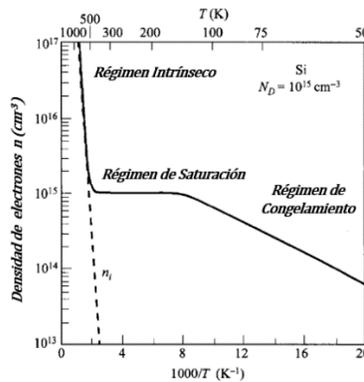
La densidad de portadores p se toma en cuenta por la creación de huecos en la banda de valencia debido al aumento de temperatura. La característica de semiconductor no degenerado hace posible sustituir p de la ley de acción de masas, lo que resulta en una ecuación algebraica de segundo grado cuya solución es

$$n = \frac{1}{2}N_d + \sqrt{\frac{N_d^2}{4} + n_i^2} \quad (2.21)$$

donde la densidad de portadores depende tanto de la impureza donadora como de la concentración intrínseca. Esta aproximación se encuentra dentro del régimen de saturación y sigue el mismo razonamiento que la aproximación de ionización total, solo que en esta se toma en cuenta la aportación de huecos; posee un alto grado de precisión por tomar en cuenta todas las densidades de portadores, y en consecuencia será la aproximación utilizada en el presente trabajo para la concentración de portadores. A temperaturas aún mayores la ecuación (2.21) se vuelve

$$n \approx n_i + \frac{N_d}{2} \quad (2.22)$$

El rango de temperatura en el cual el término de concentración intrínseca es el término dominante en la concentración de portadores se denomina régimen intrínseco. Las concentraciones para semiconductores tipo p se obtienen de la misma manera que las ecuaciones anteriores. La figura 2.4 muestra la densidad de electrones contra la temperatura y el lugar en la gráfica que le corresponde a cada régimen. En el régimen de saturación la concentración de portadores prácticamente solo depende del nivel de dopado y no de la temperatura. Es importante mencionar que la función en el régimen de saturación es prácticamente constante entre los 100 K y los 500 K, que en grados Celsius corresponde al rango entre  $-173.15^\circ\text{C}$  y  $226.8^\circ\text{C}$ .



**Figura 2.4.** Densidad de electrones en función de la temperatura de un material de Si tipo n con  $N_d = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . La adición de impurezas hace que el cambio de densidad sea mínimo especialmente en el rango de saturación, en contra parte al Si intrínseco que es altamente sensible a cambios de temperatura [36].

### 2.3 Concentración de Portadores Fuera de Equilibrio

La situación fuera de equilibrio sucede cuando cualquier agente externo perturba el sistema. En el caso de semiconductores para celdas solares el interés se enfoca en el desequilibrio causado por la luz incidente.

Como se observó en la sección anterior, las propiedades de los semiconductores se analizaron mediante las concentraciones de los portadores y el band gap. Pero, es de esperarse que la

concentración y en la situación fuera de equilibrio no sean las mismas que en la situación de equilibrio; la distribución de electrones y huecos inmediatamente después de perder la situación de equilibrio cambia [38]. Por conveniencia, la energía de Fermi se separa en dos cantidades denominadas cuasi-energías de Fermi, una para electrones  $E_{Fn}$  y otra para huecos  $E_{Fp}$ .

La concentración de portadores de sistemas fuera de equilibrio se obtiene sustituyendo las energías de Fermi por las cuasi-energías de Fermi en sistemas en equilibrio. Entonces la ecuación (2.10) queda

$$n = N_c e^{\left(\frac{E_{Fn} - E_c}{k_B T}\right)} \quad (2.23 - a)$$

$$p = N_v e^{\left(\frac{E_v - E_{Fp}}{k_B T}\right)} \quad (2.23 - b)$$

donde el subíndice cero se omite ya que la situación es fuera del equilibrio. A partir de estas relaciones se obtiene la ley de acción de masas fuera del equilibrio:

$$pn = n_i^2 e^{\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{k_B T}\right)} = p_0 n_0 e^{\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{k_B T}\right)} \quad (2.24)$$

de aquí se puede obtener

$$E_{Fn} - E_{Fp} = k_B T \ln \left( \frac{pn}{n_i^2} \right) \quad (2.25 - a)$$

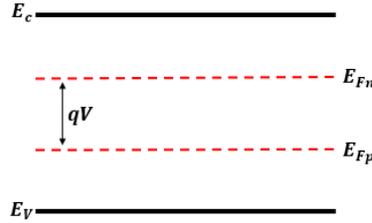
$$E_{Fn} - E_{Fp} = k_B T \ln \left( \frac{pn}{p_0 n_0} \right) \quad (2.25 - b)$$

La diferencia entre las cuasi-energías de Fermi representa una medida de conversión de la energía solar a energía eléctrica. La corriente originada debido al efecto fotovoltaico se establece entonces como función del cambio de las cuasi-energías de Fermi. A partir de las ecuaciones (1.27) y (1.28) y del hecho que  $\mathbf{E} = \frac{\nabla E}{q}$ , la densidad de corriente dependiente de las cuasi-energías de Fermi para electrones y huecos se expresa como

$$\mathbf{J}_n = n \mu_n \nabla E_{Fn} \quad (2.26 - a)$$

$$\mathbf{J}_p = p \mu_p \nabla E_{Fp} \quad (2.26 - b)$$

de aquí, se observa que si  $E_{Fn} = E_{Fp}$  y además constante, entonces no existe corriente y el factor de Boltzmann de la ecuación (2.24) se vuelve uno, regresando a la situación de equilibrio.



**Figura 2.5.** Cuasi-energías de Fermi  $E_{Fn}$  y  $E_{Fp}$  en el estado fuera de equilibrio. La diferencia de las cuasi-energías es el incremento de energía debido a la diferencia de potencial en el sistema.

## 2.4 Mecanismos de Transporte de Portadores

La transferencia de carga en semiconductores se basa en el estudio sistemático de la ley de conservación de la carga y energía en situaciones fuera de equilibrio, denominado fenómenos de transporte. En materiales semiconductores es de interés el transporte de carga, aunque en general el estudio de transporte se generaliza para todas las leyes de conservación.

### 2.4.1 Ecuación de Continuidad y Ecuación de Poisson

Los fenómenos que generan y consumen carga (generación y recombinación que se explicaran en la sección 2.5) no están exentos del cumplimiento de leyes de conservación: existe una continuidad espacial y temporal de la concentración de portadores, donde la variación temporal de las densidades de los portadores es

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial n}{\partial t}\Big|_{\text{deriva}} + \frac{\partial n}{\partial t}\Big|_{\text{difusión}} + \frac{\partial n}{\partial t}\Big|_R + \frac{\partial n}{\partial t}\Big|_G \quad (2.27 - a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t}\Big|_{\text{deriva}} + \frac{\partial p}{\partial t}\Big|_{\text{difusión}} + \frac{\partial p}{\partial t}\Big|_R + \frac{\partial p}{\partial t}\Big|_G \quad (2.27 - b)$$

donde la parte derecha corresponde a las causas: deriva, difusión, recombinación y generación de portadores [26, 31]. Los dos primeros términos corresponden a la corriente total y los dos

últimos términos a la aniquilación y generación de portadores, que también se pueden escribir simplemente como  $R$  y  $G$  y al combinarlas con la ecuación general de continuidad (1.20) se obtiene

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J}_n + G_n - R_n \quad (2.28 - a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J}_p + G_p - R_p \quad (2.28 - b)$$

Las relaciones (2.28) corresponden a la continuidad de electrones y huecos respectivamente. Estas ecuaciones se denominan ecuaciones de continuidad de carga fundamentales.

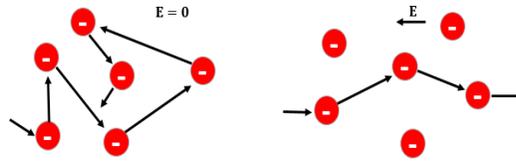
Por otro lado, la relación entre el agente externo y la densidad de carga en un material es altamente relevante. En el caso de semiconductores, el agente externo es el campo eléctrico y la densidad de carga está dada por (2.15). Estas se relacionan por medio de la ecuación de Poisson, que en semiconductores es

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{q}{\varepsilon} (p + N_d^+ - n - N_a^-) \quad (2.29)$$

#### 2.4.2 Deriva

El movimiento de carga debido a un campo eléctrico se realiza siguiendo la dirección del campo; sin embargo la transferencia de carga no sigue un camino perfectamente lineal si no que presenta un camino irregular debido a fenómenos de scattering en el material. La figura 2.6 muestra el movimiento de carga en ausencia y presencia de un campo eléctrico. La dinámica de las partículas en ausencia de una fuerza externa tiene una explicación térmica-estadística: en equilibrio, a cualquier temperatura arriba del cero absoluto, las partículas poseen una energía cinética  $E_c = \frac{3}{2} k_B T$  consecuencia del teorema de equipartición. Al igualar con la energía cinética clásica, se obtiene la velocidad térmica de las partículas:

$$v_T = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}} \quad (2.30)$$

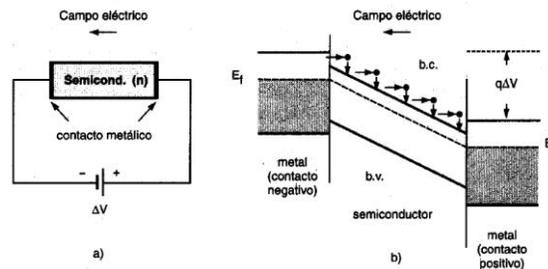


**Figura 2.6.** Esquema del movimiento de portadores de carga en a) ausencia de campo eléctrico y b) en presencia de campo eléctrico. El campo eléctrico de la ley de Ohm establece la dirección de la densidad de corriente, por tanto cuando  $\mathbf{E} = \mathbf{0}$  la dirección es completamente azarosa.

El valor de la ecuación (1.26) se establece como un valor medio y se sustituye en (1.27). La ecuación de densidad de corriente entonces es la ley de Ohm, con la diferencia que el término velocidad corresponde a un valor medio macroscópico. Reescribiendo, la densidad de corriente de deriva es

$$\mathbf{J}_{deriva} = q(\mu_n n + \mu_p p)\mathbf{E} \quad (1.27)$$

La figura 2.7 muestra la representación de la ecuación (1.27) en el diagrama de bandas. El campo eléctrico en el semiconductor produce un desnivel en las bandas de valencia y conducción, lo que propicia un movimiento de electrones y huecos en sus respectivas bandas.



**Figura 2.7.** Esquema del movimiento de portadores en un semiconductor. a) La diferencia de potencial en los extremos da lugar a un desnivel de las bandas de energía. b) Movimiento de electrones en la banda de conducción por la acción de la caída de potencial [16].

Se ha establecido que la corriente de deriva depende del campo eléctrico, densidad de portadores y de un parámetro denominado movilidad. Esta última es una propiedad importante y depende de fenómenos de scattering [21, 25, 39]. Cualquier mecanismo que disturbe la periodicidad de la red del cristal produce scattering y los mecanismos más comunes

son debido a fonones, impurezas ionizadas, colisión portador-portador y efectos superficiales [36, 39, 40, 41, 42]. A partir de estos se han elaborado modelos diversos que describen la movilidad de portadores. Los modelos para cada tipo de interacción son fenomenológicos. La regla de Matthiessen establece que [36]

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_{fonones}} + \frac{1}{\mu_{impurezas}} \quad (2.31)$$

El parámetro  $\mu$  que se definió en la sección 1.5.2 se puede escribir también como

$$\mu = \frac{q\tau_s}{m^*} = \frac{q\lambda}{\sqrt{3kTm^*}} \quad (2.32)$$

donde  $\lambda$  representa el camino medio de los portadores de carga.

### 2.4.3 Difusión

Siempre que exista un gradiente en la concentración de portadores habrá un proceso de difusión en el cual las partículas de las regiones de mayor concentración se transferirán a las regiones de menor concentración, indicando esto con un signo negativo, sin embargo la corriente conducida será en dirección contraria debido al signo de la carga de los portadores [16]. La propiedad más relevante de este mecanismo de transporte es que produce corriente aun cuando los agentes externos son nulas. El flujo de portadores está gobernado por la ley de Fick que para electrones y huecos es

$$\mathbf{J}_n = qD_n \nabla n \quad (2.33 - a)$$

$$\mathbf{J}_p = -qD_p \nabla p \quad (2.33 - b)$$

donde  $D_n$  y  $D_p$  son los coeficientes de difusión que dependen directamente de la temperatura del medio. El coeficiente de difusión y la movilidad se relacionan por medio de las relaciones de Einstein [15, 16, 19, 22, 24, 31, 38].

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{k_B T}{q} \quad (2.34 - a)$$

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_B T}{q} \quad (2.34 - b)$$

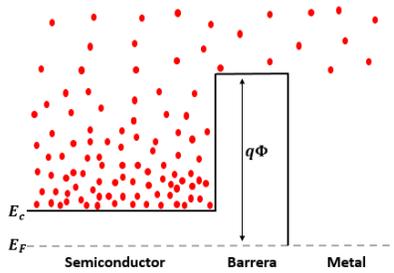
donde el término del lado derecho corresponde al voltaje debido a la temperatura.

### 2.4.4 Emisión Termoiónica

La morfología de los diagramas de bandas es un factor limitante en el transporte de portadores. La transferencia de portadores por encima de una barrera de potencial se denomina emisión termoiónica, y solo depende de la energía térmica de las partículas y de la altura de la barrera de potencial. La figura 2.8 muestra el diagrama de bandas de un proceso típico de emisión termoiónica. La existencia de la barrera precisa que la corriente de deriva y difusión dentro de la barrera sea despreciable [26]. Los portadores con mayor energía térmica que logran pasar la barrera de potencial conforman la corriente termoiónica, definida como

$$J = A^* T^2 e^{\left(\frac{-q\varphi_B}{k_B T}\right)} \quad (2.35)$$

donde  $\varphi_B$  es altura de la barrera de potencial y  $A^*$  es la constante efectiva de Richardson definida como  $A^* = \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3}$  [24, 36].



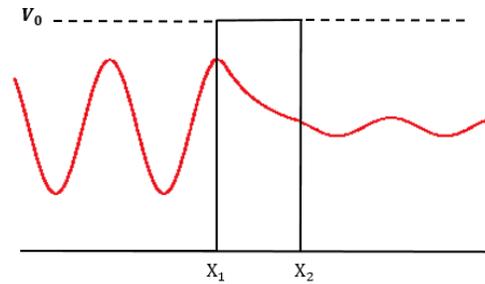
**Figura 2.8.** Proceso de emisión termoiónica para una configuración de diagrama de banda.

### 2.4.5 Efecto Túnel

El efecto túnel o tunelamiento cuántico es el proceso por el cual una partícula de tamaño subatómico penetra una barrera de potencial que en el caso clásico no puede traspasar, pero la función de onda da lugar a una probabilidad finita de traspasar la barrera de potencial [3, 15, 16, 20, 21, 36, 43]. La figura 2.9 muestra el diagrama de bandas y el efecto túnel en una barrera de potencial. La teoría general del tunelamiento cuántico requiere la solución de la ecuación de Schrödinger, que aporta información acerca de la probabilidad de transmisión, que a su vez determina la corriente de tunelamiento:

$$J_t = \frac{qm^*}{2\pi^2 \hbar^3} \int F_I N_I T_t (1 - F_{II}) N_{II} dE \quad (2.36)$$

donde  $F_I$ ,  $F_{II}$ ,  $N_I$ ,  $N_{II}$  son las distribuciones Fermi-Dirac y las densidades de estados de las regiones  $I$  y  $II$ . [36] ofrece una descripción más detallada de esta ecuación.



**Figura 2.9.** Comportamiento de la función de onda de un electrón en presencia de una barrera de potencial y el efecto túnel. La barrera de potencial modifica los parámetros de la onda.

## 2.5 Fenómenos de Creación y Aniquilación de Carga

Cuando un material se encuentra en la situación fuera de equilibrio, la ecuación (2.13) no se cumple, y la igualdad se sustituye por una desigualdad. Debido a la tendencia de los sistemas de recuperar el estado de equilibrio, existen procesos que hacen que, después de un tiempo, el sistema cumpla la ley de acción de masas. Estos procesos son la recombinación cuando  $pn > n_i^2$  y la generación cuando  $pn < n_i^2$  [36]. La recombinación y la generación son mecanismos de transporte al igual que los vistos en la sección 2.4, sin embargo se abordan de manera separada debido a que estos aniquilan y generan portadores de carga.

### 2.5.1 Recombinación

La recombinación es un proceso en el cual electrones y huecos se aniquilan entre sí [14, 15, 16, 22]. Existen diversos tipos de recombinación y se clasifican según el proceso o energía liberada. Lo que determina el tipo de recombinación es el tipo de band. Algunos tipos de recombinación son radiativo, no radiativo, auger, recombinación banda a banda y recombinación de trampa. Para el presente trabajo se utilizó la recombinación de trampa ya que es la más usual en Si.

La recombinación de trampa ocurre cuando un electrón de la banda de conducción cae a una trampa dentro del band gap. Las trampas son impurezas de fabricación, puntos de defectos inherentes de los materiales o átomos ionizados en el semiconductor [24, 29, 31]. Una vez que el electrón se liga a una trampa, este cae a un hueco de la banda de valencia, completando así el proceso de recombinación. Es un proceso de dos pasos e involucra la presencia de una impureza de material, razón por la cual se asume que la mayoría de materiales semiconductores de band gap indirecto para celdas solares lo poseen, es un proceso no radiativo, por lo que emite energía en forma de fonones y generalmente las trampas en el band gap son superficiales. También se conoce como proceso de recombinación de Shockley-Read-Hall (SRH). La tasa de transición neta está dada por [21, 22, 38, 39]:

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + p_i)} \quad (2.37)$$

donde  $n_i$  y  $p_i$  son parámetros relacionados con los niveles de energía de las trampas localizadas en la mitad del band gap. COMSOL Multiphysics toma en cuenta esta razón y en consecuencia maneja por default la ecuación (2.37) para la solución de problemas de física de semiconductores, razón por la cual se utilizara más adelante; no obstante, existen diferentes representaciones de  $R_{SRH}$  que se pueden encontrar en la bibliografía [5, 10, 14, 19, 24, 25, 31, 36, 38, 39].

### 2.5.2 Propiedades Ópticas y Generación

En celdas solares el exceso de portadores de carga es consecuencia de la excitación óptica, es por ello que es importante establecer la relación entre las propiedades ópticas de semiconductores y la capacidad de generación de carga. Se ha mencionado que gran parte de la información de un sólido la proporciona su band gap, análogamente gran parte de la información de las propiedades ópticas de los materiales la proporciona el índice de refracción complejo definido como

$$\bar{n} = n - ik \quad (2.38)$$

donde la parte real  $n$  determina la velocidad de propagación en el medio y la parte imaginaria  $k$  determina la capacidad de absorción. Estos coeficientes se conocen como constantes ópticas, aunque en realidad esto no es cierto ya que dependen de la energía de los fotones incidentes y

en consecuencia de sus longitudes de onda. La parte imaginaria  $k$  también conocida como coeficiente de extinción se relaciona con el coeficiente de absorción según [25, 26, 36]

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (2.39)$$

ésta ecuación describe cuanta energía incidente puede ser absorbida por el material, que se observa depende del cociente entre el coeficiente de extinción y la longitud de onda. Luego, la absorción óptica se relaciona con la energía de radiación que transporta el vector de Poynting, que en una dimensión esta relación es

$$S(x) = S(0)e^{-\alpha x} \quad (2.40)$$

conocida como Ley de Beer-Lambert en su forma de propagación electromagnética. Cuando la luz pasa a través de un semiconductor la absorción de luz y la generación de portadores de carga debido a la excitación óptica ocurre; lo esencial de este proceso físico es que el vector de Poynting (o sus derivaciones eléctricas o energéticas) decae conforme se avanza en el material dando lugar a un incremento de carga, de acuerdo a [36]

$$G = -\frac{\alpha}{\hbar\omega} S(x) = \frac{1}{\hbar\omega} \frac{dS(x)}{dx} = \alpha J_{ph} \quad (2.41)$$

donde  $J_{ph}$  es la foto-corriente en el semiconductor. La solución de esta ecuación diferencial es la ecuación (2.40). Es posible obtener los coeficientes de Fresnel (sección 1.5.4) a partir de esta ecuación. Luego, la generación de carga total de una celda solar se obtiene a partir de la ecuación anterior e integrando desde el espectro de longitud de onda del material, esto es

$$G = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} S(x, \lambda) \alpha(\lambda) e^{-\alpha x} d\lambda \quad (2.42)$$

Para estudios monocromáticos la diferencia en los límites de esta integral es mínima, y se requiere de la introducción de una delta de Dirac. La relación entre la generación y el efecto fotovoltaico se discute en el capítulo 3.

### 2.5.3 Inyección de Portadores

Los procesos de generación de portadores aumentan los valores de  $n$  y  $p$  con respecto a los valores en equilibrio. En el caso de celdas solares el termino generación es debido a la excitación óptica. También se crea exceso de portadores sobre el valor de equilibrio cuando se ponen en contacto semiconductores tipo  $p$  y  $n$ . Todo proceso que origina un exceso de portadores sobre los valores de equilibrio se denomina procesos de inyección [16]. El exceso de portadores se representa como

$$\Delta n = n - n_0 \quad (2.43 - a)$$

$$\Delta p = p - p_0 \quad (2.43 - b)$$

correspondientes a la generación de electrones y huecos respectivamente. En el proceso de incidencia de luz en celdas solares la tasa de generación de electrones y huecos es idéntica según  $\Delta n = \Delta p$ . Los procesos de inyección son muy comunes en dispositivos semiconductores y pueden ser de dos tipos: de alta inyección o baja inyección. La alta inyección significa que el exceso de portadores modifica profundamente a portadores mayoritarios y minoritarios, y la baja inyección significa que la concentración de portadores mayoritarios prácticamente no se altera mientras que la de portadores minoritarios si se modifica significativamente [17, 21, 25]. La condición de baja inyección es

En tipo  $n$ :

$$\Delta n \ll n_0 \quad \Delta p \gg p_0 \quad (2.44 - a)$$

En tipo  $p$ :

$$\Delta n \gg n_0 \quad \Delta p \ll p_0 \quad (2.44 - b)$$

en el caso de semiconductores para celdas solares, se establece que solo existen procesos de baja inyección.

#### 2.5.3.1 Tiempo de Vida de Portadores Minoritarios

Una vez creados los portadores en exceso y establecido el desequilibrio, el sistema hará lo posible para regresar a la situación de equilibrio, por lo que eventualmente los portadores en exceso se aniquilarán. El tiempo que tardan los portadores minoritarios en exceso en aniquilarse se denomina tiempo de vida  $\tau_{n,p}$ ; es un valor medio de todo el colectivo de

partículas, por lo que no todas las partículas desaparecen con la misma velocidad, pero el tiempo de vida medio es el valor más representativo del sistema [16]. En un proceso de recombinación-generación la tasa de transición neta es

$$\left. \frac{\partial n}{\partial t} \right|_{R-G} = -\frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (2.45 - a)$$

$$\left. \frac{\partial p}{\partial t} \right|_{R-G} = -\frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (2.45 - b)$$

Los valores de los tiempos de vida varían bastante según el material, tipo de semiconductor, nivel de dopaje y tipo de scattering. Al sustituir (2.43) en (2.45) y al resolver la ecuación diferencial para electrones se obtiene

$$\Delta n = \Delta n_0 e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (2.46)$$

donde  $\Delta n_0$  es el exceso de portadores en el instante  $t = 0$ . La solución para huecos es idéntica a (2.46).

#### 2.5.4 Longitud de Difusión de Portadores Minoritarios

Al igual que el cambio en el tiempo los portadores minoritarios cambian de posición en el espacio. La magnitud que establece el camino medio que recorre una partícula antes de aniquilarse se denomina longitud de difusión media y se define como [15, 16, 22, 24]

$$L_{n,p} = \sqrt{D_{n,p} \tau_{n,p}} \quad (2.47)$$

Luego, siguiendo el mismo procedimiento que el realizado en el tiempo de vida de portadores minoritarios la ecuación de decaimiento de portadores con respecto a la posición es

$$\Delta n = \Delta n_0 e^{-\frac{x}{L_{n,p}}} \quad (2.48)$$

donde  $\Delta n_0$  es el exceso de portadores en la posición  $x = 0$ , y se observa que esta ecuación es de la misma forma que (2.46). La solución para huecos es idéntica a (2.48).

## 2.6 Modelo Deriva-Difusión

En resumen la deriva, difusión, emisión termoiónica, tunelamiento, recombinación y generación son los mecanismo de transporte en semiconductores; empero, no todos ocurren con igual frecuencia ni aportan cantidades equitativas de corriente, e inclusive algunos mecanismos delimitan su uso a unos cuantos dispositivos [39] por tanto un modelo de transporte es útil para describir la conducción en semiconductores de manera práctica y precisa.

De los mecanismos de transporte, la emisión termoiónica y el tunelamiento son secundarios, por lo que pueden omitirse en la mayoría de los casos. La ecuación que describe la conducción es la suma de los mecanismos de deriva (1.27) y difusión (2.33):

$$\mathbf{J}_n = q\mu_n n\mathbf{E} + qD_n \nabla n \quad (2.49 - a)$$

$$\mathbf{J}_p = q\mu_p p\mathbf{E} - qD_p \nabla p \quad (2.49 - b)$$

denominado modelo deriva difusión. La corriente total en un semiconductor es

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_n + \mathbf{J}_p \quad (2.50)$$

El modelo, que representa la corriente total simplificada, requiere además las siguientes suposiciones: ionización total, semiconductor no-degenerado, estado estacionario y temperatura constante.

Ahora, con el modelo deriva-difusión se obtienen las ecuaciones de continuidad para estas corrientes. Sustituyendo (2.49) en (2.28) tiene:

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = G_n - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} + n_p \mu_n \frac{\partial E}{\partial x} + \mu_n E \frac{\partial n_p}{\partial x} + D_n \frac{\partial^2 n_p}{\partial x^2} \quad (2.51 - a)$$

$$\frac{\partial p_n}{\partial t} = G_p - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} - p_n \mu_p \frac{\partial E}{\partial x} - \mu_p E \frac{\partial p_n}{\partial x} + D_p \frac{\partial^2 p_n}{\partial x^2} \quad (2.51 - b)$$

Estas ecuaciones resumen el principio de continuidad de la carga, la primera ley de Fick, la ley de Gauss y la ley de Ohm dependientes del tiempo, por esto son las principales herramientas para la solución de problemas en semiconductores [36]. Los subíndices para las concentraciones indican en qué tipo de semiconductor se encuentra. Está claro que, para el caso no dependiente del tiempo:  $\frac{\partial n_p}{\partial x} = \frac{\partial p_n}{\partial x} = 0$ .

## **CAPÍTULO 3. UNIÓN PN Y CELDA SOLAR**

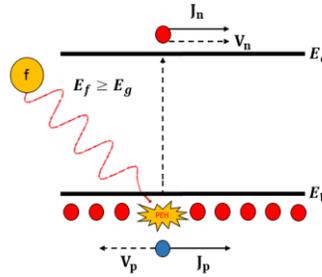
Los semiconductores se vuelven útiles de manera superlativa cuando se encuentran en contacto con cualesquier material de la clasificación eléctrica, formando las uniones metal-semiconductor (MS), semiconductor-semiconductor (PN) y aislante-semiconductor. Para la física de celdas solares estas uniones son de importancia primera, en especial la unión PN. En este capítulo se desarrolla la teoría concerniente a uniones y celdas solares, con énfasis en la teoría de unión PN desarrollada por Shockley (1949) [15, 22, 39].

### **3.1 Efecto Fotovoltaico**

En dispositivos fotovoltaicos la entrega de energía es consecuencia de la conversión luz a electricidad por medio de un fenómeno denominado efecto fotovoltaico. Descubierta por Becquerel en 1839, en un principio se le veía un futuro exclusivo en actividades aeroespaciales [39].

La luz presenta propiedades de radiación electromagnética y partícula. La energía que se transfiere por medio de radiación la transporta el vector de Poynting y la transferencia como partícula es a través de fotones. Un fotón posee una energía que al incidir en un material semiconductor colisiona con los electrones de la banda de valencia, surgiendo de aquí tres casos: si la energía del fotón es mayor que el band gap, entonces el electrón impactado de la banda de valencia salta a la banda de conducción; si el fotón posee energía menor al band gap, el electrón impactado permanece en la banda de valencia, y la energía de la colisión se transmite en la red cristalina en forma de calor mediante un proceso llamado termalización [26]; y si el fotón posee mucha mayor energía que el band gap, el electrón impactado de la banda de valencia salta a la banda de conducción, y el resto de la energía es liberada en la red cristalina en forma de calor.

La acción por la cual un fotón impacta a un electrón de la banda de valencia, rompe el enlace y libera el electrón a la banda de conducción se llama efecto fotovoltaico, provoca la creación del par electrón-hueco (PEH) como se muestra en la figura 3.1 y es la causa de la diferencia de potencial y corriente eléctrica (fotocorriente) en celdas solares.



**Figura 3.1.** Representación del efecto fotovoltaico por medio del diagrama de bandas de energía. Solo energías de los fotones mayores al band gap provocan un salto de electrones de la banda de valencia a la banda de conducción.

### 3.2 Unión PN

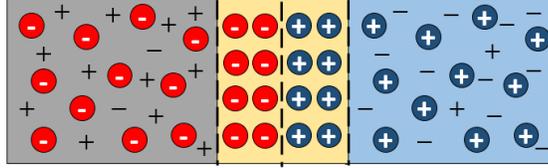
Una unión PN es la unión o juntura de un semiconductor tipo p y un semiconductor tipo n donde exactamente en la región de contacto se crea una zona denominada de depleción, de agotamiento, de transición o de carga espacial la cual es la causa de las propiedades físicas que hacen tan especial esta unión. Es común que los ingenieros electrónicos llamen a esta unión diodo semiconductor o simplemente diodo.

#### 3.2.1 Zona de Depleción

La figura 3.2 muestra la unión de los semiconductores tipo p y n. La enorme diferencia de portadores mayoritarios y minoritarios de p y n provoca una corriente de difusión al instante de contacto, denominada corriente transitoria [18], su tiempo de vida es corto y su magnitud es despreciable. Los portadores mayoritarios en n (electrones) se difunden hacia p y los portadores mayoritarios en p (huecos) se difunden hacia n, en donde pasan de estar en una región donde son mayoritarios a una región donde son minoritarios, causando así recombinación de portadores. El resultado de las corrientes de transición y la recombinación en las zonas próximas a la interface es una zona empobrecida de portadores libres, conocida como zona de depleción.

La recombinación cerca de la interface establece iones positivos en la parte n de la zona de depleción y iones negativos en la parte p. La diferencia de carga entre aniones y cationes crea una diferencia de potencial denominada potencial de contacto, y, según la ecuación (1.22), también existe un campo eléctrico de contacto [19, 21, 31, 38, 39]. La corriente transitoria

existe hasta que la corriente debido al campo eléctrico de contacto la anula y es entonces cuando se llega al estado de equilibrio. Las regiones fuera de la zona de depleción en la unión PN se denominan regiones cuasi-neutrales debido a que la neutralidad de carga es conservada.



**Figura 3.2.** Unión PN. La juntura de dos semiconductores de signo contrario crea una zona carente de carga móvil.

La figura 3.3 es una representación de la zona de depleción. El cambio de pendiente en el diagrama de bandas es debido al campo eléctrico de contacto, en virtud de  $\mathbf{E} = \frac{\nabla E}{q}$ , que por lo general es un cambio gradual y suave [24, 26]; empero, realizar cálculos bajo esta representación resulta realmente complejo, por ello es conveniente suponer que la densidad de carga está totalmente determinada por los iones de la zona de depleción ( $N_d$  en n y  $N_a$  en p) y que además la concentración cambia de manera abrupta de las zonas cuasi-neutrales a la región de agotamiento. Estas suposiciones constituyen la aproximación de depleción. La figura 3.4 muestra la aproximación de depleción. La densidad de carga en la zona de depleción es la suma de  $\rho_n$  y  $\rho_p$  definidas como

$$\rho_n = qN_d \quad (3.1 - a)$$

$$\rho_p = -qN_a \quad (3.1 - b)$$

donde la (3.1-a) vale para el dominio  $0 \leq x \leq W_n$  y (3.1-b) vale para  $-W_p \leq x \leq 0$ . El campo eléctrico de contacto en la zona de depleción se obtiene integrando la ecuación de Poisson (2.29) y suponiendo que el único aporte la densidad de portadores es debido a  $\rho_n$  y  $\rho_p$ :

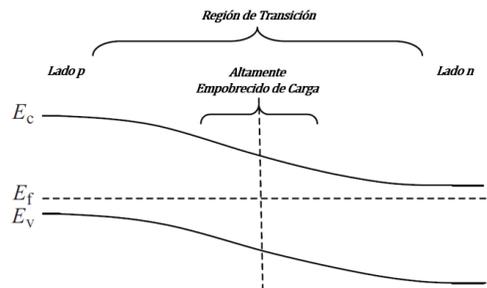
$$\mathbf{E} = -\frac{q}{\epsilon_s} N_d (W_n - \mathbf{x}) \quad (3.2 - a)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{q}{\epsilon_s} N_a (W_p + \mathbf{x}) \quad (3.2 - b)$$

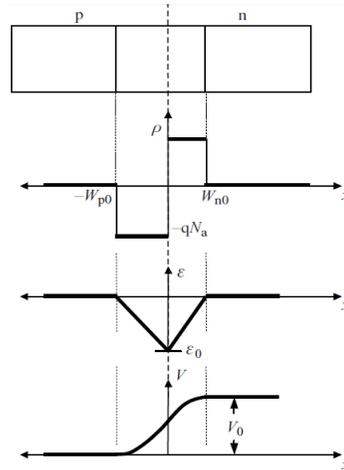
donde los dominios están dentro del mismo rango que las ecuaciones de densidad de carga. En  $x = 0$  el campo eléctrico es continuo y se requiere que se satisfaga la condición [39]:

$$N_a W_p = N_d W_n \quad (3.3)$$

En las regiones cuasi-neutrales el material es eléctricamente neutro, entonces el campo eléctrico es cero. La figura 3.4-c muestra el perfil del campo eléctrico de contacto en la unión PN.



**Figura 3.3.** Zona de depleción real cerca de la región de juntura [24].

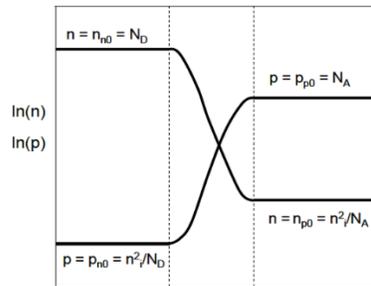


**Figura 3.4.** Unión PN bajo la aproximación de depleción. a) Esquema unión PN. b) Densidad de carga espacial. c) Campo eléctrico. d) Potencial eléctrico [19].

### 3.2.2 Unión PN en Equilibrio

En equilibrio la concentración de portadores en las regiones cuasi-neutrales es igual a la concentración en semiconductores tipo p y n. La figura 3.5 muestra esta situación,

destacándose que en la zona de depleción la concentración de portadores mayoritarios decae rápidamente.



**Figura 3.5.** Perfil de concentración de carga móvil en unión PN en equilibrio. El lado izquierdo corresponde a n y el derecho a p [26].

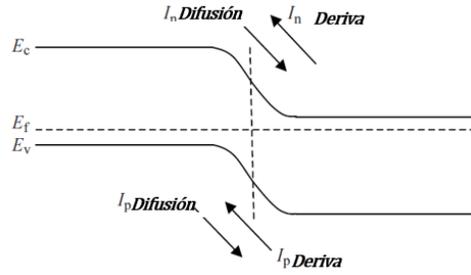
En la unión PN el modelo utilizado para describir el flujo de portadores de carga es el modelo deriva-difusión discutido anteriormente. Las ecuaciones de este modelo indican que existen cuatro tipos de corrientes dominantes: deriva de electrones y huecos y difusión de electrones y huecos.

Las dos primeras corrientes son un flujo de portadores de un lugar donde son minoritarios hacia un lugar donde son mayoritarios (electrones en p hacia n y huecos en n hacia p). De manera opuesta, las corrientes de difusión son un flujo de portadores de un lugar donde son mayoritarios hacia un lugar donde son minoritarios (electrones en n hacia p y huecos en p hacia n). En equilibrio se cumple:

$$J_{n\text{deriva}} + J_{n\text{difusión}} = 0 \quad (3.4 - a)$$

$$J_{p\text{deriva}} + J_{p\text{difusión}} = 0 \quad (3.4 - b)$$

También se muestra una propiedad interesante en la unión PN en equilibrio: el nivel de Fermi permanece constante. En las regiones cuasi-neutrales la diferencia entre el nivel de Fermi y la banda respectiva es idéntica a la situación donde los semiconductores tipo p y n no están en contacto. En la zona de depleción la concentración es constante por tanto la energía de Fermi sigue siendo constante y es la causa del doblamiento de bandas.



**Figura 3.6.** Corrientes en una unión PN. Las corrientes de deriva y difusión poseen direcciones contrarias [24].

### 3.2.2.1 Potencial de Contacto

La diferencia entre la banda de conducción del lado p y del lado n es la diferencia de energías entre los dos semiconductores (es igual a la diferencia de la banda de valencia p y n), definida como

$$E_0 = qV_0 \quad (3.5)$$

donde  $V_0$  es el potencial de contacto. Es un parámetro importante para el estudio de uniones y celdas solares porque establece el potencial a ser modificado para el paso de corriente [24, 36]. Para encontrar  $V_0$  se debe hallar primero  $E_0$  según (3.5). Una forma es obtener la diferencia entre la densidad de huecos en la banda de conducción en p y n que se obtienen a partir de la ecuación (2.10), que resulta en

$$(E_v)_p - (E_v)_n = k_B T \ln \left( \frac{p_p}{p_n} \right) \quad (3.6)$$

donde los subíndices n y p indican el tipo de semiconductor donde se halla dicho valor. Luego, a partir de esta ecuación junto con (2.13) y (2.19) se obtiene el potencial de contacto, también llamado potencial de difusión:

$$V_0 = \frac{k_B T}{q} \ln \left( \frac{N_a N_d}{n_i^2} \right) \quad (3.7)$$

Esta ecuación indica que el potencial es un voltaje térmico que depende del dopaje, con el cual es posible obtener parámetros importantes como el ancho, la capacitancia y el campo eléctrico de contacto máximo de la zona de depleción [39]:

$$W_d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{q} \left( \frac{1}{N_a} + \frac{1}{N_d} \right) V_0} \quad (3.8)$$

$$|E_{max}| = \frac{qN_dW_n}{\varepsilon_s} = \frac{qN_aW_p}{\varepsilon_s} \quad (3.9)$$

$$C_d = \frac{\varepsilon_s}{W_d} \quad (3.10)$$

Las referencias [15, 16, 19, 22, 25, 36, 39] ofrecen un análisis más detallado para hallar estos y otros valores.

### 3.2.3 Unión PN Polarizada

Al igual que los semiconductores solo son útiles cuando forman uniones, habría que añadir que las uniones solo tienen utilidad cuando están polarizadas: diodo polarizado en directa y en inversa. Para facilitar los cálculos, y seguir un modelo ya establecido, se seguirá el modelo del diodo ideal: 1) zona de deplexión abrupta, 2) aproximación de Boltzmann para portadores, 3) procesos de baja inyección, y, 4) corriente constante dentro de la zona de deplexión [36]. La densidad de portadores y de corriente depende de las cuasi-energías de Fermi, tanto en polarización directa como en inversa

#### 3.2.3.1 Polarización Directa

La polarización directa es la situación donde se aplica un potencial positivo al material tipo p y un potencial negativo al material tipo n, y en consecuencia el potencial de la zona de deplexión se ve reducido como

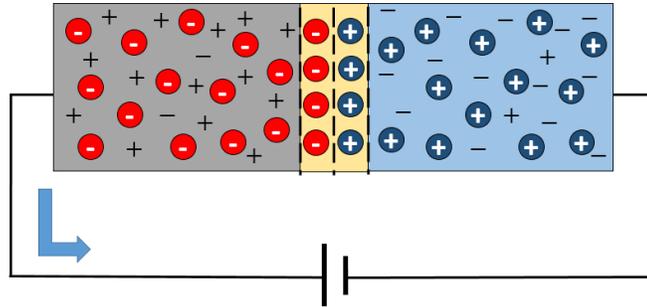
$$V = V_0 - V_a \quad (3.11)$$

donde  $V$  es el potencial modificado en la zona de deplexión y  $V_a$  es el potencial aplicado. Esta reducción del potencial en la zona de deplexión provoca que aumente el paso de portadores de una región a otra, haciendo que la unión se comporte como un interruptor cerrado. También es posible visualizar que el potencial positivo repele a los huecos de p y los acelera hacia n y el potencial negativo repele los electrones de n y los acelera hacia p.

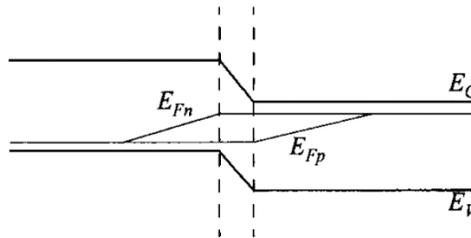
La figura 3.7 muestra el perfil del potencial de la zona de deplexión en polarización directa. El campo eléctrico de la región de carga espacial es menos capaz de contrarrestar el flujo de

portadores debido a que la barrera de potencial disminuyo. A mayor potencial aplicado, menor será el grosor de la zona de depleción. La figura 3.8 muestra la diferencia de las cuasi-energías de Fermi de la unión en polarización directa:

$$qV = E_{Fn} - E_{Fp} \quad (3.12)$$



*Figura 3.7. Unión PN en polarización directa. La barrera de potencial se reduce provocando que el diodo se comporte como un interruptor cerrado.*

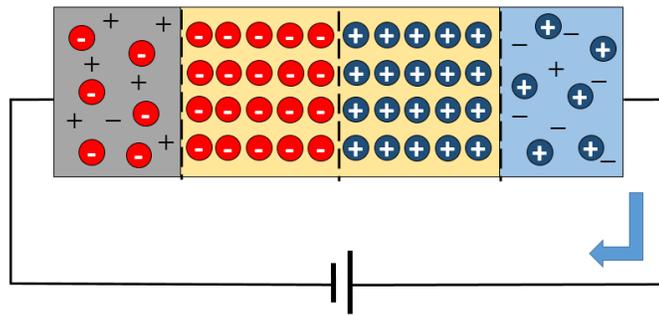


*Figura 3.8. Cuasi-energías de Fermi en polarización directa [36].*

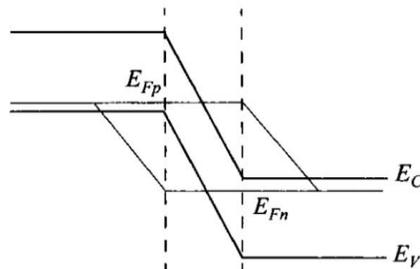
### 3.2.3.2 Polarización Inversa

La polarización inversa es la situación donde se aplica un potencial negativo al material tipo p y un potencial positivo al material tipo n, entonces el potencial aplicado es negativo y por tanto la operación de la ecuación (3.11) se vuelve aditiva. Esto produce un aumento de la zona de depleción y en consecuencia disminuye el paso de portadores de una región a otra haciendo que la unión se comporte como un interruptor abierto. También es posible visualizar que el potencial negativo atrae a los huecos de p y los acelera hacia afuera de la unión por el circuito externo y el potencial positivo atrae a los electrones de n y los acelera hacia afuera de la unión.

La figura 3.9 muestra el perfil del potencial de la zona de depleción en polarización inversa. El campo eléctrico de la región de carga espacial tiene ahora mayor capacidad de contrarrestar el flujo de portadores debido a que la barrera de potencial creció. A mayor potencial aplicado, mayor será el grosor de la zona de depleción. La figura 3.10 muestra la diferencia de las cuasi-energías de Fermi de la unión en polarización inversa.



**Figura 3.9.** Unión PN en polarización inversa. La barrera de potencial se ensancha provocando que el diodo se comporte como un interruptor abierto.

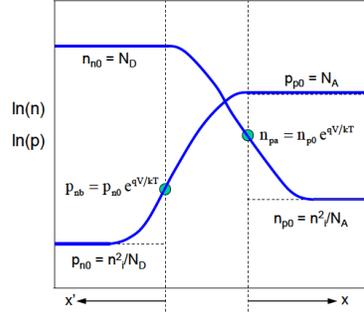


**Figura 3.10.** Cuasi-energías de Fermi en polarización inversa [36].

### 3.2.3.3 Ecuación de Shockley

En celdas solares, el interés se centra en polarización directa, por tanto se obtendrá la corriente del diodo bajo este caso.

Bajo polarización directa, la barrera de potencial se ve disminuida según la ecuación (3.11) y la concentración de portadores minoritarios sigue el perfil mostrado en la figura 3.11. Por conveniencia, se fijan dos sistemas de referencia: donde termina la zona de depleción en p y donde termina en n.



**Figura 3.11.** Perfil de concentración de carga móvil en unión PN en polarización directa. El lado izquierdo corresponde a n y el derecho a p [26].

En el origen de los dos sistemas de referencia, las concentraciones de portadores minoritarios en n y p son

$$n_p|_{x=0} = n_{p0} e^{\frac{qV}{k_B T}} \quad (3.13 - a)$$

$$p_n|_{x'=0} = p_{n0} e^{\frac{qV}{k_B T}} \quad (3.13 - b)$$

El cambio de estas concentraciones depende de los mecanismos de transporte en la unión. Usando el modelo deriva-difusión (2.49), las ecuaciones de continuidad en semiconductores (2.51), el hecho de que en las regiones cuasi-neutrales el campo eléctrico es despreciable y que la generación es igual a cero, se obtiene

$$\frac{d^2 \Delta n}{dx^2} - \frac{\Delta n}{D_n \tau_n} = 0 \quad (3.14 - a)$$

$$\frac{d^2 \Delta p}{dx'^2} - \frac{\Delta p}{D_p \tau_p} = 0 \quad (3.14 - b)$$

donde es preferible utilizar el cambio de concentración en vez de la concentración misma. La solución de la ecuación (3.14) es

$$n_p = n_{p0} + A e^{\frac{x}{L_n}} + B e^{-\frac{x}{L_n}}$$

La primera condición de frontera es la ecuación (3.13) y la segunda establece que en una distancia infinita la concentración es igual a una cantidad constante, esto es  $n_p|_{x=\infty} = n_{p0}$ . A esta condición de frontera también se le conoce como aproximación de regiones cuasi-

neutrales infinitas y es una condición que simplifica aún más la teoría del diodo. Luego la solución de la ecuación (3.14) queda

$$n_p = n_{p0} + n_{p0} \left[ e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right] e^{-\frac{x}{L_n}}$$

Sustituyendo esta ecuación en la ley de Fick y teniendo en cuenta que la medición se realiza en el borde de la zona de depleción ( $x = 0$ ) la densidad de corriente para electrones es

$$J_n = \frac{qD_n n_{p0}}{L_n} \left[ e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right] \quad (3.15 - a)$$

Siguiendo el mismo procedimiento para huecos, la densidad de corriente para huecos es

$$J_p = \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} \left[ e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right] \quad (3.15 - b)$$

por tanto, la corriente total en la unión, de acuerdo con (2.50), es

$$J = \left( \frac{qD_n n_{p0}}{L_n} + \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} \right) \left[ e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right]$$

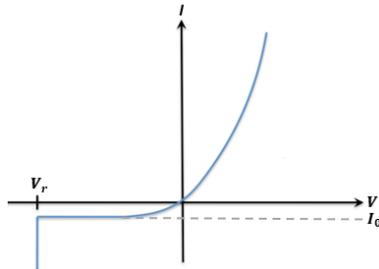
donde las concentraciones en equilibrio pueden ser sustituidas por la ley de acción de masas y el primer factor del lado derecho se agrupó en un término denominado corriente de saturación  $J_0$ . La corriente total en la unión PN es [17, 21, 22, 24]:

$$J = J_0 \left[ e^{\frac{qV}{\eta k_B T}} - 1 \right] \quad (3.16)$$

denominada ecuación de Shockley, ecuación del diodo ideal, o en el argot de los dispositivos fotovoltaicos, ecuación de corriente oscura. El término  $\eta$  usualmente se añade al denominador del factor exponencial de la ecuación, se conoce como factor de idealidad, oscila entre valores adimensionales de 1 y 2 y representa las condiciones de operación y la calidad de los materiales del dispositivo. Para diodos ideales  $\eta$  es igual a la unidad [17, 36].

La figura 3.12 muestra la gráfica de la ecuación (3.16), que también es llamada curva característica IV. En polarización directa la curva crece exponencialmente y en polarización inversa la curva decrece como una función cuasi-constante (corriente de saturación) hasta un límite. Se llama corriente de saturación ya que alcanza el valor umbral con rapidez y permanece casi constante hasta un límite de voltaje inverso en el cual la curva decae

abruptamente. Físicamente este límite significa el rompimiento del diodo debido a que el ancho de la zona de depleción no puede crecer más.



**Figura 3.12.** Curva corriente-voltaje característica del diodo semiconductor correspondiente a la ecuación de Shockley. En el caso ideal el cambio de corriente con respecto al voltaje es brusco en un solo punto, idéntico a un interruptor.

### 3.2.4 Unión PN Iluminada

Cuando una unión PN es iluminada PEH son creados tanto en las regiones cuasi-neutrales como en la zona de depleción. En las regiones cuasi-neutrales p y n la concentración de portadores mayoritarios y minoritarios aumentan en proporciones idénticas, sin embargo solo la concentración de portadores minoritarios presenta un cambio significativo debido a que se asumen procesos de baja inyección [21, 45].

El incremento de portadores minoritarios produce un flujo de estos portadores a través de la zona de depleción a la cual llegan debido a la atracción que sienten por los iones de signo contrario, por su velocidad térmica y por la ley de Fick. En la región de empobrecimiento las cargas libres son aceleradas por el campo eléctrico de contacto hacia las regiones cuasi-neutrales donde son portadores mayoritarios. Este proceso se conoce como separación de carga y es una parte medular en el funcionamiento de una celda solar. Una vez separados electrones y huecos, y recolectados en n y p respectivamente, el exceso de carga puede fluir por un contacto externo (si existe conexión) por el que puede producir trabajo o puede permanecer en la unión.

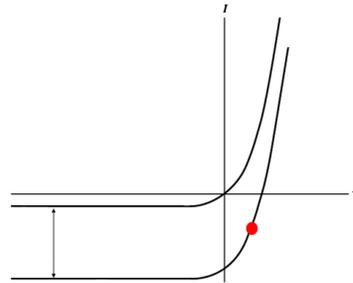
Al flujo de carga originada por el efecto fotovoltaico se le denomina foto-corriente  $J_{ph}$ , descrito en la sección 2.5.2. La curva característica IV de una unión PN bajo iluminación es

$$J = J_0 \left[ e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right] - J_{ph} \quad (3.17)$$

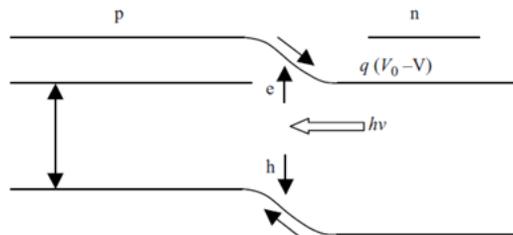
La ecuación (3.17) es llamada ecuación fundamental de celdas solares. Bajo la suposición de generación de PEH uniforme, la foto-corriente se define como

$$J_{ph} = qG(W + L_n + L_p) \quad (3.18)$$

de aquí se observa que la contribución a la foto-corriente viene dada por los términos de la zona de deplexión y las regiones inmediatas a la región de empobrecimiento de largo de la longitud de difusión. Los PEH que se crean fuera de estas regiones no contribuyen a la foto-corriente debido a que en promedio la mayoría de los portadores minoritarios generados se recombinan en presencia de portadores mayoritarios. Por esto, la ecuación (3.18) es utilizada para el diseño del grosor de una celda solar [17, 20]. La figura 3.13 muestra la gráfica de la ecuación (3.17) y la figura 3.14 muestra el diagrama de bandas de la unión PN bajo iluminación.



**Figura 3.13.** Característica IV de celda solar con y sin iluminación. El corrimiento de la curva es debido a la generación óptica de pares electrón-hueco y el punto rojo corresponde al punto de eficiencia óptima.



**Figura 3.14.** Diagrama de bandas mostrando la dirección del flujo de portadores de carga. Los PEH cruzan la zona de deplexión por medio de la deriva [24].

### 3.3 Unión MS

La unión PN no es la única juntura que conforma a una celda solar. La unión metal-semiconductor (MS) aunque con un protagonismo menor en celdas solares, es la unión que está presente en todos los dispositivos electrónicos y optoelectrónicos. En la unión MS idealmente surgen dos casos que se discuten en esta sección: el contacto óhmico y la barrera Schottky.

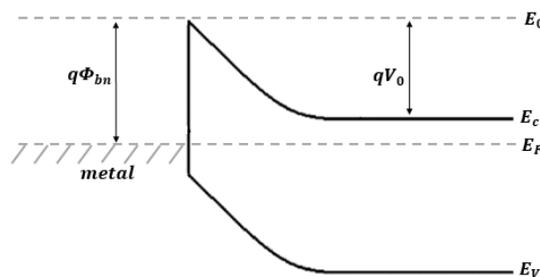
#### 3.3.1 Barrera Schottky

Una barrera Schottky es una barrera de potencial para los portadores de carga, se forma por el contacto de un metal y un semiconductor, y en equilibrio al igual que en la unión PN, las energías de Fermi de los dos materiales en equilibrio se alinean provocando un doblamiento de banda como el de la figura 3.15 que muestra una unión MS producto del contacto de un metal y un semiconductor tipo n. La altura de la barrera de potencial es [36]

$$q\phi_{bn} = q(\phi_m - \chi) \quad (3.19 - a)$$

donde  $\phi_m$  es la función de trabajo del metal y  $\chi$  es la afinidad electrónica del semiconductor. El diagrama de bandas de la unión metal-semiconductor tipo p es similar al de la figura 3.15, con la diferencia de que la imagen esta invertida. Para este caso, la altura de la barrera de potencial es

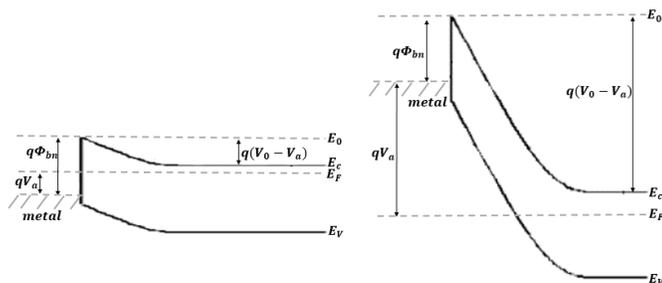
$$q\phi_{bp} = E_g - q(\phi_m - \chi) \quad (3.19 - b)$$



**Figura 3.15.** Diagrama de bandas de energía de unión metal-semiconductor en equilibrio. La altura de la barrera impone la condición de frontera en este tipo de unión.

Al igual que la unión PN la unión MS posee una zona de depleción, sin embargo solo es idéntica a la mitad de la región de empobrecimiento de la unión PN, del lado que sobresale la barrera de potencial. Las ecuaciones de la zona de depleción son similares a (3.1-3.3) y (3.8-3.10).

La figura 3.16 muestra las situaciones de a) polarización directa, y b) polarización inversa, donde en ambas polarizaciones los niveles de Fermi difieren en posición. En polarización directa el nivel de Fermi del metal es desplazado hacia abajo con respecto a la energía de Fermi del semiconductor y en polarización inversa el nivel de Fermi del metal es desplazado hacia arriba con respecto a la energía de Fermi del semiconductor.



**Figura 3.16.** a) Unión MS en polarización directa, donde una diferencia de potencial positiva disminuye la barrera de potencial. b) Unión MS en polarización inversa, donde una diferencia de potencial negativa acrecienta la barrera de potencial.

### 3.3.2 Contacto Óhmico

Un contacto óhmico es una unión en la cual la barrera Schottky es muy pequeña y en el caso ideal despreciable, por lo que tiene una resistencia de unión pequeña. Contrario a la barrera Schottky, el contacto óhmico facilita el flujo en ambas direcciones y no existe una vía en la cual la corriente fluya con mayor facilidad, por ello se cataloga como una unión no rectificante [39].

Es conocido de esta forma ya que obedece la ley de Ohm y su curva característica IV es una línea recta. Aunque no posee un papel central en dispositivos semiconductores, todo aparato electrónico precisa, por lo menos, un contacto óhmico para su funcionamiento [15, 18]. En un

contacto óhmico la barrera de potencial es casi despreciable, entonces no existe oposición al flujo de carga en cualquiera de las dos direcciones. En la situación de polarización, los niveles de Fermi del metal y del semiconductor se separan y la barrera de potencial crece (polarización inversa) o decrece (polarización directa). Aun bajo polarización, el cambio de altura en la barrera de potencial es despreciable. En un contacto óhmico ideal no existe zona de depleción, no interviene un potencial de contacto o un campo eléctrico de contacto y como consecuencia no existe doblamiento de bandas.

### **3.4 Celda Solar**

Las propiedades de los semiconductores discutidas hasta ahora son útiles porque describen la dinámica de los portadores y los fenómenos ocasionados por el cambio de sistema en equilibrio a sistema perturbado. Ahora, se hará uso de este conocimiento para discutir el funcionamiento de celdas solares.

Una celda solar es un dispositivo optoelectrónico de estado sólido que, debido a sus propiedades físicas semiconductoras, es capaz de convertir la energía de la luz en energía eléctrica por medio del efecto fotovoltaico [47]. Es común que en el lenguaje popular toda conversión de energía solar se defina de esta manera, sin embargo esto es incorrecto; la energía fotovoltaica solamente es consecuencia del efecto fotovoltaico. La estructura más básica de material donde sucede el efecto fotovoltaico es una célula o celda solar y en la mayoría de los casos produce muy poca potencia, por ello es común que un conjunto de celdas se conecten en serie o paralelo para aumentar la potencia suministrada por medio de paneles solares.

#### **3.4.1 Radiación Solar y Condiciones de Iluminación Estándar**

En la sección 3.1 se discutió acerca de la energía necesaria para crear PEH y del fenómeno físico que produce corriente en materiales semiconductores, empero, no se discutió acerca de las propiedades de los fotones que constituyen la radiación solar. Es necesario entonces conocer las características elementales de la fuente de energía de las celdas solares, en este caso, el sol, así como información acerca del espectro de radiación solar y como este

determina el desempeño de dispositivos optoelectronicos según el tipo de material que se utilice.

Conocer la fuente de energía que promueve el funcionamiento de celdas solares es primordial, empero, no es posible extenderse demasiado en el tema debido a la complejidad en la física que dicho astro posee, que abarca ramas de la física como astronomía, astrofísica y física nuclear, entonces la descripción de la fuente se hará en base a sus propiedades elementales y la teoría relevante se centrara en elementos de la física de la radiación solar.

El sol es una estrella del tipo espectral que constituye la principal fuente de radiación electromagnética del sistema solar. Formado hace más de 4,500 millones de años contiene más del 99% de masa de su sistema planetario del cual casi su totalidad es hidrogeno, helio y oxígeno, con trazas de elementos como carbono, hierro, neón, nitrógeno y silicio entre otros [3,4]. En el suceden reacciones nucleares (ciclo de Bethe) en donde se combina y transforma materia, por lo que constantemente surgen elementos y se genera energía debido a las características de fenómenos exotérmicos. Se estima que queda combustible para que el sol arda por más de 7500 millones de años [4,26]. Algunos de los datos técnicos más importantes acerca del sol son se muestran en la tabla 3.1.

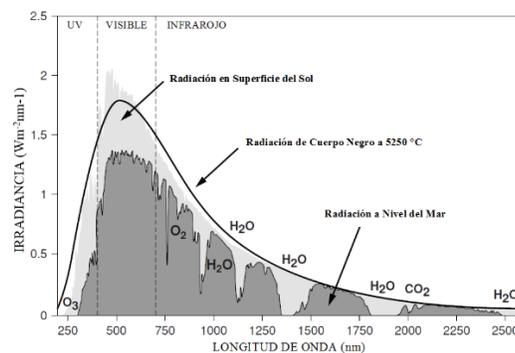
**Tabla 3.1.** Características físicas y valores aproximados del sol [26].

Diámetro	$\approx 1'392,000 \text{ km}$
Masa	$\approx 2 \times 10^{28} \text{ kg}$
Volumen	$\approx 1.43 \times 10^{18} \text{ km}^3$
Distancia media a la tierra	$\approx 149'600,000 \text{ km}$ (Unidad Astronómica)
Temperatura en centro	$\approx 15'000,000 \text{ K}$
Temperatura en superficie	$\approx 6,000 \text{ K}$
Presión en centro	$\approx 1'000,000 \text{ atmosfera}$
Energía de radiación	$\approx 380 \times 10^{21} \text{ kW}$
Velocidad orbital máxima	$\approx 260 \frac{\text{km}}{\text{s}}$

La información de las características y propiedades del sol como astro principal del sistema solar es relevante porque describen el origen de la radiación electromagnética incidente sobre

la tierra. Es bien sabido que, un cuerpo caliente emite radiación, más aun, un cuerpo dentro de un gradiente de temperatura creciente experimenta diferentes niveles de radiación, que se manifiesta con la aparición de distintos colores; aunque todos los cuerpos emiten radiación, los cuerpos negros emiten la cantidad máxima de radiación a una temperatura dada [3]. Esta aseveración constituye uno de los cimientos de la mecánica cuántica primitiva [37,43].

La radiación solar electromagnética, espectro solar o simplemente radiación solar posee una gran similitud a la radiación de un cuerpo negro a 5250 °C, que en escala Kelvin es un número similar (5523.15 K) [24]. La figura 3.17 muestra el espectro de radiación solar y su comparación con la radiación de un cuerpo negro a 5250 °C. Debido en parte a la temperatura de la superficie del sol de la tabla 3.1, se observa una gran similitud en la forma de las distribuciones.



**Figura 3.17.** Espectro de radiación de superficie del sol que se aproxima a la radiación de cuerpo negro a 5250 °C. Se observa que la radiación incidente llega a su punto máximo de atenuación en el nivel del mar [24].

De la distribución del espectro solar, se obtienen parámetros relevantes. Los parámetros que mejor representan la radiación incidente son la densidad de potencia espectral  $P(\lambda)$  y densidad de flujo de fotones  $\Phi(\lambda)$  [26, 48, 49]. La primera es la potencia incidente por unidad de área por unidad de longitud de onda y la segunda es el número de fotones por unidad de área por unidad de tiempo y por unidad de longitud de onda. Se relacionan según:

$$\Phi(\lambda) = P(\lambda) \frac{\lambda}{hc} \quad (3.20)$$

La potencia incidente por unidad de área se define como irradiancia y corresponde a la integral desde cero hasta infinito de la densidad de potencia espectral con respecto a la longitud de onda [26]:

$$P_{in} = \int_0^{\infty} P(\lambda)d\lambda \quad (3.21)$$

Sustituyendo (3.20) en (3.21) se observa que el integrando de la irradiancia (potencia de entrada de la celda) depende de la densidad de flujo de fotones y un término energético. La irradiancia promedio que incide sobre la atmosfera de la tierra es aproximadamente  $1,365 \frac{W}{m^2}$  cantidad a la que se le denomina constante solar, utilizada en algunos cálculos de celdas solares, predominantemente en aplicaciones aeroespaciales. Después de ser filtrado por la atmosfera de la tierra, una buena porción del espectro electromagnético solar se desvanece, siendo absorbido por gases como agua, dióxido de carbono, metano, polvo, entre otros y la irradiancia promedio baja hasta  $1,000 \frac{W}{m^2}$ , que se constituye como una constante universal de normalización, que se verá más adelante [26,38].

Luego, para mayor precisión de datos y para modelaciones más precisas, se ha establecido un indicador semi-empirico que describe la cantidad de radiación solar que ha sido absorbida antes de llegar a la celda solar. Como se menciona, existe una cantidad importante de compuestos que atenúan la intensidad de radiación solar al pasar por la atmosfera, entonces, se ha establecido que el incremento en la absorción de dichos compuestos depende directamente de la masa de aire por la que la radiación penetra, matemáticamente esto es:

$$\frac{l}{l_0} = \frac{1}{\cos \theta} \quad (3.22)$$

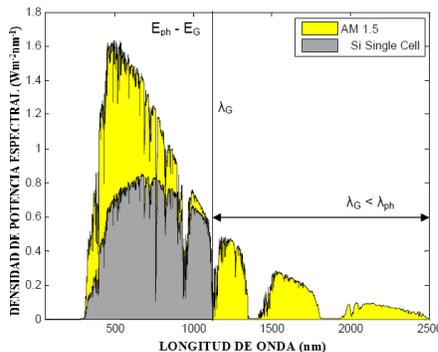
Donde  $l$  es el camino de la radiación incidente a través de la atmosfera,  $l_0$  es el grueso de la atmosfera y  $\theta$  es el ángulo de incidencia de la radiación con una línea vertical que es perpendicular a un plano horizontal en la superficie incidente. A esta ecuación se le conoce como masa de aire (AM). El espectro fuera de la atmosfera se describe con una masa de aire de AM0, en la superficie de la tierra y con incidencia normal a la superficie (sol en el zenith) con un AM1, a un ángulo de  $45^\circ$  con respecto al zenith con AM1.5 y a un ángulo de  $60^\circ$  con respecto al zenith con AM2 [38]. En el área de celdas solares, el más comúnmente usado es el AM1.5, que deja pasar una irradiancia de  $827 \frac{W}{m^2}$ .

En la conversión de energía solar a energía eléctrica la ecuación (3.21) es relevante ya que corresponde a la energía del band gap del semiconductor que absorbe la radiación, por tanto,

se observa que si la integral es sobre todo el dominio de las longitudes de onda, los valores mayores al band gap no serán absorbidos, por lo que el band gap del material semiconductor de las celdas solares se constituye como un factor limitante en la eficiencia de las celdas solares. Asimismo, de la ecuación (2.42) se observa que la generación solo abarca un rango de longitudes de onda que corresponde a la energía de los fotones incidentes igual o mayor que la del band gap. La energía de un fotón es:

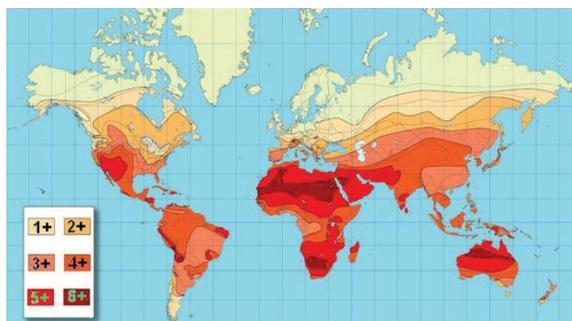
$$E = h\nu \quad (3.23)$$

Donde  $\nu$  es la frecuencia. Esta ecuación se denomina relación de Planck. Se observa que a menor longitud de onda, mayor energía y viceversa. Se sigue que longitudes de ondas mayores, o fotones con menor energía a la del band gap, no promoverán el efecto fotovoltaico en celdas solares. Este hecho constituye uno de los factores más importantes en pérdidas energéticas en celdas solares. La figura 3.18 muestra el espectro de radiación solar a AM1.5 y el área de irradiancia que puede ser absorbida por una celda solar de Si monocristalino.



**Figura 3.18.** Fracción del espectro de radiación solar AM1.5 que puede ser convertido a energía por una celda solar de Si monocristalino [26].

La integral de la ecuación (3.21) con respecto al tiempo se llama irradiancia solar, es la potencia incidente por unidad de área por unidad de tiempo y comúnmente es el parámetro utilizado para comparar la radiación incidente en las distintas regiones del mundo. Por ejemplo, la irradiancia solar anual promedio en Holanda es aproximadamente  $1000 \frac{kWh}{m^2}$ , mientras que en el Sahara es de  $2200 \frac{kWh}{m^2}$  [26]. La figura 3.19 muestra la irradiancia anual promedio en todo el mundo.



*Figura 3.19. Irradiación solar anual promedio en el mundo. Los colores y la numeración corresponden a kilo joule por metro cuadrado por día. Se observa que la zona norte de África es la que recibe la mayor [3].*

Con el objetivo de describir los parámetros de una celda solar bajo las mismas condiciones a nivel mundial se ha establecido un estándar denominado condiciones de iluminación estándar: 25°C ( $\approx 300$  K) y un espectro de irradiación de AM1.5, que como se vio equivale a  $827 \frac{W}{m^2}$ . Sin embargo se ha acordado que, para fines de establecer un estándar universal, dicha aire de masa sea igual a  $1,000 \frac{W}{m^2}$  [38].

### 3.4.2 Estructura Básica

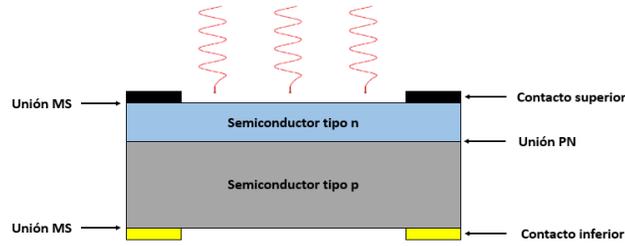
Con base en las investigaciones se ha encontrado que la esencia de una celda solar radica en la física de la unión PN, y que la generación de fotocorriente se puede dividir en tres pasos cronológicos que ya se han discutido en secciones previas: generación, separación y recolección de portadores, y son estos procesos los que establecen las características de diseño de una celda solar. La generación, separación y recolección de portadores solo es posible en materiales semiconductores, y más aún, solo se produce una corriente efectiva cuando existe una unión entre dos materiales de este tipo. La luz incidente que entra en la unión PN genera PEH en las regiones cuasi-neutrales y en la zona de depleción, proceso que se conoce como generación.

Los portadores generados en la zona de depleción son acelerados hacia la región donde son portadores mayoritarios (electrones hacia n y huecos hacia p) y los portadores generados en las regiones cuasi-neutrales son atraídos a la zona de depleción solo si la posición donde fueron creados con respecto al borde de la región de empobrecimiento es igual o menor a su longitud

de difusión como se observa en la ecuación (3.18). Ya en la zona de depleción el campo eléctrico acelera los portadores de la misma manera que a los PEH creados ahí. Este proceso corresponde a la separación de portadores, y es la característica más sobresaliente de celdas solares, cumpliendo así con (2.51).

Los portadores ya separados e inyectados en las regiones cuasi-neutrales, la probabilidad de recombinación de estos es casi nula y son libres de moverse en el semiconductor, sin embargo debido a la pérdida de equilibrio provocado por la inyección de portadores, las regiones cuasi-neutrales pierden momentáneamente la neutralidad de carga y por lo tanto buscan regresar a la situación de equilibrio haciendo fluir portadores por el contacto externo que generalmente es un contacto óhmico, a este proceso se le conoce como recolección de portadores. Cuando los contactos metálicos de los semiconductores entran en contacto, el circuito se cierra y se establece una corriente que es descrita por la ecuación (3.17).

La figura 3.20 muestra la estructura básica de una celda solar, compuesta por una unión PN y contactos metálicos por los cuales fluye la corriente generada. El mejor desempeño de las propiedades físicas de la celda se obtiene siguiendo las siguientes consideraciones para el diseño: el contacto metálico frontal (donde incide la luz) se busca sea de menor área posible para una mejor absorción de la luz; el grosor del semiconductor frontal se busca sea delgado para que la zona de depleción esté más cerca de la superficie [24, 39]; el semiconductor frontal generalmente es tipo n debido a la mayor movilidad de electrones y es más altamente dopado que el tipo p; el área superficial debe ser lo mayor posible para captar una mayor radiación solar; la región tipo p debe ser de longitud mayor que la región tipo n para mayor generación PEH. El orden de las dimensiones de la unión varía entre los nanómetros y los micrómetros y la tendencia actual es seguir reduciendo el grosor.



**Figura 3.20.** Celda solar tipo PN. Generalmente la cara que recibe la luz incidente (ventana) es un semiconductor tipo n, y la parte inferior un semiconductor tipo p. Se observa que inevitablemente existen contactos metálicos en el dispositivo.

Las celdas solares para su uso y aprovechamiento se disponen en módulos denominados módulo fotovoltaico o panel fotovoltaico. Proporcionan un soporte para las celdas, protección del medio y conectan en serie o paralelo a las células para aumentar el voltaje. Esta última propiedad es especialmente relevante ya que las celdas solares son en general de dimensiones pequeñas y otorgan un voltaje y corriente bajos y para ello se hace uso de la teoría de circuitos para maximizar el voltaje o corriente entregados.

### 3.4.3 Característica IV

La corriente en una celda solar está dada por la ecuación de la unión PN iluminada (3.17) y su gráfica se muestra en la figura 3.13. La fotocorriente posee dirección contraria a la corriente oscura y por eso existe un desplazamiento hacia abajo en la gráfica cuando existe iluminación. La potencia de la fotocorriente es el área bajo la curva de la característica IV, luego, teniendo en cuenta que a corriente y voltaje constante la potencia se define como

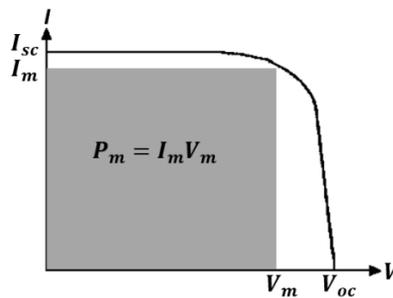
$$P = IV \quad (3.24)$$

Se puede ver la potencia de la figura 3.13 es negativa. Esto tiene la interpretación física de que el dispositivo consume energía, lo cual es correcto para un diodo rectificador, sin embargo una celda solar es un diodo que proporciona energía, por tanto, para evitar cualquier tipo de ambigüedad por convención la ecuación (3.17) se expresa como [24, 38, 49, 50]

$$J = J_{ph} - J_0 \left[ e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right] \quad (3.25)$$

En realidad esta ecuación representa el caso ideal de una celda solar donde el único parámetro relevante que determina  $J_{ph}$  es la longitud de difusión de portadores minoritarios [26]. En el caso real, la foto-corriente corresponde a la corriente de circuito cerrado  $J_{sc}$ , que es la corriente que circula por el circuito cuando los electrodos de la celda entran en contacto. Para simplificar el problema, se supondrá que la ecuación (3.25) siempre es válida.

La figura 3.21 muestra la gráfica de la ecuación (3.25). Está claro que la convención de corrientes para dispositivos fotovoltaicos invirtió la curva, haciendo positiva la densidad de corriente.



**Figura 3.21.** Curva característica de celda solar, que corresponde al cuarto cuadrante negativo de la figura 3.13. El rectángulo gris representa la potencia que el dispositivo proporciona.

### 3.4.4 Parámetros Externos

Bajo el enfoque macroscópico existen algunos parámetros que describen los valores de salida y caracterizan el desempeño de celdas solares. Estos parámetros determinan la característica IV de la celda solar bajo iluminación.

#### 3.4.4.1 Corriente de Circuito Cerrado

La corriente de circuito cerrado  $I_{sc}$  es la corriente que fluye por el circuito externo cuando los electrodos de la celda iluminada entran en contacto, depende de la densidad de flujo de fotones incidentes y es una magnitud escalar extensiva, ósea, depende del área de la celda, por tanto, es más conveniente manejar su cantidad intensiva correspondiente, el vector de densidad de corriente  $J_{sc}$ . La densidad de corriente en corto circuito se obtiene haciendo  $V = 0$  según la figura 3.21, por tanto, de la ecuación (3.25) se obtiene que  $J_{sc} = J_{ph}$  que corresponde al caso ideal.

### 3.4.4.2 Voltaje de Circuito Abierto

El voltaje de circuito abierto  $V_{oc}$  es el voltaje en el cual no circula corriente por el circuito, esto es, es el voltaje máximo de la celda cuando los electrodos no están en contacto [26, 26, 50, 51]. Al igualar a cero la ecuación (3.25) se obtiene

$$V_{oc} = \frac{k_B T}{q} \ln \left( \frac{J_{ph}}{J_0} + 1 \right) \quad (3.26)$$

se observa la dependencia en  $J_{ph}$  y  $J_0$ . La primera usualmente sufre pequeñas variaciones, mientras que la segunda varía en órdenes de magnitud importante, por ser una corriente que depende predominantemente de la corriente de deriva. Luego, debido a que  $J_0$  depende de la recombinación en la celda solar  $V_{oc}$  se establece como una medida de la cantidad de recombinación en el dispositivo [26, 52].

### 3.4.4.3 Potencia Máxima

La potencia máxima se define como el área bajo la curva del rectángulo de la figura 3.21. La base corresponde al voltaje de potencia máxima  $V_{mp}$  y la altura a la corriente de potencia máxima  $I_{mp}$ . Físicamente corresponden al voltaje y a la corriente que entregan la potencia de celda solar máxima, y en consecuencia, es deseable que la multiplicación de estos dos parámetros otorgue la mayor área posible.

La potencia máxima como función de una variable, puede encontrarse derivando esta con respecto al voltaje e igualando a cero (problema de máximos y mínimos). A partir de las ecuaciones (3.26) y (3.25) se tiene

$$P = \left( J_{ph} - J_0 \left[ e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right] \right) V$$

donde el voltaje se modifica como  $V = V_{oc} - v$  ya que el voltaje máximo es ligeramente menor que el voltaje de circuito abierto según la figura 3.21. Luego a partir de (3.26) y suponiendo que  $J_{sc} \gg J_0$  la ecuación anterior queda

$$P \approx J_{ph} (V_{oc} - v) \left[ 1 - e^{\frac{qv}{k_B T}} \right]$$

derivando  $P$  con respecto a  $v$  y teniendo en cuenta (3.26) se obtiene

$$e^{\frac{qv}{k_B T}} = 1 + \frac{qv}{k_B T} \quad (3.27)$$

que se conoce como condición de potencia máxima [3].

#### 3.4.4.4 Factor de Llenado

El factor de llenado es la razón entre la potencia máxima generada por la celda y la potencia teórica del producto de la corriente de circuito cerrado y el voltaje de circuito abierto

$$FF = \frac{J_{mp} V_{mp}}{J_{sc} V_{oc}} \quad (3.28)$$

Representa un indicador clave en la evaluación del desempeño de celdas y contribuye a la disminución de la eficiencia de conversión de energía. En el caso ideal, en el que la celda solar se comporte como diodo ideal, el FF puede expresarse como [26, 53].

$$FF = \frac{v_{oc} - \ln(v_{oc} + 0.72)}{v_{oc} + 1}$$

donde  $v_{oc} = \frac{qV_{oc}}{k_B T}$  es el voltaje normalizado. En celdas solares de Si el factor de llenado está en el rango de 0.7 y 0.85.

#### 3.4.4.5 Eficiencia de Conversión

El parámetro más importante en celdas solares es la eficiencia. Es un número adimensional, y por lo tanto, un indicador que representa la capacidad del dispositivo de transformar la energía solar en energía eléctrica, agrupa la información física como cociente y es el parámetro de celdas solares que trasciende la física del estado sólido, ya que es muy utilizado en ingeniería y aplicaciones. Matemáticamente es la razón entre la potencia en forma de energía eléctrica que entrega el dispositivo y la potencia en forma de energía lumínica que llega a este, esto es

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{J_{mp} V_{mp}}{P_{in}} = \frac{J_{sc} V_{oc} FF}{P_{in}} \quad (3.29 - a)$$

donde se hace uso de la definición de FF para dejar el parámetro en términos de  $J_{sc}$  y  $V_{oc}$ . La ecuación (3.29-a) expresa la eficiencia de conversión de energía de una celda solar en su forma más simple, empero, es posible añadir términos que describen las causas de la eficiencia siguiendo el principio multiplicativo de la teoría de probabilidad. Se ha obtenido una ecuación

que describe la eficiencia de una celda solar a partir de las causas más importantes de pérdidas [26, 54], esto es

$$\eta = \frac{\int_0^{\lambda_G} \Phi(\lambda) \frac{hc}{\lambda} d\lambda}{\int_0^{\infty} \Phi(\lambda) \frac{hc}{\lambda} d\lambda} \frac{E_G \int_0^{\lambda_G} \Phi(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\lambda_G} \Phi(\lambda) d\lambda} (1 - R^*) (QE_{op}^* \eta_G^*) (QE_{el}^*) \frac{A_f}{A_{tot}} \frac{qV_{oc}}{E_G} FF \quad (3.29 - b)$$

donde  $R^*$  es la reflectancia total,  $QE_{op}^*$  es la probabilidad de un fotón de ser absorbido,  $QE_{el}^*$  es la probabilidad de un foto-portador de ser colectado y  $\frac{A_f}{A_{tot}}$  es la pérdida por sombras (el numerador es el área expuesta a radiación y el denominador es el área total de la celda). El lado derecho de la ecuación (3.29-b) corresponde a las pérdidas debido a la conversión de energía donde cada parámetro de pérdida está encerrado entre paréntesis o es un cociente y, de izquierda a derecha los parámetros de pérdidas son:

- |  |                       |
|--|-----------------------|
| 1.- No absorción de longitudes de onda | 5.- Recombinación     |
| 2.- Termalización                      | 6.- Sombras           |
| 3.- Reflectancia total                 | 7.- Factor de voltaje |
| 4.- Absorción incompleta               | 8.- FF                |

Los parámetros de pérdidas 3, 4 y 5 se pueden agrupar en un solo término llamado eficiencia cuántica externa  $QE$  que es el número de portadores colectados por fotón incidente por cada longitud de onda. Al combinar este parámetro junto con 6 se obtiene otra expresión equivalente a (3.18). Si se asume que todos los fotones son absorbidos y todos los portadores son colectados, la densidad de corriente máxima es

$$J_{max} = q \int_0^{\lambda_G} \Phi(\lambda) d\lambda \quad (3.30)$$

## CAPÍTULO 4. RESULTADOS

El presente capítulo muestra los resultados de simulaciones numéricas de las propiedades ópticas y eléctricas de materiales semiconductores para celdas solares. Se resolvieron las ecuaciones diferenciales parciales por medio del método del elemento finito (FEM por sus siglas en inglés) y para ello se utilizó el software COMSOL Multiphysics desarrollado por COMSOL Inc, paquete computacional diseñado para la solución de problemas multifísicos.

Se comenzó con la simulación de un semiconductor de Si tipo p desde un tiempo posterior al cese de la iluminación hasta un tiempo  $t$ , luego se simuló las propiedades electromagnéticas y ópticas de la luz en el aire y Si, posteriormente se simuló una unión PN de Si en la situación de equilibrio, polarización directa e inversa y finalmente se simuló una celda solar de Si tipo PN en condiciones de iluminación y no iluminación.

### 4.1 Transporte en un Semiconductor Tipo P

Se simuló el transporte de portadores de carga en un semiconductor de Si tipo p para dos casos: en estado estacionario y en no estacionario. Se resolvieron las ecuaciones utilizando el módulo de transporte de sustancias diluidas en COMSOL.

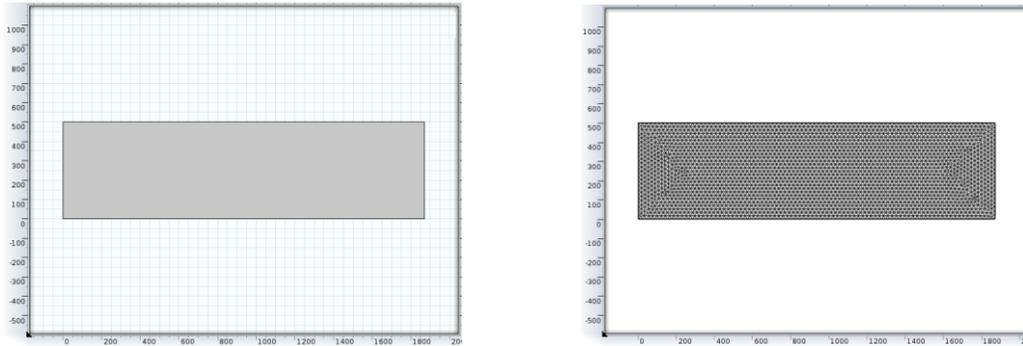
#### 4.1.1 Decaimiento de Portadores con el Tiempo

Para la simulación del transporte de portadores de carga en un semiconductor de Si tipo p se eligió el módulo de COMSOL transporte de especies diluidas con un estudio dependiente del tiempo. La tabla 4.1 muestra los parámetros utilizados en el modelo.

**Tabla 4.1.** Parámetros y expresiones numéricas utilizadas en la simulación 4.1.1.

Parámetro	Valor
Concentración de huecos	$1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
Tiempo de vida medio	$1 \times 10^3 \text{ s}$
Generación 1	$1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$
Generación 2	$0.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$
Generación 3	$1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$

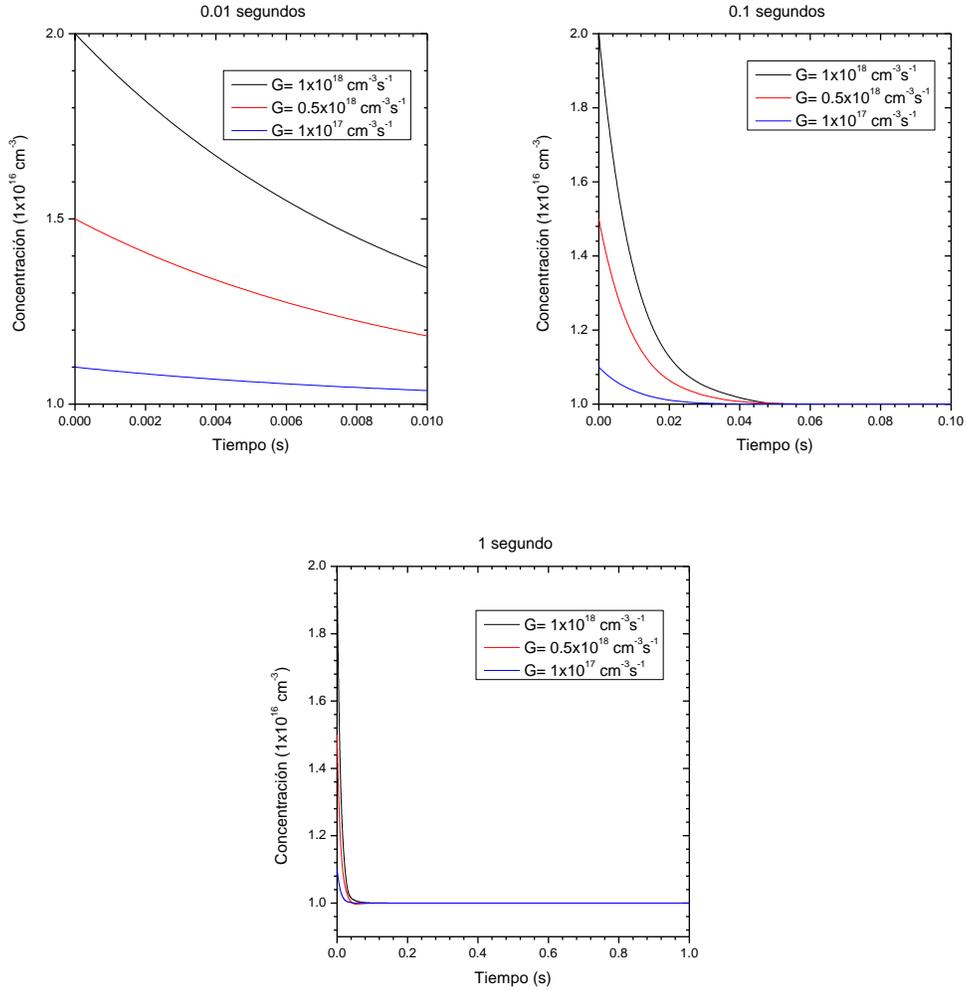
Para la geometría del material se definió una región con un rectángulo de  $1,870 \mu\text{m}$  de ancho y  $500 \mu\text{m}$  con el origen en  $(0,0)$ . La justificación de dichas dimensiones radica en la ecuación (2.47) y en lo discutido en el capítulo 3. La figura 4.1 muestra la geometría establecida y la partición de la malla para el problema.



**Figura 4.1.** Geometría y partición de la malla en elementos finitos para el estudio 4.1.1.

La ecuación a resolver fue (2.51), que bajo las consideraciones  $E = \frac{\partial E}{\partial x} = 0$  y  $\frac{\partial n}{\partial x} = 0$  la ecuación se vuelve idéntica a (2.45). La condición inicial se fijó como  $n_p = n_{p0} + \tau_n G_n$  y además se establecieron las condiciones de frontera  $\hat{n} \cdot \mathbf{J} = 0$  y  $n_p(\infty) = n_{p0}$ . La figura 4.2 (a) muestra el cambio de portadores con respecto al tiempo en un periodo de 0.01 segundos. Se observa que las curvas decaen suavemente y no de manera abrupta, e inclusive dichas funciones se asemejan a una función lineal; (b) muestra el cambio de portadores con respecto al tiempo en un periodo de 0.1 segundos. La familia de curvas es de la forma de una función exponencial negativa típica; (c) muestra el cambio de portadores con respecto al tiempo en un periodo de 1 segundo.

En los tres casos la función decae asintóticamente hacia  $1 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$  que corresponde a la concentración inicial en equilibrio, comportamiento que concuerda con la solución analítica. Por otra parte, los parámetros de generaciones presentan mayores diferencias entre ellas a menor tiempo de estudio; se observa como de (a) hacia (c) la generación va perdiendo relevancia.



**Figura 4.2.** Concentración de portadores minoritarios en función del tiempo en periodos de estudio de a) 0.001 segundos, b) 0.1 segundos y c) 1 segundo.

#### 4.1.2 Decaimiento de Portadores con la Distancia

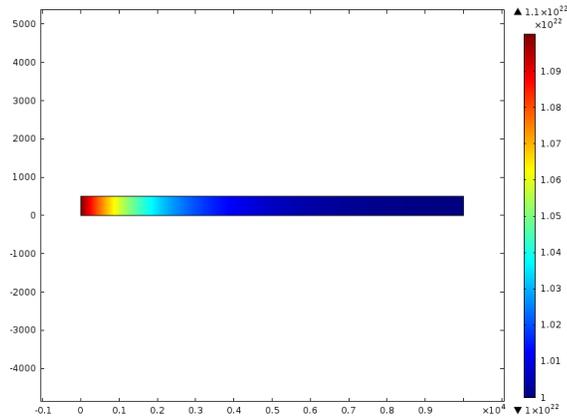
Para el caso estacionario, se escogió el modulo transporte de especies diluidas con un estudio independiente del tiempo. Los parámetros del modelo fueron idénticos a los de la tabla 4.1 añadiendo el coeficiente de difusión de electrones para el Si a 300 K,  $D_n = 35 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ .

A diferencia del caso dependiente del tiempo, se eligieron diferentes geometrías en con el objetivo de mostrar un comparativo de los decaimientos. Los tamaños fueron 1,000, 1,870 y 10,000  $\mu\text{m}$  con un origen en (0,0) y un ancho de 500  $\mu\text{m}$  cada una, las cuales se eligieron

debido a que longitud de difusión del material y las otras dos dimensiones se analizaron para discutir el comportamiento en distancias pequeñas y grandes. La partición de la malla se muestra en la figura 4.1.

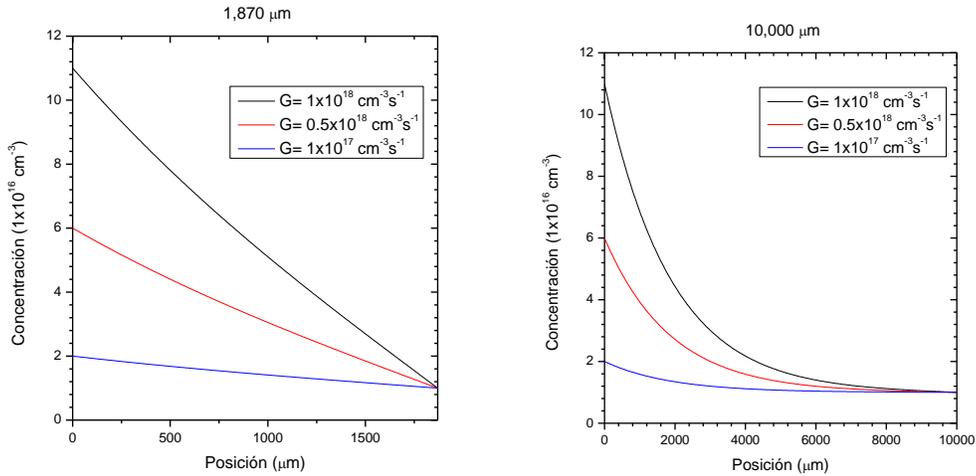
De la misma manera que en el caso anterior, la ecuación a resolver fue (2.51), que bajo las consideraciones  $E = \frac{\partial E}{\partial x} = 0$  y  $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$  la ecuación se vuelve (3.14). La condicion inicial se fijó como  $n_p = n_{p0} + \tau_n G_n$  y ademas se establecieron las condiciones  $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J} = 0$  y  $n_p(\infty) = n_{p0}$ .

La figura 4.3 muestra el cambio de portadores para la geometria de  $10,000 \mu m$ . Se observa que alrededor de los  $5,000 \mu m$  el cambio de concentracion es casi nulo (color azul fuerte) lo que significa que la concentración se encuentra proxima a la concentracion inicial en equilibrio.



**Figura 4.3.** Cambio de concentración de portadores minoritarios para la geometría de  $10,000 \mu m$ .

La solución de la ecuación (3.14) se muestra en la figura 4.4 inmediatamente después de interrumpir la generación, con geometrías de  $1,870$  y  $10,000 \mu m$  y generaciones de G1, G2 y G3. Se utilizaron estas geometrías ya que la primera representa la longitud de difusión de portadores en Si y la segunda es debido a la distancia larga. Las gráficas muestran la solución numérica cuya solución analítica es  $n_p(x) = n_{p0} + (n_p(0) - n_{p0})e^{-\frac{x}{L_n}}$ .



**Figura 4.4.** Concentración de portadores minoritarios en función de la posición en estudios de a) 1,870  $\mu\text{m}$  y b) 10,000  $\mu\text{m}$ .

## 4.2 Propiedades Electromagnéticas y Ópticas de Perfil de Aire y Semiconductor Tipo N

En esta sección se analizó el comportamiento de la luz que incide en la estructura, es decir, el cómo se transmite y se refleja, para ello se eligió el módulo de COMSOL ondas electromagnéticas con un estudio en el dominio de las frecuencias. La tabla 4.2 muestra los parámetros y la tabla 4.3 las variables del modelo [55].

**Tabla 4.2.** Parámetros y expresiones numéricas utilizadas en la simulación 4.2.

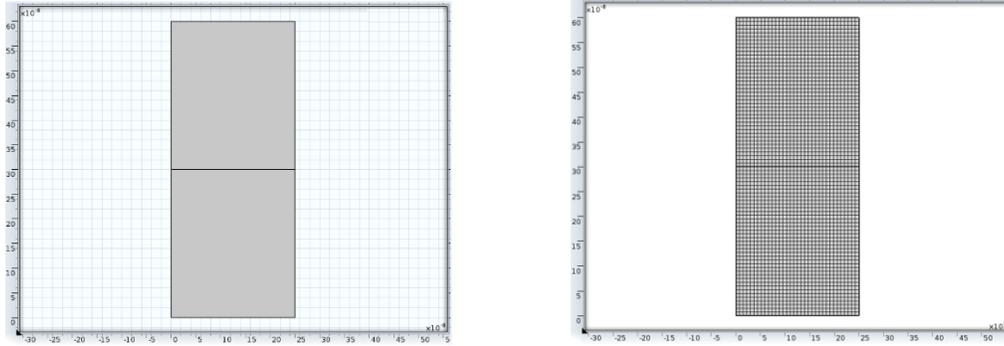
Parámetro	Valor
Temperatura	300 K
Longitud de onda	$\lambda_1 = 350 \text{ nm}$
	$\lambda_2 = 550 \text{ nm}$
	$\lambda_3 = 750 \text{ nm}$
Frecuencia	$8.5655 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$
Ancho	250 nm
Alto aire	300 nm
Alto material	300 nm
Grueso en dirección z	1 cm

Angulo de incidencia	0
Área activa	$2.5 \times 10^{-9} m^2$
Flujo de potencia incidente	$100 \frac{mW}{cm^2}$
Potencia incidente	$2.5 \times 10^{-6} W$

**Tabla 4.3.** Variables utilizadas en la simulación 4.2.

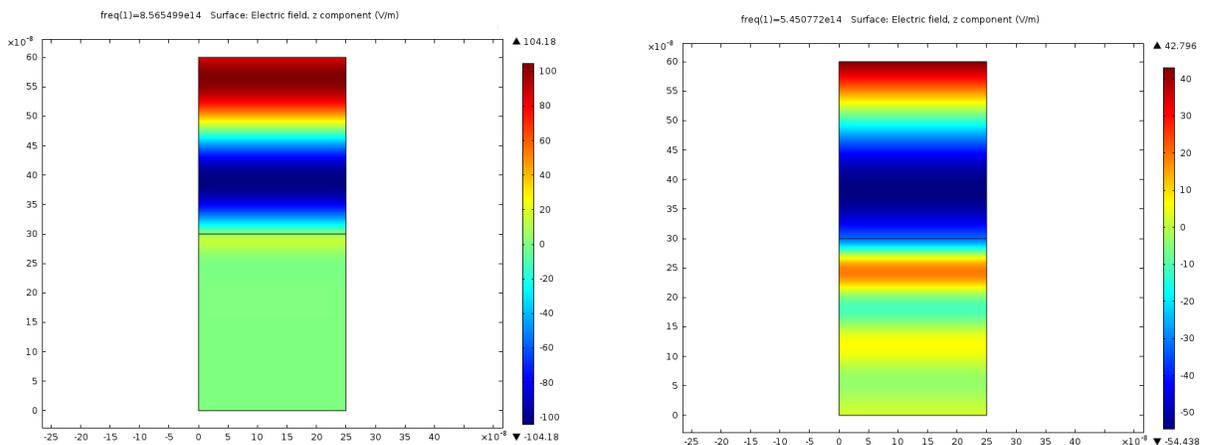
Variable	Valor
Permitividad relativa Si	$(n_{Si}(\lambda) - j * k_{Si}(\lambda))^2$
Índice de refracción	$n_{Si}(\lambda) - j * k_{Si}(\lambda)$
Vector de onda	$2 * \pi / \lambda$
Vector de onda en aire (x)	$k_a * \sin(\text{angulo incidencia})$
Vector de onda en aire (y)	$-k_a * \cos(\text{angulo incidencia})$
Vector de onda en Si	$k_a * \text{refrindex Si}$
Vector de onda en Si (x)	$k_b * \sin(\text{angulo incidencia})$
Vector de onda en Si (y)	$-k_b * \cos(\text{angulo incidencia})$
Flujo de Potencia	$\sqrt{emw.Poavx^2 + emw.Poavy^2 + emw.Poavz^2}$
Cambio del flujo de potencia	$\text{abs}(d(emw.Poavx, x) + d(emw.Poavy, y) + d(emw.Poavz, z))$
Generación	$(\text{divpotencia}) / (c\_const * h\_const / \lambda)$

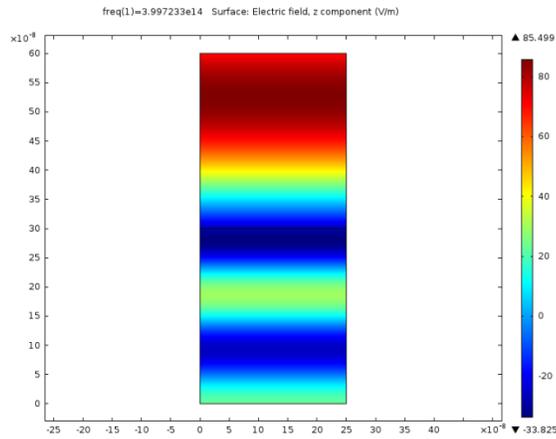
Para el caso de la permitividad de Si se interpolaron de los datos obtenidos de [56] y la permitividad del aire se asumió igual a la del vacío. La geometría del problema se definió dentro de una región de 250 nm de ancho y 300 nm de largo con el origen en (0,0) para el Si y otro rectángulo de 250 nm de ancho y 300 nm de largo con el origen en (0, 300 nm) para el aire. Estas dimensiones se eligieron para conservar el mismo orden de magnitud de las longitudes de onda del espectro visible. La figura 4.5 muestra la geometría del problema y la partición de la malla.



**Figura 4.5.** Geometría y partición de la malla en elementos finitos para el estudio 4.2.

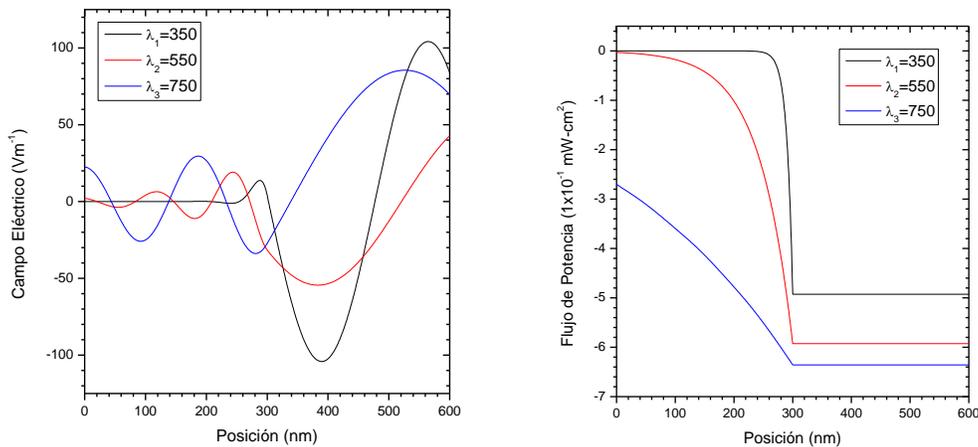
La ecuación a resolver fue (1.42). La condición inicial se fijó como  $E_x = E_y = E_z = 0$  y las condiciones de frontera como  $P_{in} = 100 \frac{mW}{cm^2} * 2.5 \times 10^{-9} m^2$  en la parte superior de la geometría del aire y en las fronteras laterales, para los vectores de onda se utilizó la condición de periodicidad de Floquet. Bajo estas condiciones se estudió la propagación de ondas electromagnéticas como se muestra en la figura 4.6, donde se muestra la componente z del campo eléctrico para las longitudes de onda de  $350 \text{ nm}$ ,  $550 \text{ nm}$  y  $750 \text{ nm}$ . La razón de estos valores se debe a que representan el rango de luz visible en el espectro electromagnético así como el punto medio.





**Figura 4.6.** Oscilación del campo eléctrico en el eje  $z$ , según las longitudes de onda: a) 350 nm, b) 550 nm y c) 750 nm.

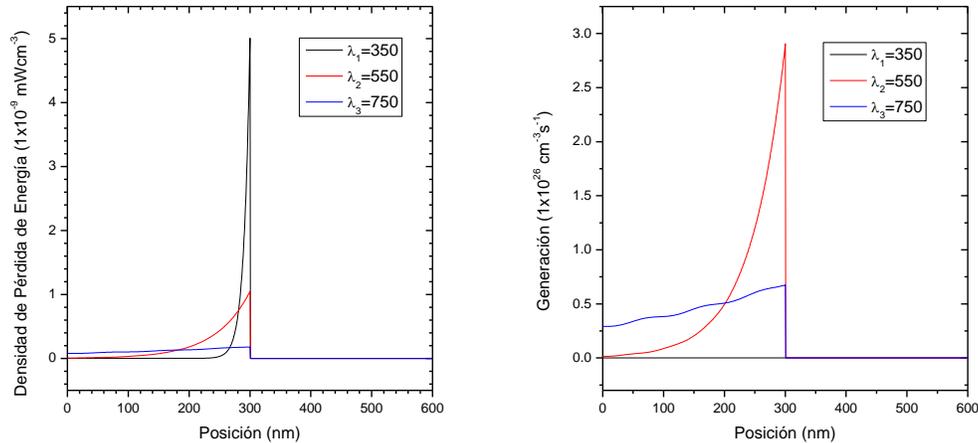
Se muestra la componente  $E_z$  en el aire y en el material. Se observa como a medida que se varían propiedades como en este caso la longitud de onda el comportamiento de las ondas es distinto; cabe recordar que el Si es un material dispersivo.



**Figura 4.7.** a) Oscilación del campo eléctrico en aire y Si para diferentes longitudes de onda. b) Perfil del comportamiento de la energía almacenada en el campo electromagnético, estrechamente relacionado con el vector de Poynting.

La figura 4.7 muestra la componente  $E_z$  del campo eléctrico, así como el flujo de potencia. Se puede observar que la variación del campo eléctrico en el aire es oscilatoria sin decaer, y en el

caso del flujo es constante. Luego cuando penetra al material la curva comienza a decaer debido a la interacción con el Si, esto se observa tanto en la amplitud del campo eléctrico como en el flujo de potencia. También, se concluye que cuando la longitud de onda es mayor aumenta la propagación en el medio, esto es de esperarse ya que la componente en la dirección de propagación aumenta.



**Figura 4.8.** a) Densidad de pérdida de energía y b) Generación de portadores para diferentes longitudes de onda.

La figura 4.8 se muestra la densidad de pérdida de energía y la generación de portadores cuando la onda electromagnética de las tres longitudes de onda penetra al Si. La generación se obtiene calculando la divergencia del vector de Poynting y dividiendo esto último por la energía incidente [36]. La generación es de suma importancia para los dispositivos optoelectrónicos y, se concluye del cálculo, que depende fuertemente de la longitud de onda del haz incidente.

### 4.3 Unión PN

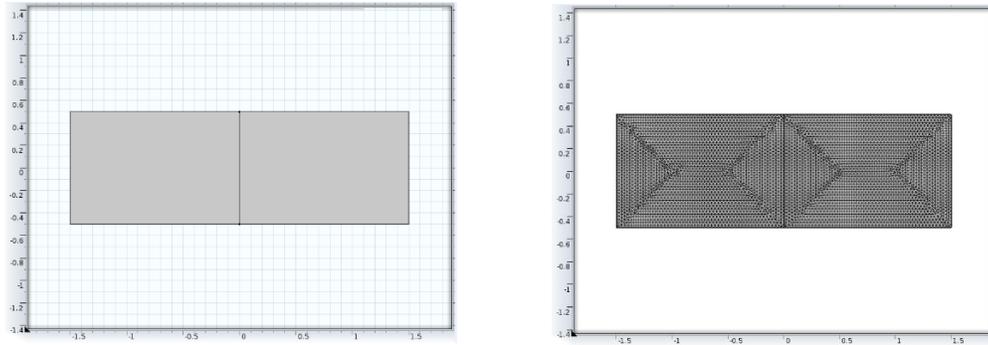
Con base en las ecuaciones de teoría electromagnética y transporte en semiconductores y unión PN discutidas en los tres primeros capítulos se simuló las propiedades físicas de una unión PN en equilibrio, polarización directa y polarización inversa. Se escogió el módulo

Semiconductores con un estudio del tipo estacionario. La tabla 4.4 muestra los parámetros del modelo [55].

**Tabla 4.4.** *Parámetros y expresiones numéricas utilizadas en la simulación 4.1.1.*

Parámetro	Valor
Temperatura	300 K
Configuraciones alto	0.5 $\mu m$
	1 $\mu m$
	2 $\mu m$
Configuraciones ancho	3 $\mu m$
	4 $\mu m$
	5 $\mu m$
Rango de simulación	Range (-4,0.01,1)
Permitividad relativa Si	11.8
Band gap Si	1.11 V
Concentración intrínseca	$1 \times 10^{10} cm^{-3}$
Concentración impurezas aceptoras	$1 \times 10^{15} cm^{-3}$
Concentración impurezas donadoras	$1 \times 10^{15} cm^{-3}$
Tiempo de vida medio (e)	$1 \times 10^{-3} s$
Tiempo de vida medio (h)	$1 \times 10^{-3} s$

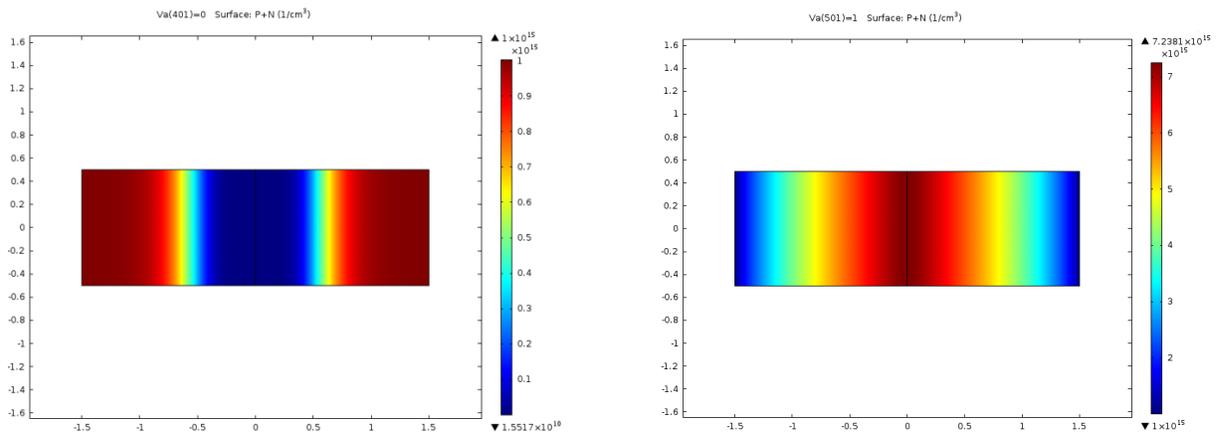
La geometría del problema se definió dentro de una región de 3  $\mu m$  de ancho y de alto 1  $\mu m$  centrado en (0,0) y con el origen en (-1.5,-0.5), y una línea recta que separa al rectángulo con extremos desde (0,-0.5) a (0,0.5); estas dimensiones se denominaran la geometría base. Se hicieron variaciones en las dimensiones con el fin de observar las diferencias en las propiedades físicas. Las configuraciones de las geometrías fueron: 1  $\times$  3, 1  $\times$  4, 1  $\times$  5, 0.5  $\times$  3, 2  $\times$  3 (en micrómetros). La figura 4.9 muestra la geometría base del problema y la partición de la malla.

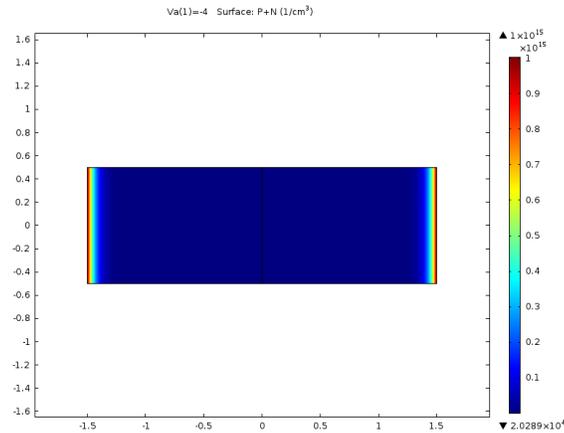


**Figura 4.9.** Geometría y partición de la malla en elementos finitos para el estudio 4.3.

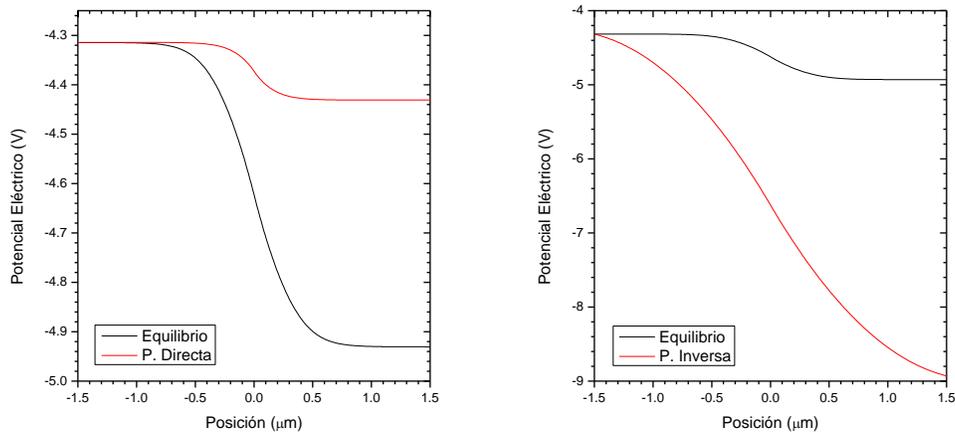
Las ecuaciones a resolver fueron (2.10), (2.32), (2.29), (2.49) y (2.51). La condición inicial se fijo como  $V = V_0$ ,  $N = N_0$  y  $P = P_0$  y las condiciones de frontera como  $\hat{n} \cdot \mathbf{J} = 0$  y  $\hat{n} \cdot \mathbf{D} = 0$  para la parte inferior y superior del diodo y  $V_0 = 0$  V y  $V_0 = V_a$  en los contactos.

La figura 4.10 muestra la concentración de portadores de carga en la union PN en la situación de equilibrio, polarización directa y polarización inversa en gráficas 2D para la geometria base del problema.





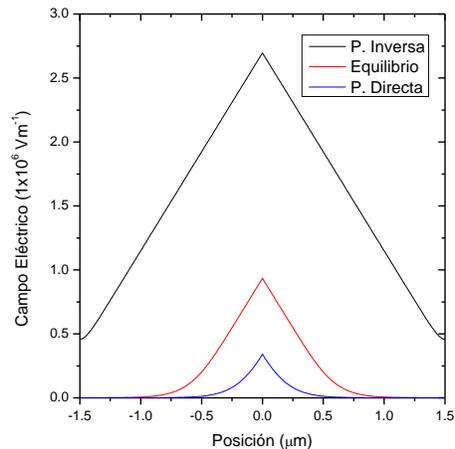
**Figura 4.10.** Concentración de portadores mayoritarios (rojo) en la situación de a) Equilibrio, b) Polarización directa y c) Polarización inversa.



**Figura 4.11.** Comparativo del potencial eléctrico en la unión PN en equilibrio (potencial de contacto en la zona de depleción) y fuera de equilibrio.

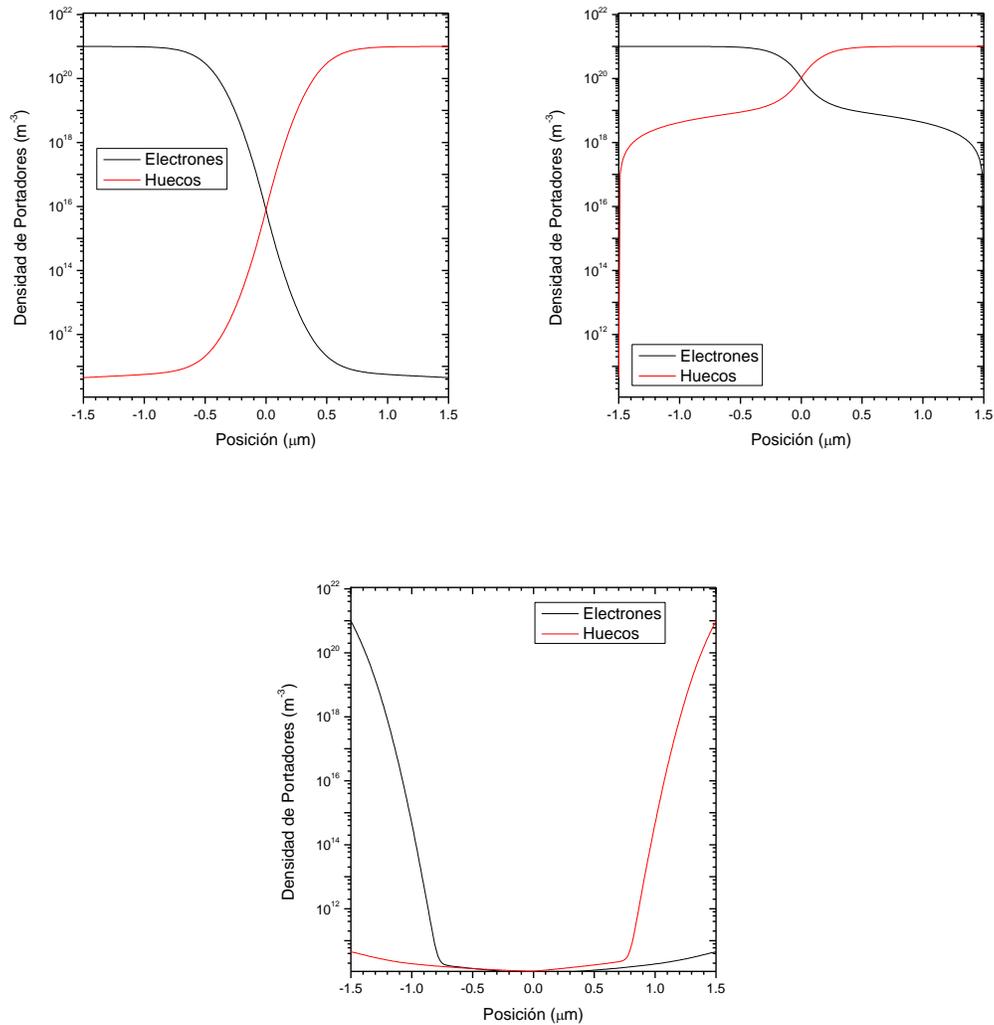
La figura 4.11 muestra el potencial eléctrico en equilibrio y en polarización directa en (a) y en equilibrio polarización inversa en (b). Se observa como en polarización inversa el potencial de la zona de depleción se incrementa, y en polarización directa disminuye, lo que concuerda con la ecuación (3.11) y con lo discutido en el capítulo 3. El cambio de la función en ambas graficas es debido a la interfase de la región de empobrecimiento. En la figura 4.3.4, se muestra el potencial eléctrico típico de la unión PN para situaciones en equilibrio, directa e inversa.

La figura 4.12 muestra el campo eléctrico en equilibrio, polarización directa y polarización inversa. Se observa como existe una correspondencia con las curvas del potencial eléctrico debido a la ecuación (1.22).



**Figura 4.12.** Campo eléctrico en la unión PN.

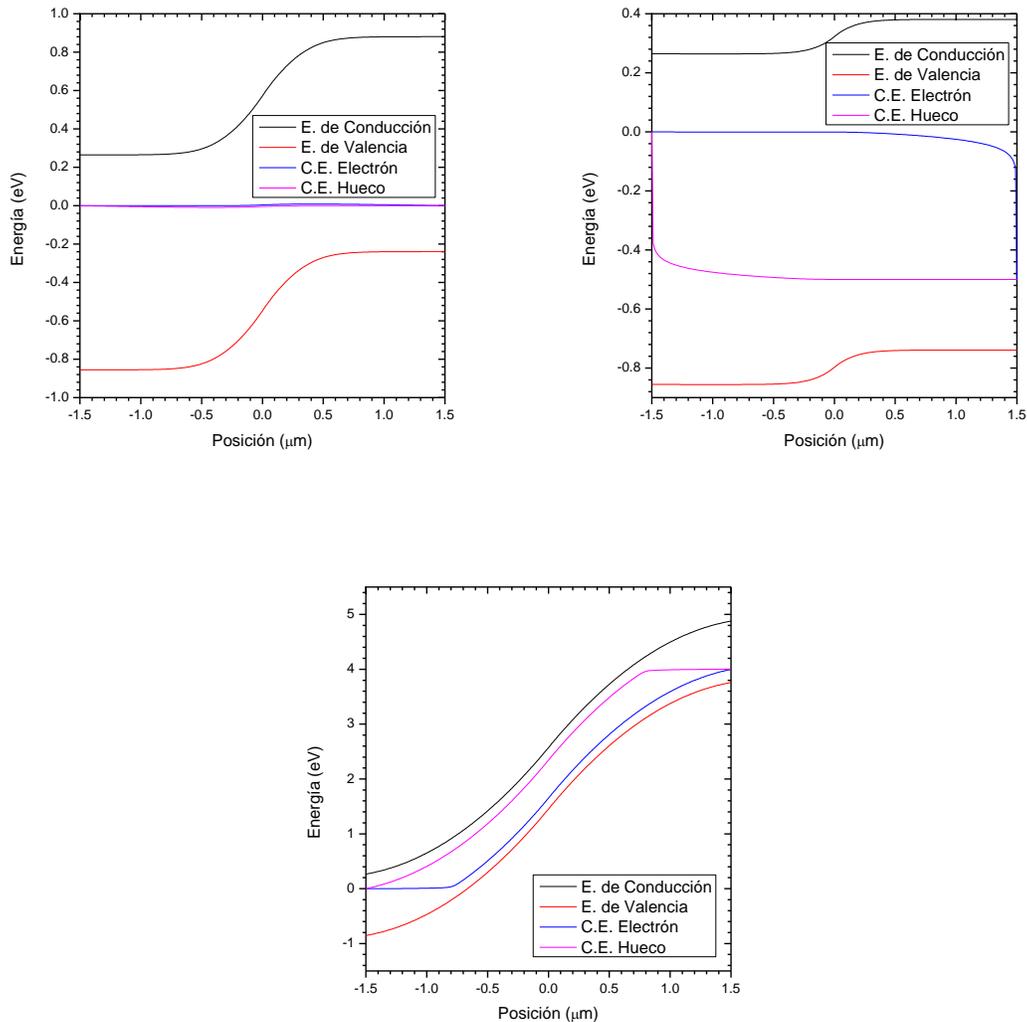
La figura 4.13 muestra la densidad de portadores de carga en equilibrio, polarización inversa y polarización directa. Se observa como en las tres situaciones la concentración de electrones y huecos en N y P respectivamente es constante, esto debido a la suposición de regiones cuasi-neutrales infinitas, y después de la fase de decaimiento las concentraciones decaen hacia una cantidad constante  $1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  que es a la concentración intrínseca. En las tres situaciones se observa que el decaimiento es simétrico debido a  $|N_a| = |N_d|$  y a la geometría. En equilibrio las concentraciones presentan un cambio simétrico con respecto al eje  $y$  y  $x$ , y la región de cambio indican la presencia de la zona de depleción; en polarización directa las concentraciones presentan un cambio simétrico respecto al eje  $y$  pero no con respecto a  $x$ , esto porque la fuerza externa acelera a los portadores hacia la región de signo contrario; en polarización inversa de igual forma no existe simetría con respecto al eje  $x$  debido a la fuerza externa y en este caso la fuerza acelera las cargas hacia los extremos, por lo que en la gráfica se observa un decaimiento prolongado y una zona de depleción casi sin cambios y más grande que en las situaciones anteriores.



**Figura 4.13.** Densidad de portadores de carga en la unión PN en las situaciones de a) equilibrio, b) polarización directa y c) polarización inversa.

La figura 4.14 muestra el diagrama de bandas de energía en equilibrio, polarización directa y polarización inversa. Se observa como COMSOL toma como referencia la quasi-energía de Fermi del electrón y no la banda de valencia como es común en semiconductores. En equilibrio el doblamiento de bandas se debe al campo eléctrico de contacto y las quasi-energías de Fermi son prácticamente constantes (la mínima diferencia observable es debido a la energía térmica) constituyéndose en una sola energía de Fermi; en polarización directa se observa que las bandas presentan un doblamiento mínimo debido al campo eléctrico y las

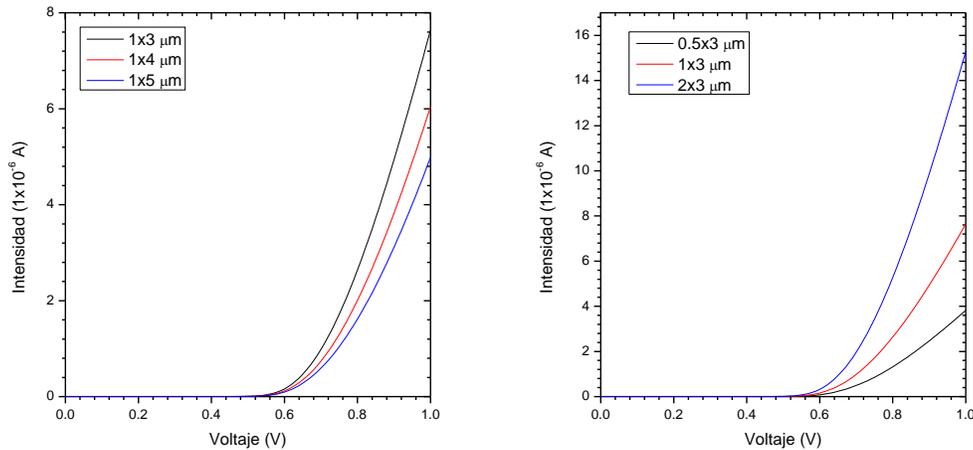
cuasi-energías de Fermi presentan una separación mayor a 0.4 eV, que es consecuencia del desequilibrio; en polarización inversa se observa un doblamiento de bandas mayor a los 4 eV con una separación de cuasi-energías de Fermi de magnitud similar.



**Figura 4.14.** Diagrama de bandas de energía en la unión PN en las situaciones de a) equilibrio, b) polarización directa y c) polarización inversa.

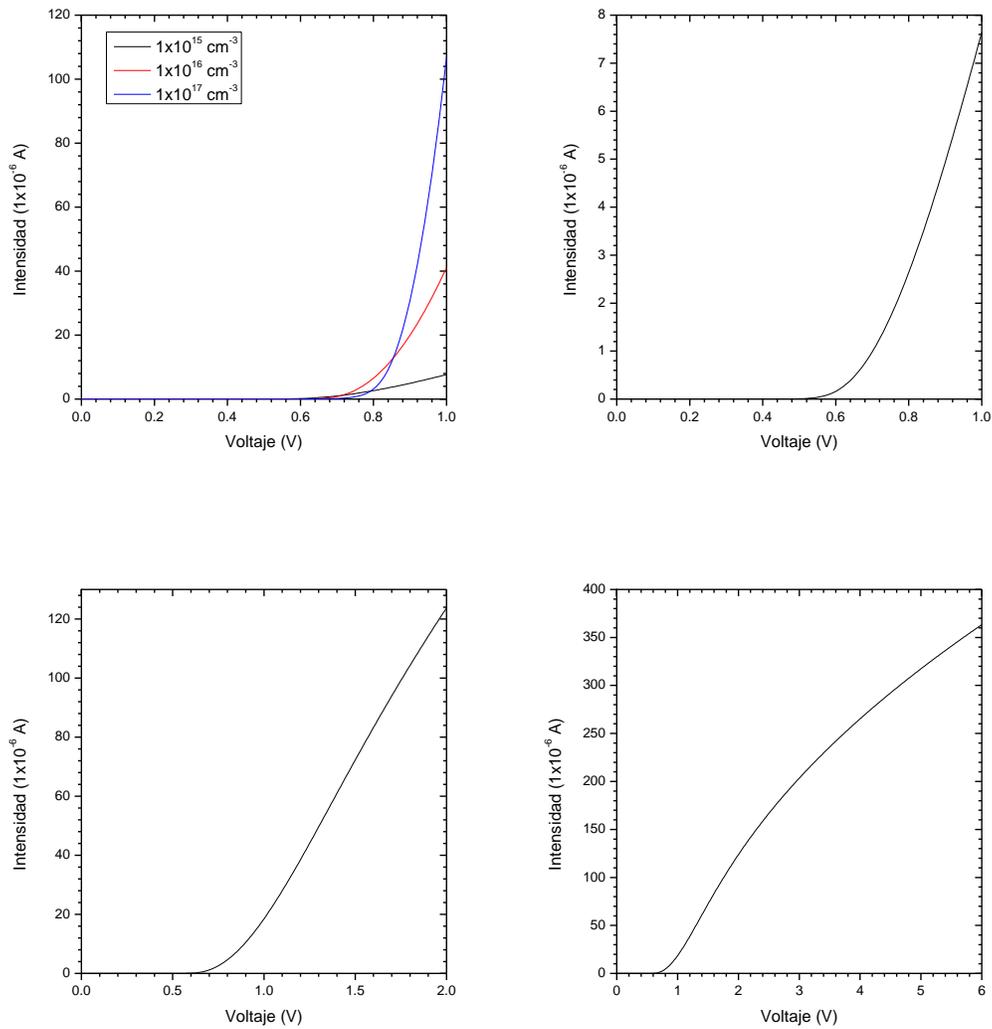
La figura 4.15 muestra las curvas IV con variaciones de diseño y voltaje. Se observa que el comportamiento de las curvas IV es típico de una unión PN. La grafica de variación del ancho muestra como un ancho menor hizo que aumentara más rápidamente la curva, mientras que el ancho mayor hizo que aumentara con menor rapidez; esto es de esperarse porque la resistencia

depende del tamaño del dispositivo. La grafica de variación de la altura muestra que un aumento en la altura produce una función que crece más rápidamente que las de menor altura. Esto hace evidente que las dimensiones afectan de manera importante el comportamiento de una unión PN.



**Figura 4.15.** Curvas características IV para variaciones en el diseño: a) variación de anchura y b) variación de altura.

La gráfica de variación del dopado muestra que el dopado con menor concentración comienza a cambiar primero pero sin un aumento rápido y el dopado con mayor concentración presenta el primer cambio con mayor voltaje pero con un aumento de rapidez notable. Por otro lado las gráficas de variación de voltaje muestran como la curva IV cambia dependiendo del voltaje, donde el comportamiento no lineal es apreciable. La curva de interés debe ser de la forma de la figura 3.12 por lo que la gráfica de variación de voltaje de 1 V es la más representativa. Esto sustenta la suposición de que la característica IV opera eficientemente en presencia de campos eléctricos bajos [17, 21, 36].



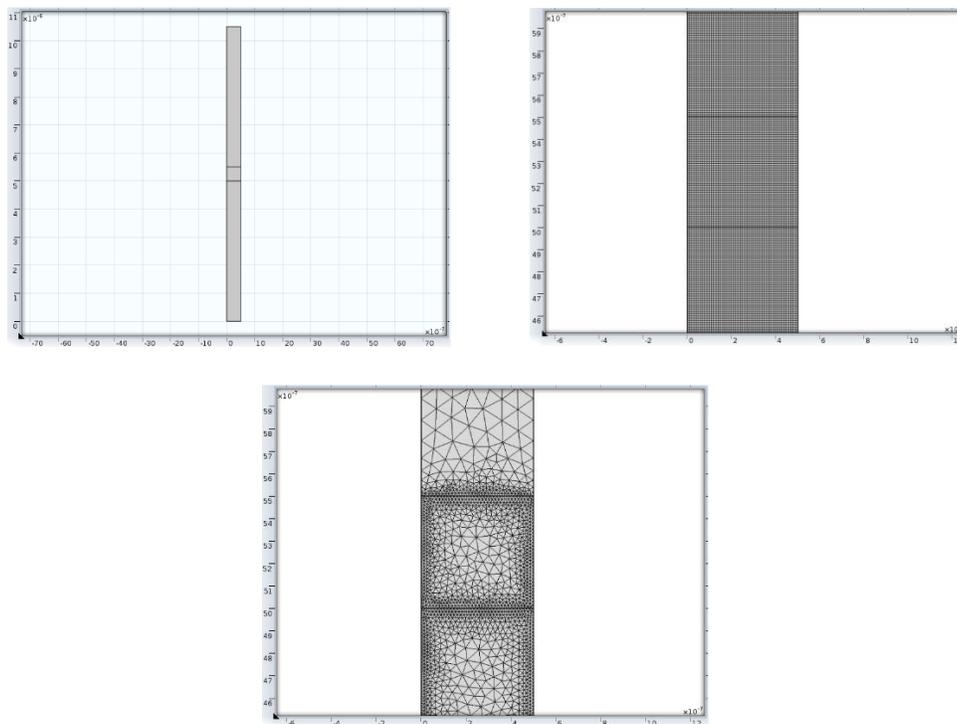
**Figura 4.16.** a) Curva IV con variación de dopado. b) Curva IV con dominio hasta 1 V. c) Curva IV con dominio hasta 2 V. d) Curva IV con dominio hasta 6 V.

#### 4.4 Celda Solar de Si Mono Cristalino

En esta sección se compila la física de las simulaciones anteriores en un solo modelo que conforma la simulación de una celda solar de Si tipo PN. Se comienza por la descripción de las características de diseño y posteriormente, con el objetivo de mostrar la física implícita en la celda, se presentan los resultados desglosados por partes: interacción electromagnética, celda no iluminada (equilibrio), celda iluminada (fuera de equilibrio) y corrimiento de curva

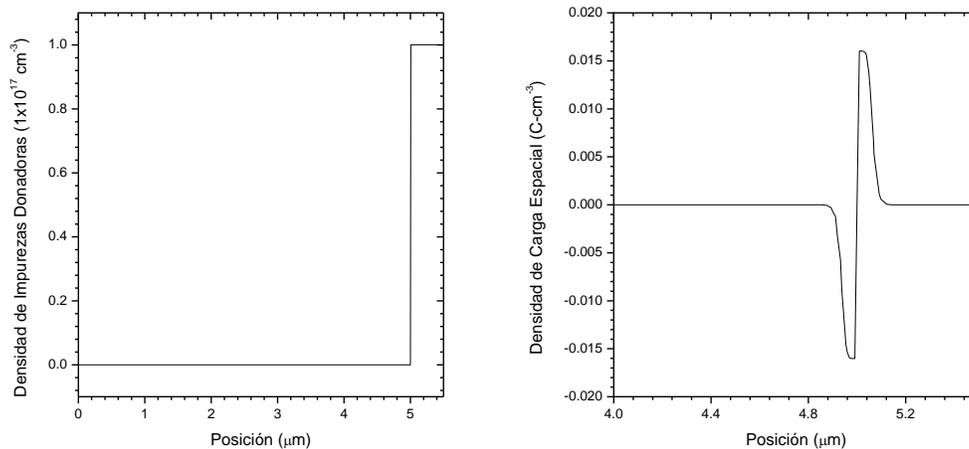
IV. El presente es un estudio monocromático, es decir, los resultados fueron obtenidos tomando en cuenta una sola longitud de onda:  $\lambda = 550 \text{ nm}$ .

Los módulos utilizados fueron los de las simulaciones previamente expuestas (multifísica), y de igualmente, las variables, parámetros y expresiones numéricas fueron las utilizadas en 4.1, 4.2 y 4.3. La geometría del problema se definió dentro de una región de  $0.5 \mu\text{m}$  de ancho y de alto  $5 \mu\text{m}$  centrado en  $(0,0)$  para el semiconductor tipo p,  $0.5 \mu\text{m}$  de ancho y de alto  $0.5 \mu\text{m}$  centrado en  $(0, 5 \mu\text{m})$  para el semiconductor tipo n y  $0.5 \mu\text{m}$  de ancho y de alto  $5 \mu\text{m}$  centrado en  $(0, 5.5 \mu\text{m})$  para el aire. Se eligieron dichas dimensiones según lo reportado en [10, 57]. La figura 4.17 muestra la geometría base del problema y la partición de la malla.



**Figura 4.17.** Geometría y partición de la malla en elementos finitos para el estudio 4.4.

Las ecuaciones a resolver fueron (1.42), (2.10), (2.32), (2.29), (2.49) y (2.51). Las condiciones iniciales y de frontera fueron idénticas a las utilizadas en los modelos anteriores (condiciones de Dirichlet y periodicidad tipo Floquet).

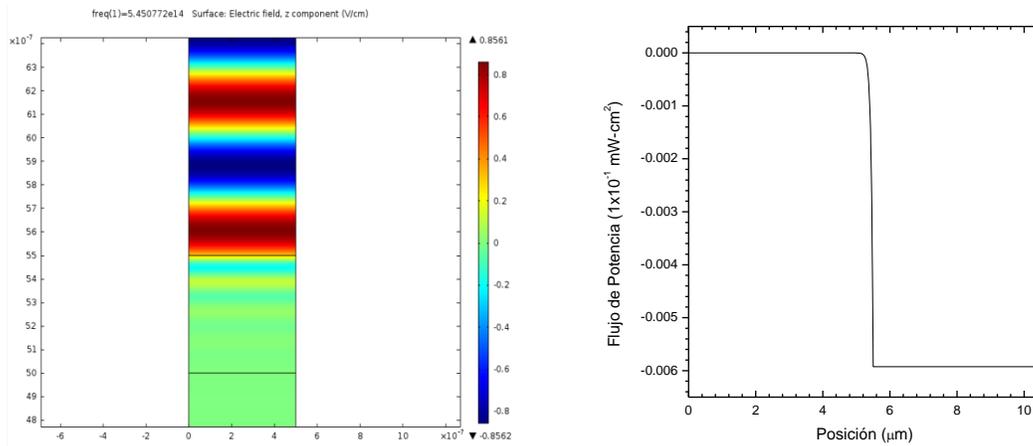


**Figura 4.18.** a) Densidad de impurezas semiconductor tipo n y en b) se muestra la densidad de carga espacial que se forma en la zona de deplexión.

La figura 4.18 (a) muestra el perfil de dopado de la celda. Se observa que la densidad de impurezas es mayor en el semiconductor tipo n, pero la cantidad de impurezas aceptoras es mayor en el semiconductor tipo p. La figura 4.18 (b) muestra la densidad de carga espacial en la celda, que corresponde a la carga que produce el potencial de contacto en la zona de deplexión.

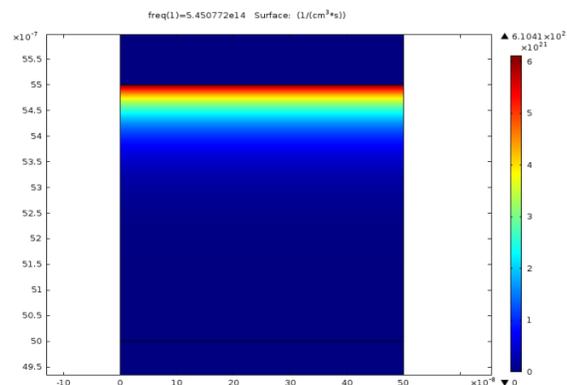
#### 4.4.1 Interacción Electromagnética

La forma en que se obtuvieron los resultados de las ondas electromagnéticas incidentes en una celda solar fue idéntica a la de la sección 4.2. La figura 4.19 muestra la componente  $E_z$  del campo eléctrico en 2D y el flujo de potencia. Al igual que los resultados de la 4.2 se puede observar que la variación del campo eléctrico en el aire es oscilatoria sin decaer hasta que penetra en el Si tipo n y decae rápidamente. En el caso del flujo de potencia, existe decaimiento solo al ingresar al material.



**Figura 4.19.** a) Oscilación del campo eléctrico en modo transversal eléctrico en 2D para una longitud de onda de 550 nm y en b) se muestra el vector de Poynting. En los dos casos los resultados se observan en el aire y en el material.

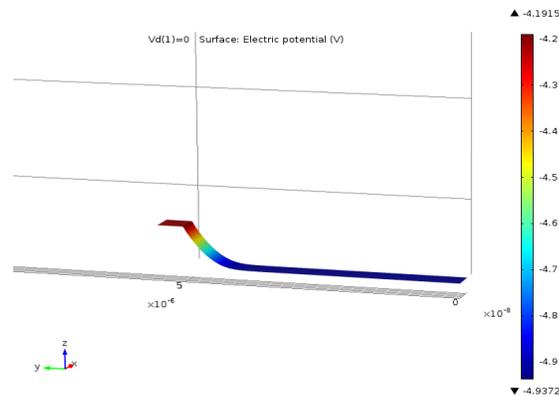
La figura 4.20 se muestra el termino generación, que como se discutió en el capítulo 2 depende del cambio del vector de Poynting. Se observa que la generación tiene lugar intensamente en la superficie del semiconductor tipo n, y conforme se avanza en el material disminuye. Este tipo de generación es suficiente para hacer que la carga minoritaria sobreviva y llegue a la zona de deplexión, ya que las dimensiones de la celda son mucho menores a la longitud de difusión de portadores minoritarios en Si.



**Figura 4.20.** Perfil de la generación en la parte superior de la celda solar (ventana, que generalmente es un semiconductor tipo n).

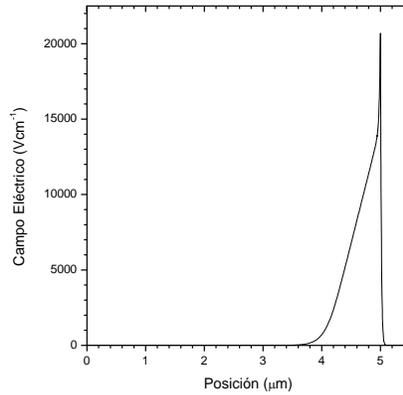
#### 4.4.2 Celda No Iluminada (Equilibrio)

Se simularon las propiedades físicas de una celda solar tipo PN en la situación de equilibrio, esto es, cuando no existen ondas electromagnéticas incidentes. La figura 4.21 muestra el potencial de contacto típico de la zona de deplexión. Se observa como el potencial eléctrico es mayor en la región del semiconductor tipo n y es por ello que la diferencia entre la carga de los dos semiconductores determina el comportamiento del potencial de contacto.



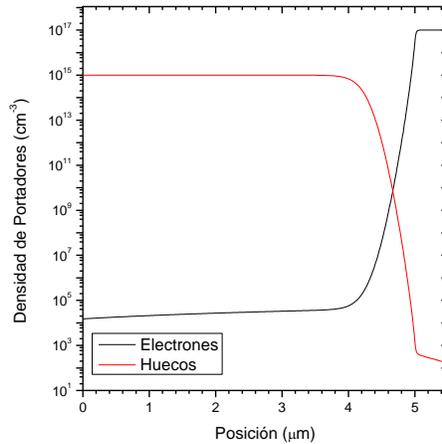
*Figura 4.21. Potencial eléctrico en la celda solar. En la situación de equilibrio, el cambio que se observa es el potencial de contacto de la zona de deplexión.*

La figura 4.22 muestra el campo eléctrico en la celda solar. Es apreciable que el eje de las  $y$  cambia de signo en virtud de la ecuación (1.22), también se observa que el campo eléctrico es cero en las regiones cuasi neutrales, lo que concuerda con la teoría discutida en el capítulo 3. La curva representa el campo eléctrico en la zona de deplexión debido al potencial de contacto.



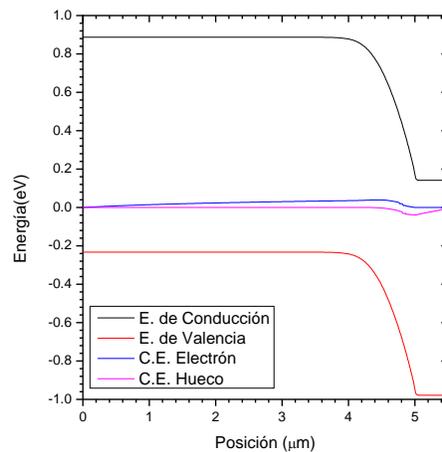
**Figura 4.22.** Campo eléctrico de la celda solar en la situación de equilibrio.

La figura 4.23 muestra la concentración de portadores en la situación de equilibrio. Se observa como el perfil de las curvas son similares al de la figura 4.13, sin embargo en este caso las funciones están sesgadas hacia la derecha. Esto se debe a que las dimensiones ni el perfil de dopado es simétrico como en el caso de la unión PN; los resultados numéricos coincidieron con las predicciones analíticas discutidas del capítulo 3.



**Figura 4.23.** Densidad de portadores de carga en la celda solar en la situación de equilibrio.

La figura 4.24 muestra el diagrama de bandas de la celda solar en equilibrio. Se observa cómo, de manera similar a la figura anterior, las curvas se encuentran sesgadas y no simétricas como las de la figura 4.14. La explicación es la misma que en la figura anterior. Se puede apreciar que las cuasi energías de electrones y huecos son prácticamente iguales, como es de esperarse; la separación mínima es debido a causas diversas como diseño no simétrico, geometría o perfiles de dopado.



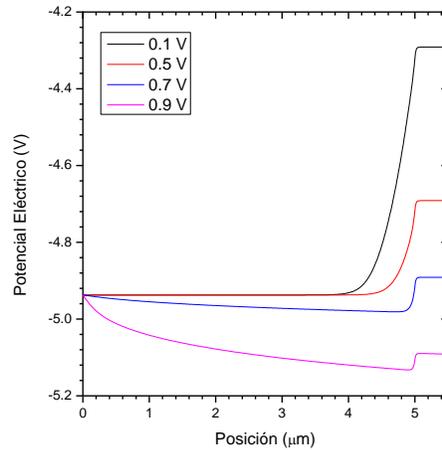
**Figura 4.24.** Diagrama de bandas de energía de la celda solar en la situación de equilibrio.

#### 4.4.3 Celda Iluminada (Fuera de Equilibrio)

Se simuló las propiedades físicas de una celda solar tipo PN en la situación fuera de equilibrio, esto es, cuando existen ondas electromagnéticas que inciden en el dispositivo y producen PEH. En este caso, se realizaron varias simulaciones para establecer un estudio comparativo del comportamiento de la celda a diferentes voltajes debido a variaciones en la intensidad de llegada.

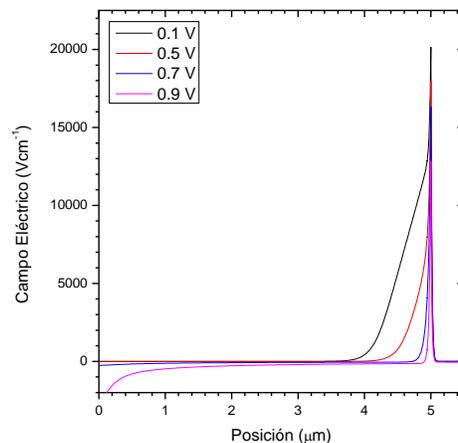
La figura 4.25 muestra el potencial eléctrico de la celda para diferentes voltajes: 0.1, 0.5, 0.7 y 0.9 V. Se observa como un aumento en el voltaje hace que el potencial cambie con respecto a la situación de equilibrio en las regiones cuasi neutras por lo que el campo eléctrico en estas regiones se vuelve más relevante (la ecuación de Shockley aproxima el campo eléctrico a cero en las regiones fuera de la zona de deplexión). Igualmente se observa como el aumento

de voltaje provoca una disminución del potencial de contacto en la zona de depleción, por lo que el flujo de corriente se facilita.



**Figura 4.25.** Potencial eléctrico en la celda solar en la situación fuera de equilibrio.

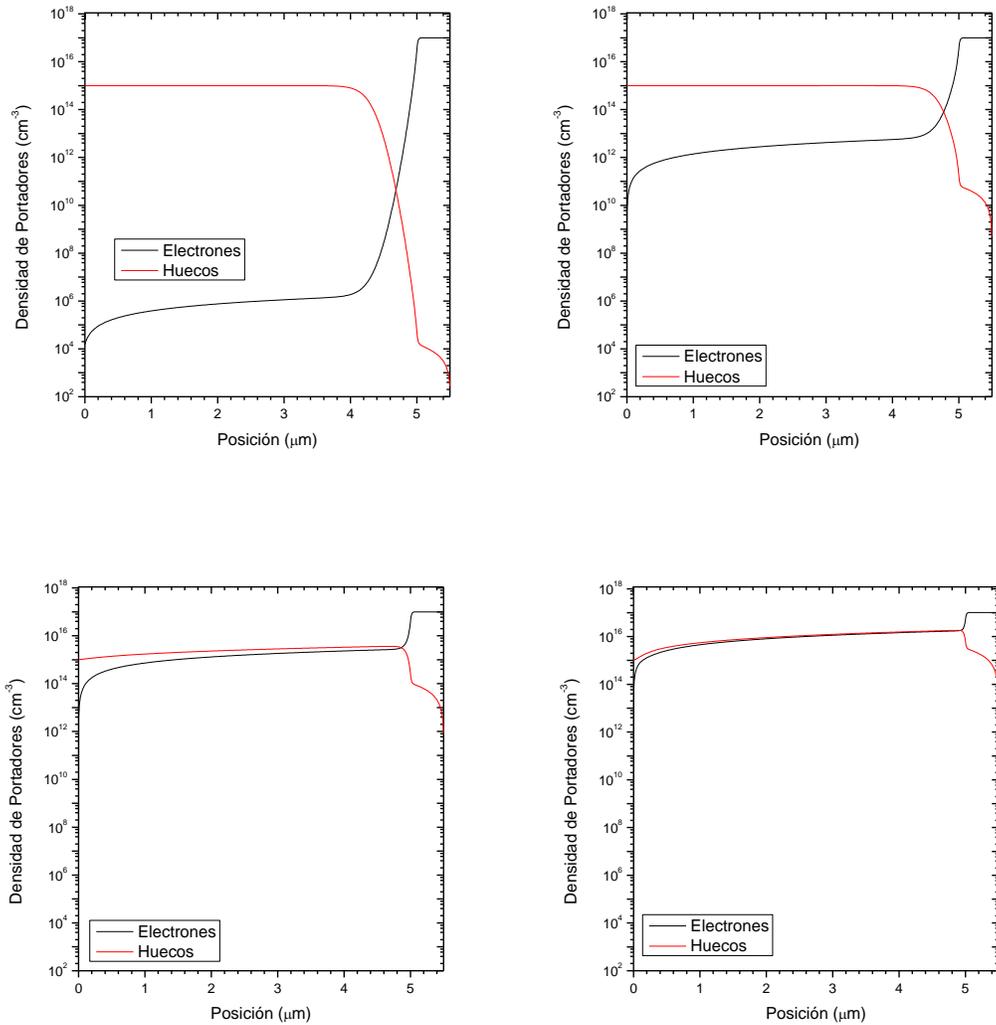
La figura 4.26 muestra el campo eléctrico en 1D para 0.1, 0.5, 0.7 y 0.9 V. En este caso es más evidente que el campo eléctrico de contacto en la zona de depleción disminuye al aumentar el voltaje, donde parece que el límite de voltaje es una delta de Dirac. El significado físico de esto es que, al aumentar demasiado la diferencia de potencial, el dispositivo dejaría de actuar como un elemento semiconductor rectificante y pasaría a comportarse como conductor, caso en el cual la ecuación (3.16) deja de ser válida.



**Figura 4.26.** Campo eléctrico de la celda solar en la situación fuera de equilibrio.

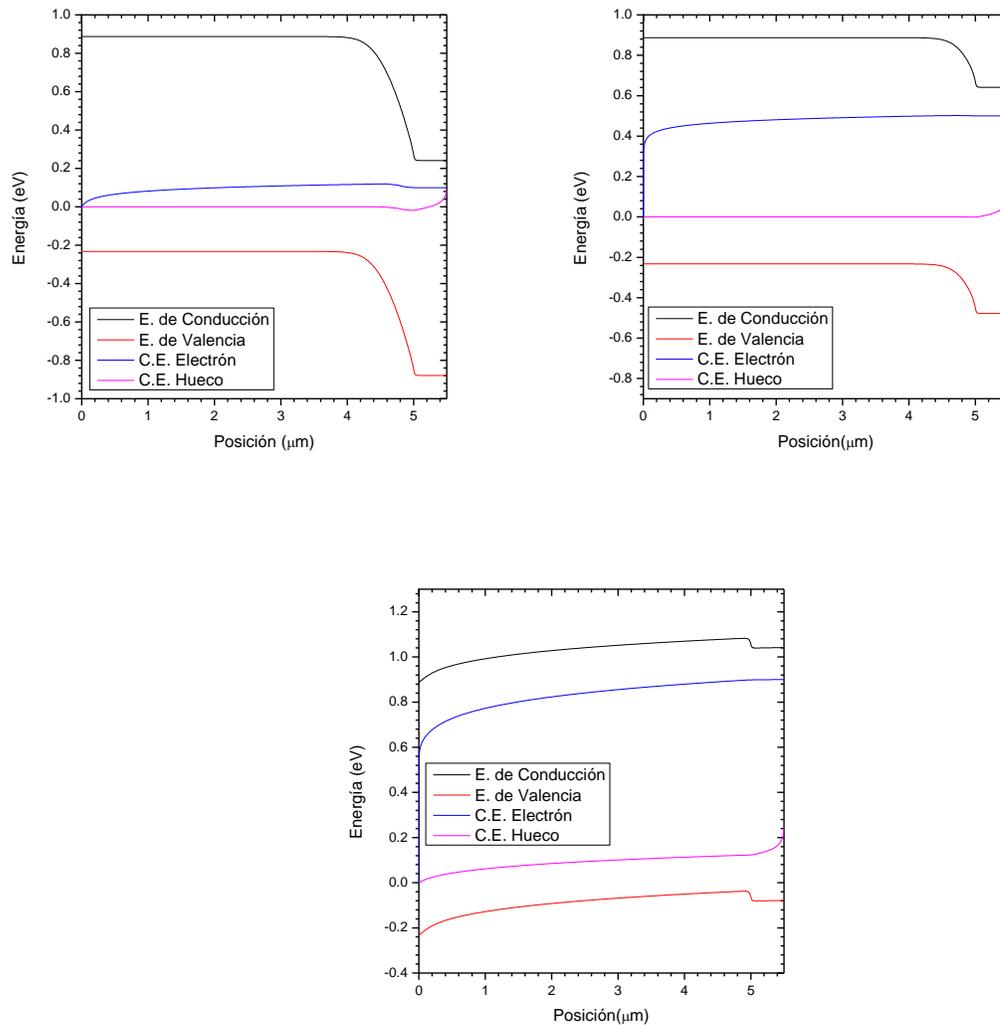
Se observa como el aumento de voltaje en la celda provoca que el campo eléctrico de contacto en la zona de depleción disminuya y, por el contrario, el campo eléctrico en las regiones cuasi neutrales aumente. Esto porque al haber un campo eléctrico disminuido, la corriente pasa con mayor facilidad, y por el modelo deriva-difusión una parte de esa corriente es debido al campo eléctrico. Empero, se observa que el campo eléctrico en estas regiones cuando el voltaje es menor a 1 V, es pequeño, por lo que la ecuación de Shockley funciona.

La figura 4.27 muestra la concentración de portadores en la situación fuera de equilibrio para 0.1, 0.5, 0.7 y 0.9 V. Se observa como el perfil sesgado es idéntico al de la sección 4.4.2, pero ahora un aumento en el voltaje del dispositivo provoca que aumenten los portadores minoritarios (inyección de portadores minoritarios) por lo que la curva de los portadores minoritarios aumenta conforme aumenta el voltaje; por el contrario, se observa que la concentración de portadores mayoritarios permanece cercana a su valor inicial  $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$  en p y  $1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$  en n. También se puede apreciar que, conforme aumenta el voltaje, la concentración portadores mayoritarios como minoritarios decae en los extremos.



**Figura 4.27.** Densidad de portadores de carga en la celda solar en la situación fuera de equilibrio: a) 0.1 V, b) 0.5 V, c) 0.7 V y d) 0.9 V.

La figura 4.28 muestra el diagrama de bandas de la celda solar en la situación fuera de equilibrio para 0.1, 0.5 y 0.9 V. Se observa que el aumento de voltaje produce una disminución en el cambio en la zona de depleción de la banda de conducción y banda de valencia, esto porque, como se discutió en las figuras 4.26 el potencial y el campo eléctrico disminuyen. Así mismo se observa que el aumento del voltaje produce separación entre las quasi energías de electrones y huecos cumpliéndose así la ecuación 3.12 discutida en el capítulo 3.



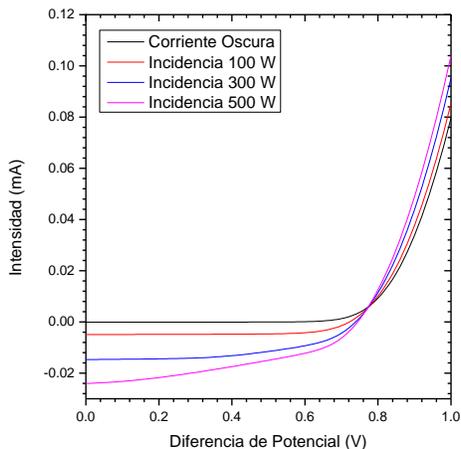
**Figura 4.28.** Diagrama de bandas de energía de la celda solar en la situación fuera de equilibrio: a) 0.1 V, b) 0.5 V y c) 0.9 V.

#### 4.4.4 Corrimiento de Curva Característica IV

Por último, se obtuvo la curva IV en la situación de corriente oscura de la celda y las curvas IV para diferentes potencias incidentes para la geometría base de la celda, mostrada en la figura 4.17. La simulación precisó la modificación de las condiciones de frontera mencionadas en 4.2 donde las potencias incidentes fueron 100 W, 300 W y 500 W. El orden de dichas magnitudes es superior a lo reportado en [55] y en general a la mayoría de situaciones de celdas en la realidad. La utilización de dichas magnitudes se fundamenta en que el estudio del

presente trabajo no posee un acoplamiento total de variables que demanda una complejidad importante debido al alto consumo de recursos computacionales; empero los resultados obtenidos son relevantes porque muestran el efecto fotovoltaico y el corrimiento de las curvas IV debido a un agente externo, objetivo esencial.

La figura 4.29 muestra los resultados de la simulación del efecto fotovoltaico y el corrimiento de curvas IV. Se observa como el aumento de potencia incidente hace que la curva correspondiente se recorra negativamente en el eje de la variable intensidad, fenómeno discutido en el capítulo 3. Así mismo se corrobora que diferentes magnitudes de la potencia incidente producen una potencia de entrega de celda solar diferente (área bajo la curva de la figura 4.29)



**Figura 4.29.** Curva IV de corriente oscura (negro), potencia incidente 100 W (rojo), potencia incidente 300 W (azul) y potencia incidente 500 W (violeta). Se observa que los resultados concuerdan con la figura 3.12 y 3.13.

## CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

Las conclusiones que se obtienen del presente trabajo son:

Mediante las simulaciones numéricas se puede describir el transporte de portadores de carga de un diodo y de una celda solar para el caso monocromático.

La variación de portadores con respecto al tiempo y la posición decrece de forma exponencial y se observa solo cuando el término de generación es el adecuado (suficiente para crear la cantidad de PEH necesarios antes de interrumpir la excitación óptica) y cuando el tiempo y la distancia concuerdan con lo establecido en (2.46-2.48).

Uno de los parámetros de mayor relevancia en la solución numérica de la propagación de ondas electromagnéticas es la longitud de onda, como se puede observar en las tablas 4.2 y 4.3. Se concluye que cuando la longitud de onda es mayor aumenta la propagación en el medio, lo cual es de esperarse en virtud de la ecuación (2.41)

Los parámetros de diseño en 2D (alto y ancho) influyen directamente en el desempeño eléctrico de una celda solar de Si monocristalino, por lo que se concluye que el análisis de dichos parámetros es un requerimiento básico para la optimización de celdas solares de unión PN.

La concentración de impurezas (aceptoras y donadoras) así como el cociente entre estas dos cantidades en una unión PN influyen directamente en el desempeño eléctrico de una celda solar de Si monocristalino.

El perfil de la concentración de portadores minoritarios de carga está determinado en su totalidad por los parámetros de diseño y la concentración de impurezas; en la unión PN la alta simetría se debió a que la zona de depleción se ubicó exactamente en la mitad del modelo, y la concentración de impurezas en N y P fueron exactamente iguales, por otro lado la asimetría de la celda solar se debió a que la zona de depleción se ubicó muy lejos del centro y la concentración de impurezas en N y P fueron diferentes.

La simulación numérica del potencial eléctrico y el campo eléctrico de la unión PN y la celda solar guardan una relación directa según lo establecido por la ecuación (1.22). En las situaciones fuera de equilibrio, las simulaciones arrojaron que el potencial y el campo eléctrico

en la zona de depleción se ven modificados por un agente externo que produce una diferencia de potencial, lo que permite u obstruye el paso de corriente eléctrica en el diodo. En el caso de la celda solar el campo eléctrico de contacto en la zona de depleción disminuye al aumentar el voltaje, donde el limite se asemeja a una delta de Dirac, por lo que se concluye que las simulaciones numéricas concuerda con lo discutido en el capítulo 3.

Se corrobora que las simulaciones numéricas de los diagramas de bandas de energía de la unión PN y la celda solar obedecen la relación  $\mathbf{E} = \frac{\nabla E}{q}$ , por lo que, numéricamente se concluye que un aumento de voltaje produce la separación del nivel de Fermi en dos cuasi-energías de Fermi y una disminución en el cambio en la zona de depleción de la banda de conducción y banda de valencia; un voltaje negativo (solamente para unión PN) provoca la aparición de cuasi-energías de Fermi y produce un alargamiento de la zona de depleción (situación cercana al breakdown).

Las curvas características IV, tanto de la unión PN como de la celda solar, poseen una alta sensibilidad en la modificación de las dimensiones ancho y alto (2D) así como en la concentración de impurezas donadoras y aceptoras. Se concluye que para el presente modelo, la optimización de las curvas IV es a través de las combinaciones y estudio de dichos parámetros.

El paquete computacional COMSOL Multiphysics es una herramienta sumamente útil y eficaz para resolver, por medio del método de elementos finitos, las ecuaciones diferenciales parciales que modelan la propagación de ondas electromagnéticas, propiedades eléctricas, el transporte de portadores de carga y el efecto fotovoltaico en semiconductores para celdas solares. En particular, se concluye que el tamaño de la partición de la malla (elementos finitos) es esencial en la calidad de las simulaciones: a menor tamaño de elemento finito mejores resultados, pero con el inconveniente de requerir un mayor tiempo de solución numérica. Además se corrobora la utilidad de soluciones numéricas en problemas de física e ingeniería.

Las perspectivas que se vislumbran del presente trabajo son:

Simular la solución de las ecuaciones diferenciales parciales por medio de elementos finitos de propiedades físicas diferentes a las eléctricas, ópticas o de transporte de una celda solar en las situaciones de equilibrio y fuera de equilibrio considerando varias longitudes de onda.

Acoplar todos los parámetros y variables de las ecuaciones diferenciales parciales, condiciones de frontera y condiciones iniciales de la física de propagación de ondas y la física de estado sólido de los materiales de la celda solar con el fin de obtener un modelo que se aproxime más a lo reportado experimentalmente.

Simular y estudiar la propagación de ondas electromagnéticas, propiedades eléctricas, el transporte de portadores de portadores y el efecto fotovoltaico en celdas solares y otros dispositivos electrónicos constituidas por semiconductores como CdS, PbS, GaAs y materiales que se estudian en el laboratorio de semiconductores del DIFUS.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Feynman, R. P., Leighton, R. B., & Sands, M. (2013). *The Feynman Lectures on Physics, Desktop Edition Volume I* (Vol. 1). Basic Books.
- [2] Babusiaux, D. (2007). *Oil and gas exploration and production: reserves, costs, contracts*. Editions Technip.
- [3] Chen, C. J. (2011). *Physics of solar energy*. John Wiley & Sons.
- [4] Prieto, P. A., & Hall, C. (2013). *Spain's photovoltaic revolution: the energy return on investment*. Springer Science & Business Media.
- [5] Fraas, L. M., & Partain, L. D. (2010). *Solar cells and their applications* (Vol. 236). John Wiley & Sons.
- [6] Ramírez-Rodríguez LP. Estudio de propiedades ópticas de nanoestructuras metálicas con distintas geometrías mediante simulaciones numéricas. Tesis de Doctorado (2014).
- [7] Padmanabhan Balaji. Modeling of Solar Cells. Tesis de Doctorado (2008).
- [8] P. D. DeMoulin and M. S. Lundstrom. Projections of GaAs solar-cell performance limits based on two-dimensional numerical simulation. *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 36, pp. 897- 905.
- [9] J. L. Gray, "A computer model for the simulation of thin-film silicon-hydrogen alloy solar cells," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 36, pp. 906-912.
- [10] Malm, U., & Edoff, M. (2009). 2D device modelling and finite element simulations for thin-film solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 93(6), 1066-1069.
- [11] Zhu, L., Shao, G., & Luo, J. K. (2012). Numerical study of metal oxide Schottky type solar cells. *Solid State Sciences*, 14(7), 857-863.
- [12] Walker Alexander W. Bandgap engineering of multi-junction solar cells using nanostructures for enhanced performance under concentrated illumination. Tesis de Doctorado (2013).
- [13] Sols, K. Simulation of solar cell losses depending on cell design. Tesis de Maestría (2010).
- [14] Grahn, H. T. (1999). *Introduction to semiconductor physics*. Singapore: World Scientific.
- [15] Solymar, L., Walsh, D., & Syms, R. R. (2014). *Electrical properties of materials*. Oxford University Press.

- [16] Albella, J. M., & Martínez-Duart, J. M. (1996). *Fundamentos de electrónica física y microelectrónica*. Addison-Wesley Iberoamericana.
- [17] Boylestad, R. L., & Nashelsky, L. (2003). *Electrónica: teoría de circuitos y dispositivos electrónicos*. Pearson Educación.
- [18] Malvino, A. (1995). *Principios de Electrónica*. 4 Edición.
- [19] Yacobi, B. G. (2003). *Semiconductor materials: an introduction to basic principles*. Springer Science & Business Media.
- [20] Kittel, C., McEuen, P., & McEuen, P. (1976). *Introduction to solid state physics* (Vol. 8). New York: Wiley.
- [21] Singh, J., & Miguel, E. A. (1997). *Dispositivos semiconductores*. McGraw-Hill.
- [22] Grundmann, M. (2006). *The physics of semiconductors*. by WT Thodes, HE Stanley, R. Needs:(Springer, Berlin, 2010).
- [23] Landau, L. D., Lifshitz, E. M., & Pitaevskii, L. P. (1986). *Física estadística* (Vol. 9). Reverte.
- [24] Kitai, A. (2011). *Principles of solar cells, LEDs and diodes: the role of the PN junction*. John Wiley & Sons.
- [25] Li, S. S. (2007). *Semiconductor physical electronics*. Springer Science & Business Media.
- [26] Zeman, M. (2007). *Introduction to photovoltaic solar energy*. Delft University of Technology.
- [27] Reitz, J. R., Milford, F. J., & Christy, R. W. (2008). *Foundations of electromagnetic theory*. Addison-Wesley Publishing Company.
- [28] Jackson, J. D., & Jackson, J. D. (1962). *Classical electrodynamics* (Vol. 3). New York etc.: Wiley.
- [29] Shalíмова, K. V., & Grdiam, A. (1975). *Física de los Semiconductores*.
- [30] Schwartz, M. (1972). *Principles of Electrodynamics*.
- [31] Van Zeghbroeck, B. (2004). *Principles of semiconductor devices*. Colorado University.
- [32] McQuarrie, D. A. (1976). *Statistical mechanics*. Harper & Row.
- [33] Kubo, R., Toda, M., Saito, N. (1983). *Statistical Physics I*. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg.
- [34] Reif, F. (2009). *Fundamentals of statistical and thermal physics*. Waveland Press.
- [35] D. teer Har. (1995). *Elements of Statistical Mechanics*. Butterworth-Heinmann. 3 Edición.

- [36] Sze, S. M., & Ng, K. K. (2006). *Physics of semiconductor devices*. John Wiley & Sons.
- [37] Cohen-Tannoudji, D., & Diu and F, B. (1977). Laloe: Quantum Mechanics. *Volume One. Hermann*.
- [38] Würfel, P., & Würfel, U. (2009). *Physics of solar cells: from basic principles to advanced concepts*. John Wiley & Sons.
- [39] Ng, K. K. (2002). *Complete guide to semiconductor devices*. J Wiley & Sons.
- [40] N. D. Arora, J. R. Hauser, and D. J. Roulston, "Electron and Hole Mobilities in Silicon as a Function of Concentration and Temperature," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 29, no. 2, pp. 292–295, 1982.
- [41] N. H. Fletcher, "The High Current Limit for Semiconductor Junction Devices," *Proceedings of the IRE*, vol. 45, no. 6, pp. 862–872, 1957.
- [42] J. M. Dorkel and Ph. Leturcq, "Carrier Mobilities in Silicon Semi-empirically Related to Temperature, Doping and Injection Level," *Solid-State Electronics*, vol. 24, no. 9, pp. 821–825, 1981.
- [43] Liboff, R. L. (2003). *Introductory quantum mechanics*. Addison-Wesley.
- [44] Mishra, U., & Singh, J. (2007). *Semiconductor device physics and design*. Springer Science & Business Media.
- [45] Smestad, G. P. (2002). *Optoelectronics of solar cells*. SPIE press.
- [46] Markvarta, T., & Castañer, L. (2011). Principles of solar cell operation. *Practical Handbook of Photovoltaics: Fundamentals and Applications*, 7.
- [47] Fraas, L. M., & Partain, L. D. (2010). *Solar cells and their applications* (Vol. 236). John Wiley & Sons.
- [48] Tress., W. (2014). *Organic solar cells*. Springer.
- [49] Smestad, G. P. (2002). *Optoelectronics of solar cells*. SPIE press.
- [50] Matsumoto, Y., & del Estado Sólido, S. D. E. (2011). Celdas Solares de Silicio: Fundamento y Tendencia. *Div. Ciencias e Ing. Univ. Quintana Roo*, 44.
- [51] Kadri, R., Andrei, H., Gaubert, J. P., Ivanovici, T., Champenois, G., & Andrei, P. (2012). Modeling of the photovoltaic cell circuit parameters for optimum connection model and real-time emulator with partial shadow conditions. *Energy*, 42(1), 57-67.
- [52] Saloux, E., Teyssedou, A., & Sorin, M. (2011). Explicit model of photovoltaic panels to determine voltages and currents at the maximum power point. *Solar Energy*, 85(5), 713-722.
- [53] Green, M. A. (1982). *Solar cells: operating principles, technology, and system applications*.
- [54] R.J. van Overstraeten, R.P. Mertens, Physics. (1986). *Technology and Use of Photovoltaics*. Adam Hilger Ltd.

[55] COMSOL, RF. (2006). Module User's Guide.

[56] G. Vuye et al.(1993). Temperature dependence of the dielectric function of silicon using in situ spectroscopic ellipsometry, *Thin Solid Films* 233, 166-170.

[57] Ma, T., Yang, H., & Lu, L. (2014). Development of a model to simulate the performance characteristics of crystalline silicon photovoltaic modules/strings/arrays. *Solar Energy*, 100, 31-41.

[58] Tonooka, K., Bando, H., & Aiura, Y. (2003). Photovoltaic effect observed in transparent p–n heterojunctions based on oxide semiconductors. *Thin Solid Films*, 445(2), 327-331.