



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"

Universidad de Sonora

División de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Investigación en Física

Ingeniería en Tecnología Electrónica

Tesis titulada:

"Caracterización óptica por simulación de estructura de celda solar
CdS/PbS"

Dirigida por:

M. C. Rafael A. Sabory García

Dr. Armando Gregorio Rojas Hernandez

Presenta:

Arturo III Espinoza Duarte

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

Para este trabajo de tesis, quiero agradecer profundamente a personas que por su gran apoyo este proyecto fue llevado a cabo. Mi madre, que con su aliento me impulsaba adelante cuando más estancado me sentí en la realización de dicha empresa; ella que con sus interminables fuerzas pudo sostenerme.

Quiero agradecer a mis directores por el apoyo académico, constante revisión y por estar presentes cuando surgía la duda durante el desarrollo de este gran proyecto.

Quiero agradecer a mis amigos y amigas que me alentaron a seguir y que, junto conmigo, sacrificamos varios momentos de convivencia y actividades. Por la comprensión de esa falta de presencia y cambios de humor durante la realización del proyecto.

GRACIAS.

Dedicatoria

A mi madre por su grande amor...

Lista de figuras

I.	Espectro electromagnético y rango de luz visible	10.
II.	Irradiancia espectral a diferentes longitudes de onda λ	12.
III.	Bandas de energía de diferente clasificación de materiales	13.
IV.	Diagrama esquemático de los diferentes tipos de semiconductores	16.
V.	Band gap directo y band gap indirecto	20.
VI.	Tipos de banda de energía: (a)Straddled o tipo I, (b)Staggered y (c)Broken gap	21.
VII.	Defectos puntuales y dislocaciones en el enlace de semiconductores	23.
VIII.	Densidad de corriente de difusión	26.
IX.	Densidad de corriente de arrastre	27.
X.	Absorción del espectro solar debido a dos materiales con band gap distinto	29.
XI.	Circuito equivalente de una celda solar ideal	30.
XII.	Curva característica I-V de celda solar bajo iluminación y en oscuridad	30.
XIII.	Circuito equivalente de celda solar con sus respectivas resistencias parásitas	31.
XIV.	Zona de agotamiento en unión P-N	32.
XV.	Índices de refracción y coeficientes de extinción de la hetero-estructura	35.
XVI.	Estructura de celda solar CdS/PbS	36.
XVII.	Cuadratura en la Gráfica I-V representando el Fill Factor	41.
XVIII.	Espectro de transmisión debido a la reflexión de todas las capas y pérdidas por absorción de las capas ITO y CdS	42.
XIX.	Componente de desvío $\eta_{drift}(\lambda)$ como función de la longitud de onda λ a diferentes valores del ancho de la zona de deplexión W	43.
XX.	Componente de difusión $\eta_{dif}(\lambda)$ como función de la longitud de onda λ a diferentes grosores de la capa PbS (d_{pbS})	43.

Lista de ecuaciones

I.	Energía de un fotón a una longitud de onda particular	10.
II.	Energía de Fermi en semiconductor intrínseco	14.
III.	Concentración intrínseca de portadores	15.
IV.	Función de distribución de Fermi-Dirac	18.
V.	Densidad de estados en un metal	21.
VI.	Densidad de estados en semiconductor tipo n	21.
VII.	Densidad de estados en semiconductor tipo p	21.
VIII.	Longitud de difusión de portadores	25.
IX.	Densidad de corriente de difusión	26.
X.	Densidad de corriente de arrastre	27.
XI.	Constante de propagación en espacio libre	33.
XII.	Constante de propagación en un medio sin pérdidas	33.
XIII.	Constante de propagación en un medio con pérdidas	34.
XIV.	Relación entre coeficientes de absorción y extinción	34.
XV.	Probabilidad de colección de portadores	35.
XVI.	Ecuación de Fresnel	37.
XVII.	Ecuación de Fresnel para materiales eléctricamente conductivos	37.
XVIII.	Coefficiente de transmisión	37.
XIX.	Eficiencia cuántica interna: componente de arrastre	38.
XX.	Eficiencia cuántica interna: componente de difusión	38.
XXI.	Ecuación para curva I-V	38.
XXII.	Voltaje de circuito abierto	39.
XXIII.	Corriente en la oscuridad para diodo ideal	40.
XXIV.	Factor de llenado	40.
XXV.	Eficiencia total de la celda solar	41.

Índice

Agradecimientos	2.
Dedicatoria	3.
Lista de figuras	4.
Lista de ecuaciones	5.
Capítulo 1	8.
1. Introducción	8.
Capítulo 2	9.
2. Aspectos teóricos de semiconductores	9.
2.1. Propiedades de la luz	9.
2.2. Masa del aire	11.
2.2.1. AM1.5 y AM0	11.
2.3. Semiconductores	12.
2.3.1. Materiales Intrínsecos	13.
2.3.2. Materiales Extrínsecos	15.
2.3.3. Niveles de energía	17.
2.3.3.1. Energía de Fermi	18.
2.3.3.2. Función de distribución de Fermi	18.
2.3.3.3. Band Gap	19.
2.3.3.3.1. Band Gap Directo e Indirecto	19.
2.3.3.4. Diagrama de bandas de hetero-estructuras	20.
2.3.4. Densidad de estados	21.
2.3.5. Concentración de portadores	21.
2.3.6. Generación y recombinación de portadores en uniones P-N	22.
2.3.6.1. Tipos de recombinación	23.
2.3.7. Tiempo de vida de portadores minoritarios en un semiconductor	25.
.	25.
2.3.8. Longitud de difusión	25.

2.3.9.	Densidad de corriente de difusión	26.
2.3.10.	Densidad de corriente de arrastre	27.
Capítulo 3		28.
3.1.	Celdas solares	28.
3.2.	Circuito equivalente de una celda solar	29.
3.3.	Zona de agotamiento de una unión n-p	31.
3.4.	Índice de refracción, coeficiente de absorción y constante de propagación	33.
3.5.	Probabilidad de colección de portadores	35.
3.6.	Coeficiente de transmisión	37.
3.7.	Eficiencia cuántica interna	37.
3.8.	Curva JV	38.
3.9.	Voltaje de circuito abierto	39.
3.10.	Densidad de corriente en corto circuito y densidad de corriente en oscuridad	39.
3.11.	Factor de llenado o Fill Factor	40.
3.12.	Eficiencia total	41.
Capítulo 4 Resultados		42.
Capítulo 5 Conclusiones		43.
Referencias		45.

Capítulo 1

1. Introducción

En los presentes años el estudio de materiales se ha entendido y extendido debido al arduo estudio del material semiconductor, en gran medida del Silicio (Si) y del Germanio (Ge) para diodos y transistores, el cual se ha puesto a prueba en una amplia gama de pruebas por presentar propiedades conductivas adecuadas a altas temperaturas y como aislante a bajas, dando lugar al conocimiento estandarizado de algunos parámetros a tomar en cuenta en un material semiconductor al ser analizado.

Algunos materiales han sido utilizados para diseñar componentes electrónicos de alta importancia; dichos materiales son utilizados para la provisión de energía eléctrica como en satélites con requerimientos estrictos como: menor peso, mayor eficiencia, mayor confiabilidad y alta resistencia a la radiación, siendo las celdas solares los principales componentes de estos sistemas [2] [22]. Uno de los parámetros más importantes a investigar y tratar de incrementar es la eficiencia de estos componentes.

Se dice que un material o dispositivo tiene propiedades fotovoltaicas cuando es expuesto a la luz solar o artificial y éste la absorbe para transformar la energía de los fotones en energía eléctrica en un proceso conocido como “efecto fotoeléctrico” [22].

En este trabajo teórico nos interesa especialmente los semiconductores CdS y PbS para hacer un arreglo de hetero-estructura de celda solar (Figura 16) los cuales por sus brechas de banda o band gaps aprovechan gran parte del espectro solar. El fin de este trabajo trata de simular la estructura bajo sus parámetros ópticos, como el índice de refracción, los coeficientes de absorción y de extinción, el espectro de transmisión basado en el cálculo de reflexión, absorción y transmisión por todas las capas, como también su eficiencia cuántica interna basado en la recombinación en la superficies delantera y trasera de la capa PbS y la recombinación en la región de

carga espacial. Este estudio ignora el efecto del contacto metálico trasero Al. Lo anterior basado en las condiciones de iluminación AM1.5 (iluminación terrestre) a 300°K. El modelo de la hetero-estructura está compuesto por vidrio, ITO (óxido de indio y estaño), CdS (sulfuro de cadmio), PbS (sulfuro de plomo) y Al (aluminio).

Una de las eficiencias alcanzadas por esta hetero-estructura, a nivel teórico, es del 4.13% obtenida bajo la variación del grosor de la capa efectiva (absorbente) PbS de alrededor de $2\mu m$ [6].

Capítulo 2

2. Aspectos Teóricos de Semiconductores

2.1. Propiedades de la luz

El espectro electromagnético describe a la luz como una onda que tiene una longitud de onda (λ) particular. La descripción de la luz como una onda fue ganando aceptación en 1800 cuando los experimentos de Thomas Young, Francois Arago y Augustin Jean Fresnel mostraron efectos de interferencia en los haces de luz indicando que la luz está hecha de ondas. La luz que vemos cotidianamente, llamada luz visible, es sólo una parte del espectro electromagnético abarcando sólo una pequeña porción del rango total de longitudes de onda (400nm a 750nm, aproximadamente).

Un paquete de ondas, llamado fotón, está definido como una colección de ondas que puede interactuar como una partícula (espacialmente localizado) o como una simple onda. A esta concepción generalizada se le llama “dualidad onda-partícula”.

Es importante hacer énfasis en este hecho ya que, como veremos más adelante en este trabajo, en las capas de la hetero-estructura de la celda solar, el coeficiente de extinción como el de absorción se ven afectados a diferentes longitudes de onda. A su vez, el coeficiente de extinción conforma el índice de refracción del material y se

ve involucrado en el cálculo de la eficiencia cuántica, el coeficiente de transmisión y otros parámetros a considerar [6].

En la Figura 1 podemos apreciar el espectro electromagnético total.

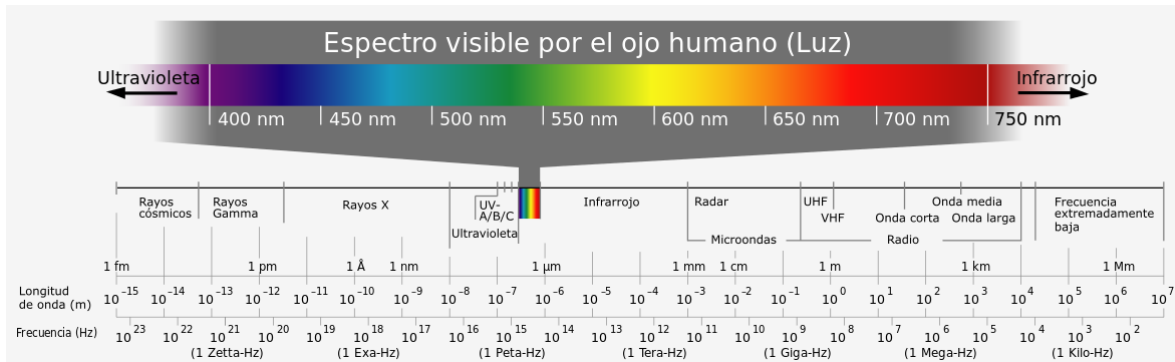


Figura [1]. Espectro electromagnético y rango de luz visible

La expresión de la energía de un fotón a una longitud de onda particular, está dada por:

$$E = \frac{hc}{\lambda} \text{ joules} \cdot m = 1240/\lambda \quad (1)$$

Donde h es la constante de planck en joules/s , c la velocidad de la luz en m/s y λ está dado en μm .

Para determinar la interacción de la luz solar con los dispositivos fotovoltaicos o algún otro objeto se toman en cuenta cuatro características clave:

- El contenido espectral de la luz incidente
- Densidad de potencia radiada del sol
- El ángulo con el que incide la radiación solar al dispositivo, y
- La energía radiante del sol a lo largo de un año o día para una superficie particular

Cuando se trata del intercambio de partículas como fotones o electrones la unidad comúnmente usada es el electrón-Volt (eV). Un electrón-Volt es la energía requerida

para excitar a un electrón con 1 Volt; por lo tanto, un fotón con energía de: $1eV = 1.602 \times 10^{-19} J$ [4].

2.2. Masa del aire

2.2.1. AM1.5G y AM0

Representa la proporción de atmosfera que la luz debe traspasar antes de llegar a la tierra, relacionada con la longitud de trayectoria (Figura 2). Dicha trayectoria puede ser calculada en base a ciertas condiciones descritas debajo [29].

El estándar AM1.5G representa la irradiancia espectral solar en la superficie de la tierra desde una orientación específica, bajo las condiciones atmosféricas dadas en dicha orientación, la cual provee una fuente común de base de datos para evaluar espectralmente algún material fotovoltaico (La G establece una representación global e incluye ambas: radiación directa y difusa; AM1.5D incluye sólo radiación directa).

Las condiciones atmosféricas específicas son:

- Temperatura, presión, densidad de aerosol rural, densidad de especies moleculares especificadas en 33 capas
- Una masa de aire absoluta de 1.5 (ángulo solar en su cenit 48.19° s)
- La turbiedad de Angstrom (base e) a 500nm de 0.084 (0.084 es el espesor óptico de aerosol)
- Columna total de vapor de agua equivalente a 1.42cm
- Columna total de ozono equivalente a 0.34cm

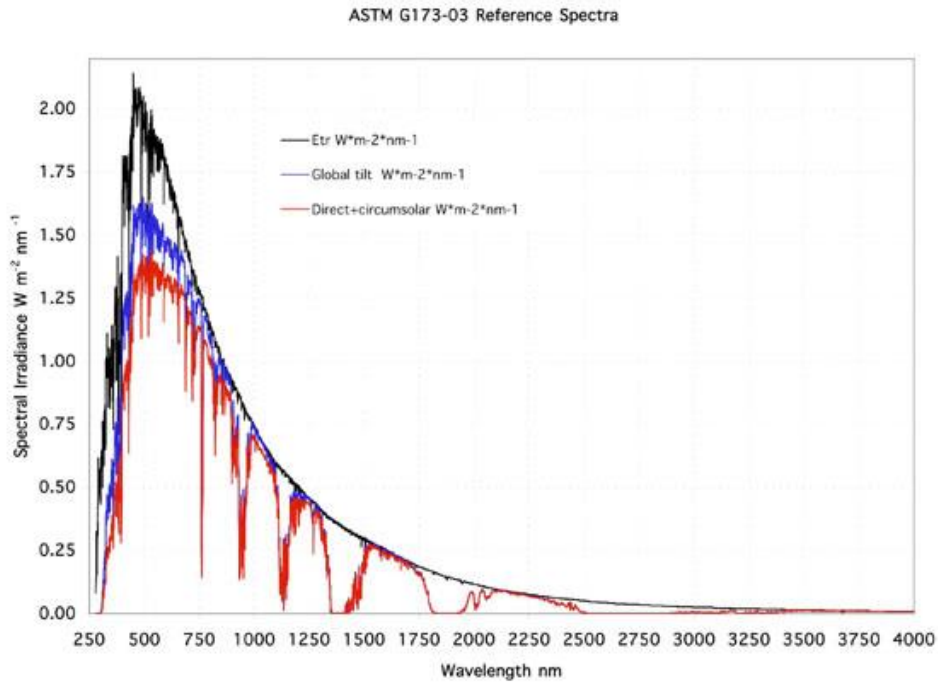


Figura [2]. Irradiancia espectral a diferentes longitudes de onda (λ) [5].

Cabe notar que, en el estándar AM1.5, las consideraciones fueron seleccionadas bajo las condiciones de tomar en cuenta los 48 estados continuos de U.S.A. sobre un periodo de un año. De igual manera, el ángulo de inclinación dado es respecto al promedio de la latitud de los Estados Unidos. Sin embargo, este estándar sirve para caracterizar un dispositivo fotovoltaico y comparar resultados con otras investigaciones [5].

2.3. Semiconductores

Los materiales pueden ser categorizados en conductores, semiconductores y aislantes por su capacidad de conducir corriente (Figura 3).

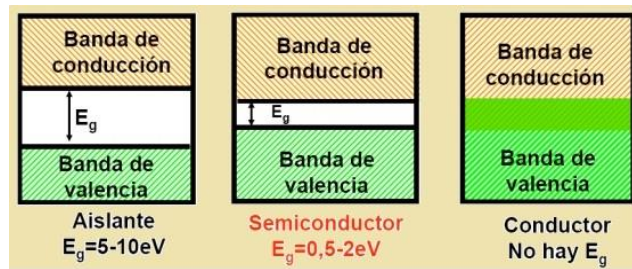


Figura [3]. Bandas de energía de diferente clasificación de materiales [26].

Los semiconductores forman un grupo de materiales que presentan un comportamiento intermedio entre conductores y aislantes; éstos en estado puro y a bajas temperaturas presentan una conductividad relativamente baja.

Los materiales semiconductores cuentan con un coeficiente negativo de temperatura; esto es que al aplicarle calor al material incrementa su conductividad. Conforme se eleva la temperatura los electrones rompen con facilidad el enlace covalente del material contribuyendo así al número de portadores libres (corriente). A diferencia de los materiales semiconductores, en los materiales conductores aumenta su resistividad al aplicarles calor (con coeficiente de temperatura positivo) [8] [25].

Frecuentemente se hace uso de las combinaciones (dopaje) que forman los diferentes materiales, por ejemplo, los del grupo II con VI (CdS) o III con V (GaAs). Así pues, existe una alta gama de semiconductores de diferentes elementos y grupos variando sus propiedades entre semiconductores [3].

Como se mencionó antes, el silicio y germanio son los materiales semiconductores más estudiados hoy día formando la base para la investigación y diseño de circuitos integrados, diodos, transistores, chips, celdas solares, etcétera.

2.3.1. Materiales Intrínsecos

El término intrínseco se aplica a cualquier material semiconductor que haya sido cuidadosamente refinado para reducir el número de impurezas a un nivel muy bajo; lo más puro posible que se pueda fabricar utilizando tecnología actual.

La concentración de portadores de un semiconductor puro (sin dopar) está determinada por la excitación termal de electrones de la banda de valencia a la banda de conducción. Un semiconductor intrínseco tiene una banda de valencia llena de huecos y electrones (recombinados) y una banda de conducción vacía a temperatura 0°K.

Cuando la temperatura incrementa en el material, una pequeña fracción de electrones en la banda de valencia es excitada para pasar a la banda de conducción para ahora ser electrones libres, de tal manera que el número de huecos (h^+) en la banda de valencia coincide con el número de electrones (e^-) en la banda de conducción. Entonces, los materiales tales que $e^- = h^+$ son llamados materiales intrínsecos. Para que la concentración de electrones coincida con la de huecos requiere que la energía de Fermi esté dentro de la banda prohibida.

Otra característica significativa del material es la movilidad relativa (μ_n) de los portadores libres en el material. Este factor es importante porque nos dice los tiempos de respuesta de dispositivos electrónicos ya en campo. Mientras mayor sea la facilidad de los electrones libres para moverse a través del material, mayor respuesta en el tiempo tendrá el dispositivo [8].

La ecuación para determinar la energía de fermi en un semiconductor intrínseco está dada por:

$$E_F = E_V + \frac{1}{2}E_g + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_V}{N_C} \quad (2)$$

Donde E_F es la energía de fermi (eV), E_g es la brecha de banda (eV), N_V y N_C son las densidades efectivas de estados (cm^{-3}) y $k = 8.6173324(78) \times 10^{-5} eV k^{-1}$ es la constante de Boltzmann.

$E_V + \frac{1}{2}E_g$ representa la energía intermedia (mid-gap) del bandgap completo y la energía de Fermi de un semiconductor intrínseco es aproximadamente el mid-gap. La dependencia de temperatura en la energía de Fermi intrínseca es débil debido a la dependencia, débil también, logarítmica; ya que el logaritmo cambia poco con $\frac{N_V}{N_C}$

[11]. Usando la estadística de Boltzmann la energía de Fermi nos permite determinar la concentración intrínseca de portadores que está dado por:

$$n_i = \sqrt{N_V N_C} e^{\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)} \text{ (cm}^{-3}\text{)} \quad (3)$$

2.3.2. Materiales Extrínsecos

Un material semiconductor extrínseco puede ser formado por un material intrínseco, añadiendo a este último átomos de impureza en el cristal en un proceso llamado dopaje. Para explicar esto tomemos de ejemplo cualquier elemento del grupo IV de la tabla periódica; que puede ser: carbono (C), silicio (Si) y germanio (Ge) (que son los más comunes), estaño (Sn) y plomo (Pb), que por tener cuatro electrones de valencia está clasificado en dicho grupo. En la forma cristalina, cada átomo comparte electrones con el átomo vecino, en este estado es un material intrínseco. Por otro lado, los elementos de la tabla periódica del grupo III tienen tres electrones de valencia: Boro (B), Aluminio (Al), Galio (Ga), Indio (In) y Talio (Tl). Cuando una pequeña porción de átomos del grupo III de la tabla es añadido a los del grupo IV (menos de 1 en 10^6) [13] queda insuficiencia de enlaces covalentes en cada átomo dejando un hueco en cada enlace compartido que contribuye al proceso de conducción a determinadas temperaturas. Entonces los dopajes en materiales que creen huecos son conocidos como aceptores del tipo-P, dado que crean una carga positiva de portadores.

Por el hecho de que, en dicho caso, el hueco aceptará fácilmente a un electrón se dice que “Las impurezas difundidas que cuentan con tres electrones de valencia se denominan átomos aceptores” [16]. Entonces al hueco dejado por un electrón se le puede introducir otro electrón que a su vez dejará otro hueco en la banda de valencia y quedará cargado positivamente ya que $p \gg n$.

De manera análoga, si dopamos un material del grupo IV de la tabla con uno del grupo V, ahora en los enlaces covalentes queda sobrando un electrón en el material,

este material es conocido como donador (tipo-n) y contribuye a una carga negativa de portadores.

Dado que un átomo de impureza se insertó en el material, este cedió un electrón que se puede decir que es “libre” en el material dopado: “Las impurezas difundidas que cuentan con cinco electrones de valencia se denominan átomos donadores”. Así, con muy poca energía el quinto electrón del enlace se separa del átomo y pasa a la banda de conducción; entonces se dice que $n \gg p$.

Cabe mencionar que los materiales semiconductores del grupo IV tienen la propiedad de actuar como aceptores o donadores dependiendo de si son dopados con los elementos del grupo III o V, respectivamente. Las impurezas son conocidas como “impurezas anfóteras (sustancia que puede reaccionar ya sea como un ácido o como una base dado su pH (Potencial de hidrógeno))”.

Lo anteriormente explicado puede observarse mejor en la Figura 4:

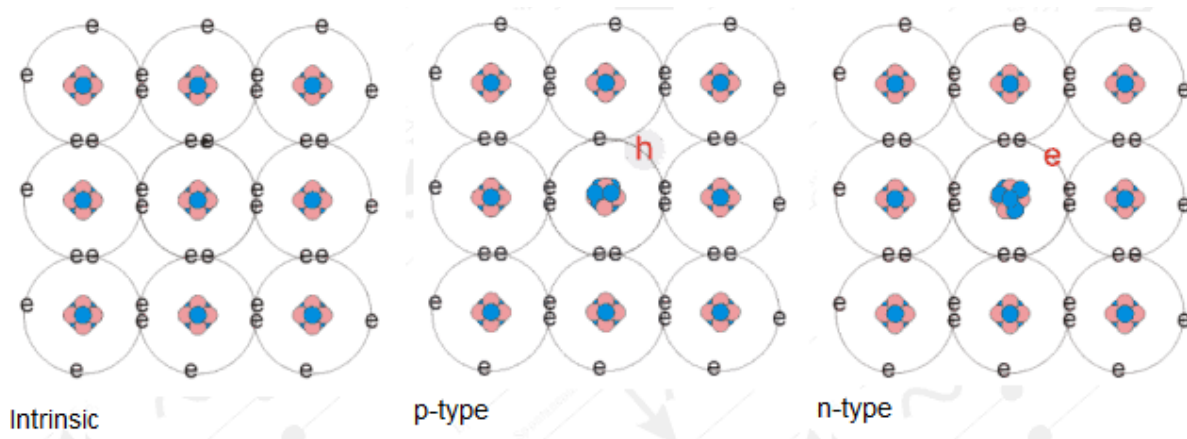


Figura [4]. Diagrama esquemático de los diferentes tipos de semiconductores [13].

En donde en un material tipo-p sobra un hueco y en un material tipo-n sobra un electrón, en cada enlace de la estructura cristalina.

2.3.3. Niveles de energía

Los niveles de energía asociados con cada capa son diferentes según el elemento o material del que se trate. En general:

“Cuanto más alejado está un electrón del núcleo, mayor es su estado de energía y cualquier electrón que haya abandonado a su átomo padre tiene un estado de energía mayor que todo electrón que permanezca en la estructura atómica [8]”.

Conforme los átomos del material se acercan entre sí, enlaces covalentes que forman la red cristalina, los electrones de cada átomo comparten entre ellos ligeras diferencias de energía lo que provoca una expansión de los niveles de energía fijos discretos de los electrones de valencia. Esto quiere decir que hay un nivel de energía mínimo asociado con electrones que se encuentran en la banda de conducción y un nivel de energía máximo de electrones enlazados en la capa de valencia del átomo. Para que un electrón de la banda de valencia sea portador libre debe cruzar la brecha de energía que se encuentra entre estos niveles mínimos y máximos (como se ha mencionado en el apartado 2.3.1.). Esta brecha de energía es diferente para cada compuesto semiconductor.

Esta diferencia de energía nos revela la sensibilidad a los cambios de temperatura de cada material. Mientras menor sea la brecha de energía los electrones pueden pasar más fácilmente a la banda de conducción (Figura 3).

Dicha brecha de energía también puede revelarnos la forma de disipación de energía de los electrones cuando pasan de la banda de conducción a la banda de valencia. Por ejemplo, cuanto más ancha sea la brecha de energía del material mayor es la posibilidad de que la energía se libere en forma de ondas luminosas.

En el caso de los materiales conductores el traslape de sus bandas de valencia y conducción provoca que toda la energía adicional absorbida por los electrones se disipe en forma de calor. En el caso de los LED's (Diodos emisores de luz, por sus siglas en inglés) el nivel de dopado y los materiales seleccionados determinan el color resultante emitido.

En el caso de un cristal los niveles de energía no coinciden con los niveles de energía en átomos de gas, o bien, átomos aislados. Dado que en estos se pueden despreciar las interacciones de unos átomos con otros.

2.3.3.1. Energía de Fermi

La energía de Fermi es un concepto que tiene muchas aplicaciones en la teoría del orbital, en el comportamiento de los materiales semiconductores y en la física del estado sólido en general.

Es la energía del nivel más alto ocupado por un sistema cuántico a temperatura cero. Esta energía es importante a la hora de entender el comportamiento de partículas como los electrones.

Se puede decir que la superficie de Fermi divide los estados electrónicos ocupados de los que permanecen libres [15].

Cuando un sistema posee varios electrones, estos ocuparán niveles de energía mayores a medida que los niveles inferiores se van llenando.

2.3.3.2. Función de distribución de Fermi

Puesto que los electrones son fermiones, partículas con espín semi-entero que obedecen al principio de exclusión de Pauli, lo cual imposibilita la existencia de dos electrones en el mismo estado [15], la función de distribución está dada por la distribución de Fermi-Dirac:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/KT} + 1} \quad (4)$$

Esta distribución determina, bajo condiciones de equilibrio, la probabilidad de que un estado, disponible a una energía E se encuentre ocupado por un electrón.

Un estado con energía $E > E_F$, a mayores temperaturas, tendrá más posibilidades de ser ocupado. Consideremos ahora una temperatura T constante, entonces la probabilidad de ocupación disminuye si aumenta la energía.

A $T = 0^\circ K$, la probabilidad de encontrar un electrón con $E > E_F$ es 0 y con $E < E_F$ es 1.

Dado que la probabilidad de encontrar un electrón es $f(E)$, la probabilidad de no encontrarlo es $1 - f(E)$.

Es importante denotar en este punto que la determinación de cuántas maneras hay de obtener la energía de un rango de energía incremental dE , puede ser calculada por medio de “la partícula en una caja” de la mecánica cuántica.

2.3.3.3. Band Gap o brecha de energía

En un semiconductor, la energía mínima requerida para excitar a un electrón y que pase de la banda de valencia a la banda de conducción es conocida como “band gap” (brecha de energía). El band gap (E_g) es la brecha, en energía eV , por la que están separadas las bandas de valencia (E_V) y de conducción (E_C). El tamaño del band gap tiene implicaciones para el uso que se desea. Un band gap pequeño implica una mayor conducción intrínseca mientras que un band gap grande requiere una mayor energía del fotón para que el semiconductor comience a conducir [16]. En un semiconductor se puede controlar su brecha de energía dependiendo de la técnica de depositado de las películas delgadas. Por ejemplo, en el CdS (Sulfuro de Cadmio) con técnica de depositado de baño químico (CBD) se reporta [28] que por tiempos menores de depositado se llega a un band gap de (2.31-2.32eV) que por tiempos mayores que se llega al típico E_g del CdS (2.42eV).

2.3.3.3.1. Band Gap Directo e indirecto

Para aplicaciones de semiconductores en celdas solares es preferible usar materiales que tengan un band gap directo; esto es porque la naturaleza de los cristales sólidos da lugar a una direccionalidad de electrones. Entonces un material con band gap directo se determina cuando los máximos de la banda de valencia y mínimos de la banda de conducción ocurren en el mismo “momento del electrón”, es decir el momento del electrón es conservado, y la transición ocurre como lo indica su nombre (directamente). Las diferentes bandas de energía deben ser ortogonales.

En un semiconductor con band gap indirecto el momento del electrón ocurre en diferente dirección de los máximos (E_V) y mínimos (E_C) de las respectivas bandas de energía, entonces el electrón que fue excitado debe cambiar su momento para completar la transición (Figura 5), esto quiere decir que un electrón no puede ser excitado simplemente por la absorción de un fotón de energía E_g , en cambio puede ser excitado simultáneamente con la absorción de un fotón y la interacción con una tercera partícula llamada fonón (esta partícula puede ser tomada como vibraciones en la red cristalina). Para generar un par electrón-hueco, en materiales con band gap indirecto, el fonón debe dar su momento k al electrón al tiempo de la absorción del fotón, para concordar con el momento de las bandas de energía (Figura 5). Es pues, por este principio que el nivel de absorción en materiales con band gap directo es mayor [19].

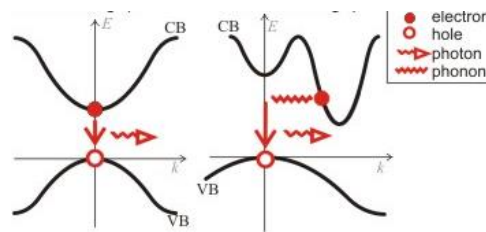


Figura [5]. Band gaps directo e indirecto, respectivamente. [19]

2.3.3.4. Diagrama de bandas de heteroestructuras

Las hetero-estructuras se clasifican de acuerdo a los lineamientos de las bandas de energía de dos semiconductores. Hay tres diferentes alineaciones de las bandas de conducción, valencia y de la banda prohibida, que se muestran en la Figura 6:

- a) El alineamiento más común es la alineación horizontal (straddled alignment), también conocido como tipo I (Type I).
- b) La alineación escalonada (staggered alignment); en esta alineación los pasos de las bandas de valencia y conducción van en la misma dirección.
- c) El alineamiento de bandas más extremo es el de banda rota (broken-gap)

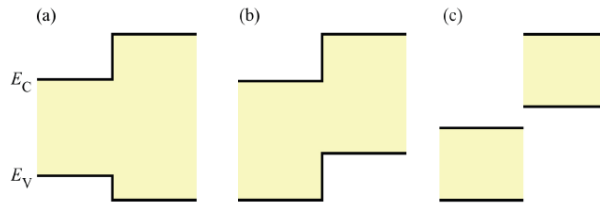


Figura [6]. Tipos de banda de energía: (a)Straddled o tipo I, (b)Staggered y (c)Broken gap [11]

En la interface de un semiconductor de una hetero-estructura, las energías en los bordes de las bandas de valencia y conducción cambian. Los cambios de magnitud de energías en los bordes de las bandas son críticamente importantes para algunos dispositivos electrónicos como celdas solares.

2.3.4. Densidad de estados

{(Densidad de estados)(probabilidad de ocupación) = Densidad de portadores }

Es una función que nos dice cuántos estados hay en un determinado intervalo de una variable que pueda ser la energía, el vector de onda, número cuántico, etcétera. La densidad de estados es el número de estados electrónicos posibles por unidad de volumen y por unidad de energía. En un metal este valor está dado por:

$$N(E) = \frac{\pi}{2} \left(\frac{8m}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} \quad (5)$$

Para adaptar esta ecuación a un material semiconductor se deben de agregar las energías envueltas en este (E_V y E_C) y la masa efectiva de electrones y huecos m_n y m_p , respectivamente lo que nos lleva a las ecuaciones establecidas en [14]:

$$N_n(E) = \frac{\pi}{2} \left(\frac{8m_n}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_C} \quad \text{para } E > E_C \quad (6)$$

$$N_p(E) = \frac{\pi}{2} \left(\frac{8m_p}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_V - E} \quad \text{para } E < E_V \quad (7)$$

2.3.5. Concentración de portadores

La concentración de portadores también se puede denominar por la “ley de acción de masas” la cual se basa en añadir impurezas a un material semiconductor. Como vimos en el apartado 3.2.2. (materiales extrínsecos) el proceso de dopado puede

tener mayores concentraciones de portadores n o p, dependiendo de los elementos de la tabla periódica que se usen. Entonces, añadir impurezas del tipo n a un semiconductor intrínseco produce que los huecos en este disminuyan, y si se añaden impurezas del tipo p produce que la cantidad de electrones disminuya en el semiconductor intrínseco.

En el caso de semiconductores extrínsecos la ley de acción de masas se cumple sólo en equilibrio térmico ($T \cong 300^{\circ}K$) [14].

La densidad típica de portadores libres en semiconductores está en el rango de los $10^{15}cm^{-3}$ a $10^{20}cm^{-3}$ que corresponde a niveles de Fermi ubicados por encima (semiconductores tipo p) o por debajo (semiconductores tipo n) de la banda de energía más próxima.

2.3.6. Generación y recombinación de portadores en uniones P-N

El fenómeno de generación-recombinación de portadores involucra una variación de electrones y huecos en los materiales semiconductores. Siendo estos dos procesos independientes que tienen lugar simultáneamente y a las mismas velocidades en condiciones de equilibrio térmico, es decir, sin aplicar luz al material o un campo eléctrico. El fenómeno de generación se da cuando al material semiconductor se le aplica alguna energía que es igual o mayor a la brecha de energía del material; así un electrón en la banda de valencia sufre una transición de la banda de valencia a la banda de conducción dejando un hueco en la banda de valencia. Por otra parte, el fenómeno de recombinación es cuando un electrón en la banda de conducción libera su energía mediante la colisión con la red cristalina o emitiendo un fotón y pasa de la banda de conducción a la banda de valencia recombinándose con un hueco, lo que conlleva a una desaparición del par electrón-hueco.

En condiciones fuera del equilibrio térmico, cuando se tiene una mayor concentración de portadores minoritarios en un extremo del semiconductor, la

tendencia en el sistema es volver a la situación de equilibrio; para lograr esto las concentraciones de electrones y huecos tienden a recombinarse haciendo más veloz el proceso de recombinación que el de generación [32].

La recombinación y generación de portadores en los semiconductores puede tomar lugar en algún tipo de centro o trampa de recombinación-generación. Dichos lugares pueden ser dislocaciones del cristal en la superficie u otro lugar, átomos de impureza localizados intersticialmente o sustitucionalmente en el cristal o por defectos en la superficie, como rugosidad. Algunos de estos defectos son mostrados en la Figura 7.

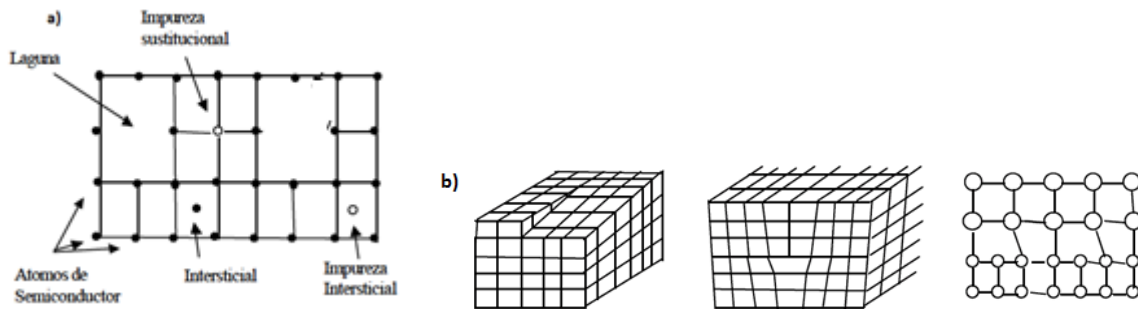


Figura [7]. Defecto de semiconductores a) Defectos puntuales y b) dislocaciones en el enlace [27]

La concentración de portadores libres en un semiconductor depende de una serie de parámetros tal como la concentración de dopaje, energía de activación de impurezas, temperatura y otros parámetros.

2.3.6.1. Tipos de recombinación

Un electrón en estado meta-estable en la banda de conducción eventualmente debe estabilizarse a su nivel de energía en la banda de valencia removiendo a un hueco; es el proceso conocido como recombinación. Hay tres tipos básicos de recombinación en un semiconductor cristalino:

- Recombinación radiativa (de banda a banda)

Este mecanismo predomina en semiconductores con band gap directo. La luz producida de un diodo emisor de luz es un claro ejemplo de recombinación radiativa. Este tipo de recombinación es caracterizada por la recombinación directa de un electrón en la banda de conducción con un hueco en la banda de valencia liberando un fotón. El fotón emitido alcanza una energía similar a la del band gap del material siendo poco absorbido puede desprenderse del semiconductor.

- Recombinación tipo Shockley-Read-Hall

Siendo esta recombinación por defectos en la estructura del material, no ocurre en materiales perfectamente puros. La recombinación por SRH tiene dos procesos: 1.- Un electrón es atrapado por un nivel de energía en la región de la banda prohibida que se da por defectos en la red cristalina. Sin embargo, estos defectos pueden ser intencionalmente introducidos en el proceso de dopaje debido a los diferentes objetivos de funcionamiento. 2.- Si un hueco (o electrón) se mueve al mismo estado de energía antes que el electrón este será termalmente re-emitado a la banda de conducción y se recombina.

- Recombinación Auger

Este tipo de recombinación involucra tres portadores. Un electrón y un hueco se recombinan, pero en vez de liberar energía como el diodo led en forma de fotón esta energía es entregada a una tercer partícula (electrón) en la banda de conducción. Este tercer electrón después vuelve a su estado de energía térmica. Este tipo de recombinación es importante en altas concentraciones de portadores causadas por un alto dopaje o por alto nivel de incidencia de luz solar concentrada [4].

2.3.7. Tiempo de vida de portadores minoritarios en un semiconductor

El tiempo de vida de los portadores minoritarios es un indicador de la eficiencia total de una celda solar dado que está relacionado con el proceso de la tasa de recombinación el cual depende del exceso de portadores minoritarios. El tiempo de vida de un portador en un material (τ_n o τ_p , para electrones y huecos, respectivamente) es el tiempo promedio en que el portador estará en estado excitado antes que se recombine. Sin embargo, el tiempo de vida de los portadores minoritarios dependerá del tipo de semiconductor. Por ejemplo, en un semiconductor tipo n tenemos muchos electrones del estado donador pero pocos huecos en la banda de valencia, entonces el tiempo de vida es el tiempo para que un hueco se recombine con los portadores mayoritarios (electrón); y de manera análoga para un semiconductor tipo p [4].

2.3.8. Longitud de difusión

Otro parámetro relacionado con la tasa de recombinación es la longitud de difusión de portadores minoritarios (L_n o L_p , para electrones y huecos, respectivamente) el cual nos dice la distancia promedio en que un portador se puede mover del punto de generación hasta la recombinación.

La longitud de difusión está relacionada con el tiempo de vida de portadores minoritarios y por el coeficiente de difusión (D_n o D_p) por la siguiente fórmula:

$$L = \sqrt{\tau D} \quad (8)$$

Donde L está en metros, τ en segundos y D en m^2/s

El coeficiente de difusión (D) también está relacionado con la densidad de corriente de difusión J_{ndif} como veremos más adelante.

2.3.9. Densidad de corriente de difusión

En un semiconductor, los portadores están en constante movimiento aleatorio, y así, no hay un movimiento neto de portadores hasta que en ellos hay una diferencia de concentración de portadores o hasta que se les aplica un campo eléctrico.

En el caso de la diferencia de concentración de portadores en un semiconductor el movimiento neto es de áreas de mayor concentración de portadores a áreas de menor concentración de portadores. Como los portadores se mueven constantemente, al pasar un tiempo serán esparcidos a través del espacio (Figura 8)

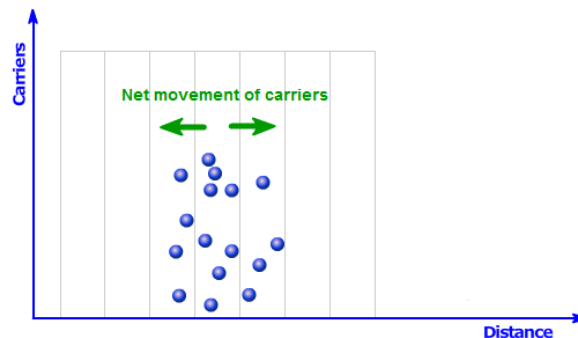


Figura [8]. Difusión de portadores bajo diferencia de concentración de portadores [4].

La ecuación para electrones (n) y huecos (p) es:

$$J_{ndif} = qD_n \frac{dn(x)}{dx} \text{ y para huecos } J_{pdif} = -qD_p \frac{dp(x)}{dx} \quad (9)$$

Donde $D_n \frac{dn(x)}{dx}$ y $D_p \frac{dp(x)}{dx}$ son la densidad de flujo ($\phi_n(x)$ y $\phi_p(x)$) de electrones y huecos, respectivamente.

2.3.10. Densidad de corriente de arrastre

En la presencia de un campo eléctrico los portadores se mueven en una dirección neta (Figura 9). El movimiento neto de un portador es la combinación del movimiento aleatorio y el movimiento debido al campo eléctrico. Si se trata de un hueco como portador (p) existe una aceleración en dirección del campo eléctrico, si el portador es un electrón (n) la aceleración es en oposición a este campo.

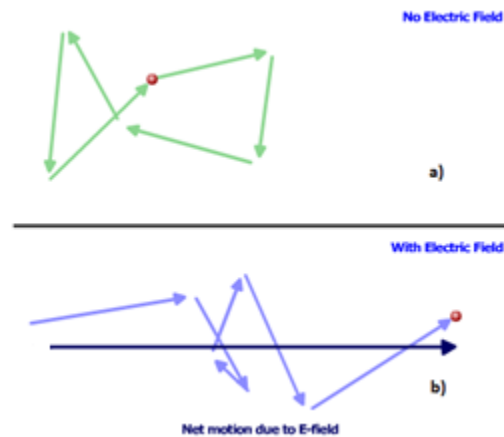


Figura [9]. a) movimiento aleatorio de un portador y b) movimiento causado por un campo eléctrico.

El transporte y movimiento de portadores debido al campo eléctrico es llamado densidad de corriente de arrastre. La densidad de corriente de arrastre en dirección $-x$ está dada por:

$$J_x = q(n\mu_n + p\mu_p)E_x \quad (10)$$

Donde E_x es el campo eléctrico aplicado v/m, q es la carga del electrón, μ_n y μ_p son la movilidad del electrón y hueco, n y p son la concentración de electrones y huecos, respectivamente.

Capítulo 3

3.1. Celdas Solares

Son dispositivos que absorben luz incidente del espectro solar convirtiendo la luz en energía eléctrica para hacer algún trabajo determinado. Un ejemplo fotoeléctrico fue demostrado por Einstein en 1905 donde demostró que luz incidente azul o ultravioleta tiene la suficiente energía para desprender electrones completamente de la superficie de un metal. Cuando paquetes de fotones inciden en el material estos excitan electrones a niveles de energía mayores, pero estos regresan a su estado de relajación rápidamente. La absorción de fotones es el proceso que crea pares electrón-hueco; la absorción se dará siempre y cuando estos fotones provengan con mayor energía que el bandgap del material utilizado (por ejemplo, para el CdS la energía incidente debe ser mayor a $E_g = 2.42eV$). Sin embargo, en la heteroestructura los electrones (en el material tipo-p) y los huecos (en el tipo-n) están en estado meta-estable y sólo existirán en promedio por una extensión de tiempo igual al tiempo de vida de los portadores minoritarios antes que ellos se recombinen. La recombinación de electrones y huecos no es deseable en celdas solares ya que esto implica que el dispositivo perderá la corriente eléctrica producida.

Como segundo proceso se tiene la recolección de portadores generados. Este proceso trata de evitar la recombinación de portadores usando el campo eléctrico efectuado por la unión p-n para separar espacialmente al electrón y al hueco. Si los portadores minoritarios generados por la luz incidente alcanzan la unión p-n estos se precipitan hacia la unión, debido al campo eléctrico, pasando a ser portador mayoritario en el material, esto lo estudiamos más adelante en el apartado 3.3.

El efecto fotovoltaico fue reportado por Edmund Becquerel en 1839 donde observó la acción de luz en un electrodo de platino cubierto de plata inmerso en electrolito que producía una corriente eléctrica. Muchos años después, ya de variados procesos de análisis de este fenómeno, la primera celda solar de silicio fue reportada por Chapin, Fuller y Pearson en 1954. Las últimas características

desarrolladas de celdas de silicio introdujeron la posibilidad de generar electricidad en regiones remotas, como en el caso de los satélites [9] [2]. A esto se añade que entre los años 1950 y 1960 las celdas solares de silicio fueron fuertemente desarrolladas para aplicaciones en el espacio.

En 1954 fue desarrollada una unión p-n de sulfuro de cadmio (CdS) con una eficiencia del 6%. En posteriores estudios de estos dispositivos fotovoltaicos: arseniuro de galio (GaAs), fosfuro de indio (InP) y telurio de cadmio (CdTe) fueron estimados teóricamente indicando que estos materiales podrían ofrecer mayor eficiencia [22].

Una estructura CdS/PbS de celda solar es de nuestro interés debido al pequeño band gap de la capa efectiva (PbS $E_g = 0.37 - 0.41 eV$ a $300^\circ K$) que llega a absorber parte del infrarrojo de la luz visible (Figura 10), dado que los dispositivos comúnmente desarrollados no absorben esta parte del espectro [6].

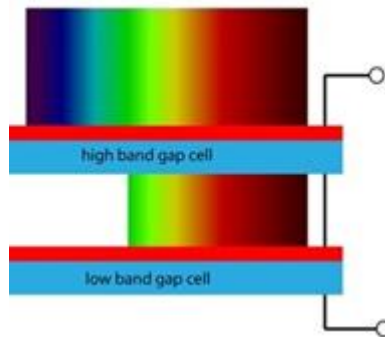


Figura [10]. Absorción del espectro solar debido a dos materiales con band gap distinto [4].

3.2. Circuito equivalente de una celda solar

En un circuito eléctrico una celda solar es equivalente a un generador de corriente en paralelo con un elemento resistivo no lineal (diodo), en las diferentes configuraciones se usan: un diodo en paralelo, dos diodos en paralelo, un diodo con una resistencia en paralelo (R_{sh}) o considerando la resistencia en serie (R_s). El más

usado es con un solo diodo, aunque usar dos diodos tiene una mejor aproximación, el análisis se hace más complejo. Algunos resultados muestran que un diodo es todavía una buena aproximación (Figura 11) [23].

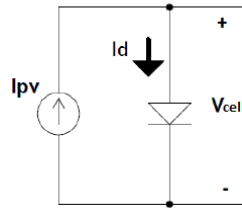


Figura [11]. Circuito equivalente de una celda solar ideal [23]

Cuando es iluminada la celda ideal produce una fotocorriente proporcional a la intensidad de luz incidente. Esta corriente es dividida por la resistencia variable del diodo y la carga en una proporción que depende de la resistencia de la carga y el nivel de luz incidente. La corriente generada tiende a pasar por el diodo a valores de resistencia de carga elevados. Esto se traduce a una alta diferencia de potencial entre las terminales de la celda, pero una pequeña corriente a través de la carga. Así, el diodo proporciona el foto-voltaje y dirige la foto-corriente a través de la carga. La configuración de los componentes electrónicos es usada para ajustar la curva IV de la celda (Figura 12): la foto-corriente (I_{pv}) afecta la corriente de corto circuito (I_{sc}), la corriente en la oscuridad (I_d) afecta el voltaje en circuito abierto (V_{oc}), afecta también al factor de llenado (FF) y R_s afecta el punto de máxima potencia (P_m).

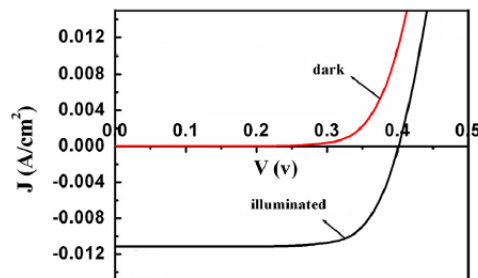


Figura [12]. Curva característica J-V de celda solar bajo iluminación y oscuridad [6]

En aplicaciones prácticas la potencia es disipada a través de la resistencia de los contactos y a través de corrientes de fuga en el dispositivo. Para visualizar estos

efectos en el circuito equivalente se agregan dos resistencias parásitas, en serie (R_s) y en paralelo (R_{sh}) como se puede apreciar en la Figura 13:

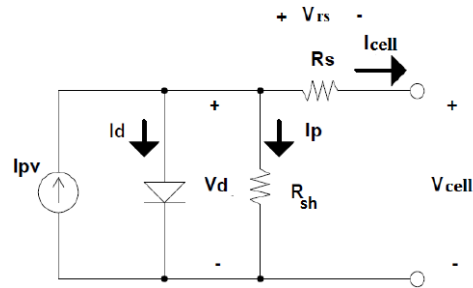


Figura [13]. Circuito equivalente de la celda agregando resistencias en serie y paralelo [23]

La resistencia en serie aparece debido a la resistencia al flujo de corriente de la celda, particularmente a través de la superficie frontal a los contactos y por los mismos contactos que son resistivos. Esta resistencia es un problema particular a elevadas densidades de corriente (alta concentración de luz incidente). La resistencia en paralelo aparece dado a la corriente de fuga de la celda (alrededor de los bordes y entre los contactos de diferente polaridad). Para una celda eficiente necesitamos una R_s que tienda a cero y una R_{sh} que tienda a infinito.

Otros de los factores externos muy importantes que cambian las condiciones de las celdas, como la temperatura del ambiente, es la irradiancia solar (G) que a la vez ésta se ve afectada por las condiciones ambientales como se menciona en el apartado 2.2.1. [24].

3.3. Zona de agotamiento de una unión p-n

Esta región se da cuando se unen un semiconductor de tipo p con uno tipo n , ya que la región n contiene alta concentración de electrones, estos se difunden hacia la región p . Similarmente, la región p contiene alta concentración de huecos que se difunden hacia la región n . Cuando electrones y huecos se mueven hacia el lado opuesto de su región, respectivamente, dejan detrás iones positivos en la región n y iones negativos en la región p que están fijos en la red cristalina. Entre estos iones

en los dos lados de las regiones n y p se crea un campo eléctrico, esta región es conocida como zona de agotamiento ya que el campo eléctrico repele a los portadores, a los electrones por ir en dirección contraria del campo eléctrico y a los huecos por ir en dirección del campo. Este fenómeno se aprecia mejor en la Figura 14. Debido al campo eléctrico se crea una diferencia de potencial V_{bi} entre la unión.

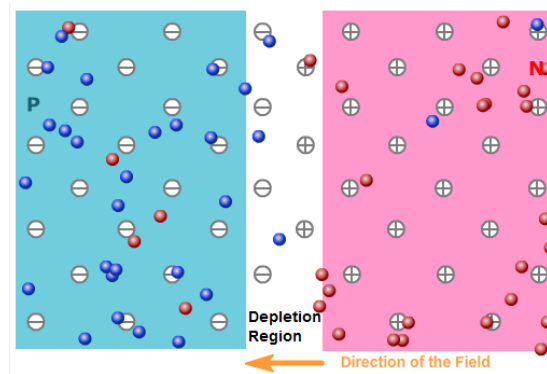


Figura [14]. Zona de agotamiento en unión $p - n$

Aún con el impedimento del campo eléctrico para que electrones y huecos se difundan hacia la otra región hay portadores con suficiente velocidad y direccionalidad para atravesar la zona de agotamiento. La corriente creada por estos portadores es J_{dif} que vimos en el apartado 2.3.9. El portador que atravesó la zona seguirá difundiéndose hasta la longitud de difusión promedio L antes de recombinarse.

Una vez los portadores mayoritarios hayan atravesado la zona de agotamiento se convierten en portadores minoritarios. De los que no se llegan a recombinar son atraídos por el campo eléctrico creando la corriente de arrastre J_x . En equilibrio térmico esta corriente está limitada a los pocos portadores minoritarios que se generen en la unión.

3.4. Índice de refracción, coeficiente de absorción y constante de propagación

La propagación de una onda óptica está dada por la ecuación de onda la cual depende de las propiedades ópticas y de la estructura física (atómica p/ celdas) del medio donde se propaga. Además, dicha propagación es dependiente de la composición de la misma onda óptica: tal como sus componentes de frecuencia y sus características en el tiempo.

En espacio libre, la constante de propagación está dado por:

$$K = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi\nu}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (11)$$

Donde ν es la frecuencia de la onda y λ la longitud de onda. Esta constante está dada en la consideración de una onda monocromática en un medio infinito homogéneo

- Medio sin pérdidas:

En este caso, se consideran casi las mismas características que en el espacio libre a excepción de que ϵ_0 es reemplazado por $\epsilon(\omega)$. El cambio de la permitividad eléctrica del vacío a un material es medido por la “permitividad eléctrica relativa” o la “constante dieléctrica” del material $\frac{\epsilon}{\epsilon_0}$. Entonces la constante de propagación en el medio es:

$$K = \omega\sqrt{\omega_0\epsilon} = \frac{n\omega}{c} = \frac{2\pi n\nu}{c} = \frac{2\pi n}{\lambda} \quad (12)$$

Donde el índice de refracción en el medio está dado por: $n = \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}}$. La frecuencia óptica es aún ν en un medio que tiene índice de refracción, pero la longitud de onda es: $\frac{\lambda}{n}$ y la velocidad de la luz: $\frac{c}{n}$. Porque n , en el medio, es generalmente dependiente de la frecuencia, es decir $n(\omega)$. La dependencia de la frecuencia de la velocidad de la luz es el resultado de varios fenómenos de dispersión, como la separación de la óptico viajando a través del medio.

- Medio con ganancias o pérdidas

Aquí la constante de propagación K y el índice de refracción n se vuelven complejos cuando un medio tiene ganancias o pérdidas ópticas. De esta manera:

$$K^2 = \omega^2 \mu_0 \epsilon = \omega^2 \mu_0 (\epsilon' + i\epsilon'') \quad (13)$$

Donde μ_0 es la permeabilidad eléctrica. También la constante de propagación y el índice de refracción pueden escribirse de la siguiente forma para después relacionar los coeficientes de absorción y de extinción:

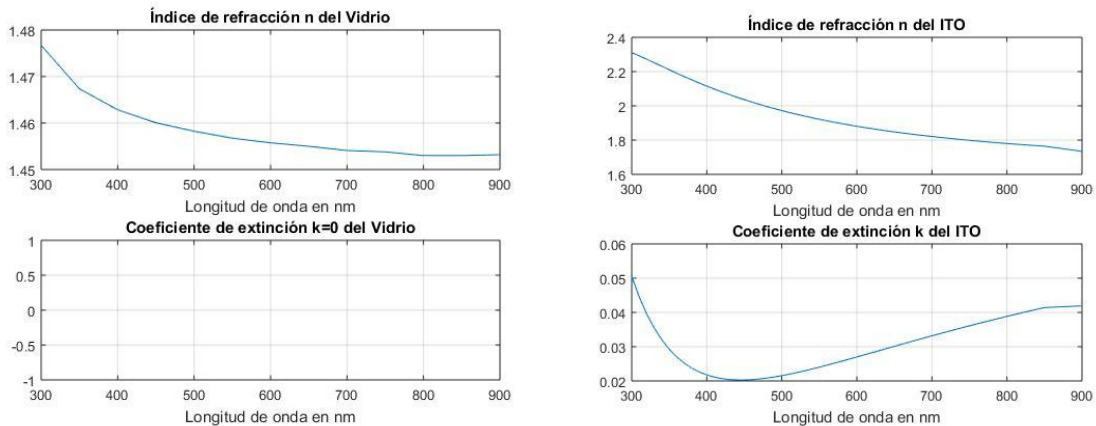
$$K = \beta + i\frac{\alpha}{2}, \quad n = \sqrt{\frac{\epsilon' + i\epsilon''}{\epsilon_0}} = n' + ik''$$

Donde β es el número de onda, α y k son el coeficiente de absorción y el coeficiente de extinción, respectivamente, que dependen de la frecuencia. La relación entre K y n en un medio sin pérdidas sigue siendo válida en este medio con pérdidas [20].

La relación entre los coeficientes de absorción α y de extinción k está dado por:

$$\alpha = \frac{4\pi}{\lambda} k \quad (14)$$

Los gráficos de los índices de refracción n y coeficientes de extinción k de la Figura 15 de la estructura de celda solar CdS/PbS con respecto a la longitud de onda λ son:



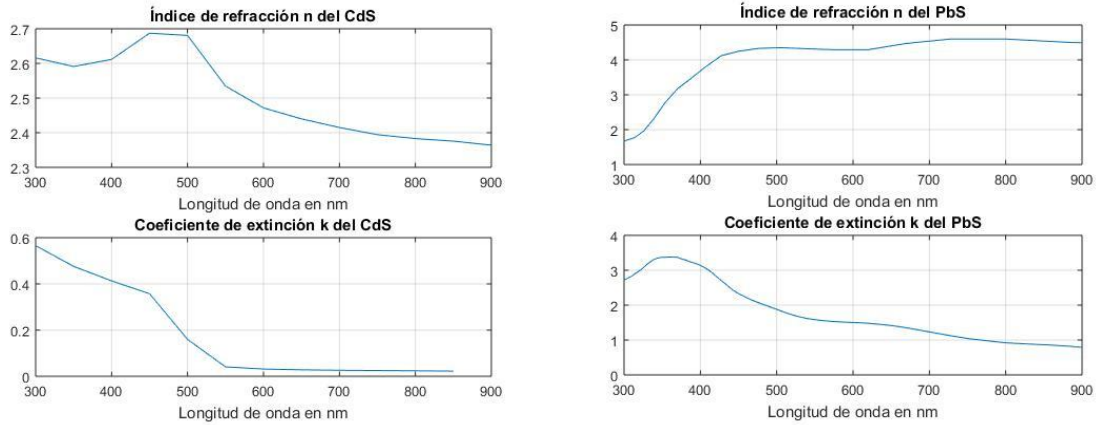


Figura 15. Índices de refracción y coeficientes de extinción de la hetero-estructura

3.5. Probabilidad de colección

Este parámetro es importante en celdas solares dado que describe la probabilidad en la que un portador generado por absorción de luz incidente, en una región específica del dispositivo, será recolectado para contribuir a la corriente, pero esta probabilidad depende de la distancia que un portador debe viajar comparada con la longitud de difusión. Esta probabilidad es unitaria en la región de agotamiento de la unión p-n puesto que el campo eléctrico formado por la unión rápidamente barre a los portadores y éstos son (re)colectados. De manera contraria, si los portadores son generados lejos de la zona de agotamiento dicha probabilidad decae en valor por la recombinación de los portadores generados. Por ejemplo, en la superficie frontal de la celda con una alta tasa de recombinación mayor que en la de la zona de agotamiento la probabilidad de recolectar portadores es baja.

La probabilidad de colección, junto con la razón de generación de portadores determinan la foto corriente de la celda solar integrando alrededor de todo el dispositivo, de distancia X , la razón de generación en un punto en particular multiplicado por la probabilidad de colección en el mismo punto particular:

$$J_{pv} = q \int_0^X G(x)PC(x)dx = q \int_0^X [\int \alpha(\lambda)H_0 e^{-\alpha(\lambda)x} d\lambda]PC(x) \quad (15)$$

Donde q es la carga del electrón, X es el grosor del dispositivo, $G(x)$ es la tasa de generación, $\alpha(\lambda)$ es el coeficiente de absorción, $PC(x)$ es la probabilidad de colección de portadores y H_0 es el número de fotones en cada longitud de onda.

3.6. Coeficiente de transmisión

Este puede ser uno de los primeros parámetros ópticos que se calculan de una celda solar, que es calculado para saber cuánta luz incidente alcanza la capa efectiva de alguna estructura de celda solar. Tomemos como ejemplo una estructura CdS/PbS, que es la que nos interesa en este estudio. La estructura típica de CdS/PbS es mostrada en la Figura 16, donde el vidrio es el sustrato, ITO (óxido de indio y estaño) se considera el contacto frontal de la celda, CdS (sulfuro de cadmio) es llamada la “ventana” dado a su ancha brecha de energía (2.42eV) que deja pasar gran parte del espectro solar (Figura 10), el PbS (sulfuro de plomo) es la capa efectiva de la celda donde se lleva a cabo la recolección de portadores que resulta en la energía capturada por la celda, y por último tenemos el contacto trasero que es el Al (aluminio) [6].

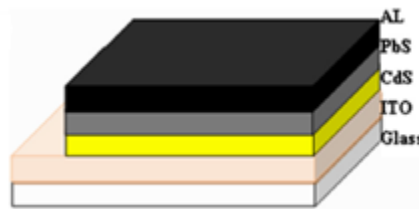


Figura [16]. estructura de celda solar CdS/PbS [6].

El cálculo del coeficiente de transmisión toma en cuenta las pérdidas del espectro al atravesar el dispositivo y es calculado tomando en cuenta las pérdidas por reflexión debido a todas las capas (aire-sustrato, sustrato-ITO, ITO-CdS y CdS-PbS). Se agregan también las pérdidas por absorción de las capas ITO y CdS. Se toma en cuenta que el sustrato tiene un coeficiente de extinción $k = 0$ el cual está

directamente relacionado con el coeficiente de absorción (14) por lo que no hay pérdidas de absorción en el sustrato.

La ecuación de Fresnel toma en cuenta las reflexiones en las diferentes capas, que es la reflexión entre dos materiales en contacto con diferentes índices de refracción y extinción:

$$R = \left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}\right)^2 \quad (16)$$

Donde n_1 y n_2 son los índices de refracción de los dos materiales, respectivamente. Para expandir el cálculo a materiales eléctricamente conductivos, el coeficiente de reflexión es:

$$R = \frac{(n_1 - n_2)^2 + (k_1 - k_2)^2}{(n_1 + n_2)^2 + (k_1 + k_2)^2} \quad (17)$$

Donde k_1 y k_2 son los coeficientes de extinción de los dos materiales, respectivamente [30].

Finalmente, el coeficiente de transmisión para la estructura es dado por:

$$T(\lambda) = (1 - R_{12})(1 - R_{23})(1 - R_{34})(1 - R_{45})(e^{\alpha_1 d_1})(e^{\alpha_2 d_2}) \quad (18)$$

Donde $e^{\alpha d}$ representa las pérdidas por absorción de las capas ITO y CdS y d es su respectivo grosor.

3.7. Eficiencia cuántica interna

Este parámetro representa la tasa del número colectado de portadores por la celda solar a el número de fotones incidentes a una energía determinada. Tiene dos componentes causadas por la generación de par electrón-hueco en la región de agotamiento de la unión. Una de ellas, la componente de arrastre η_{drift} , toma en cuenta las pérdidas por recombinación en la zona de agotamiento mientras que la componente de difusión η_{dif} toma en cuenta las pérdidas por recombinación en la parte trasera de la capa PbS [31].

$$\eta_{drift} = \frac{1 + \frac{S}{D_n} \left(\alpha + \frac{2\phi_0 - qv}{KT} \right)^{-1}}{1 + \frac{S}{D_n} \left(\frac{2\phi_0 - qv}{KT} \right)^{-1}} \quad (19)$$

Donde S es la velocidad de recombinación en la superficie frontal de la unión CdS/PbS, D_n el coeficiente de difusión, α es el coeficiente de absorción de la capa efectiva, W es el ancho de la zona de agotamiento de la unión, ϕ_0 es la altura de barrera en la zona de agotamiento, v es el voltaje aplicado, q es la carga del electrón, K es la constante de Boltzmann y finalmente, T es la temperatura en grados kelvin.

$$\eta_{dif} = \frac{\alpha L_n}{\alpha^2 L_n^2 - 1} e^{-\alpha W} \left(\alpha L_n - \frac{\frac{S_b L_n}{D_n} \left[\cosh\left(\frac{d_{PbS} - W}{L_n}\right) - e^{-\alpha(d_{PbS} - W)} \right] + \operatorname{senh}\left(\frac{d_{PbS} - W}{L_n}\right) + \alpha L_n e^{-\alpha(d_{PbS} - W)}}{\frac{S_b L_n}{D_n} \operatorname{senh}\left(\frac{d_{PbS} - W}{L_n}\right) + \cosh\left(\frac{d_{PbS} - W}{L_n}\right)} \right) \quad (20)$$

Donde L_n es la longitud de difusión del electrón, S_b es la velocidad de recombinación trasera de la capa PbS y d_{PbS} es el grosor de la capa PbS.

La suma de η_{drift} y η_{dif} da como resultado la eficiencia cuántica interna total η_{int} [30].

3.8. Curva IV

La curva IV es la superposición de la corriente a través de la celda solar en la oscuridad con la corriente generada por luz incidente. La respuesta total de corriente-voltaje de la celda puede ser aproximada con la suma de la corriente de corto circuito y la corriente en la oscuridad.

La ecuación para la curva IV es:

$$I = I_{sc} - I_{dark} \quad (21)$$

Para un diodo ideal la ecuación es: $I = I_{sc} - I_0 \left[e^{\frac{qV}{kT}} \right]$ [22]. Como se mencionó en el apartado 3.2. de la curva IV se pueden determinar varios parámetros que caracterizan a una celda solar: el factor de llenado FF, la potencia máxima P_m y la eficiencia η [6].

3.9. Voltaje de circuito abierto

Es el máximo voltaje V_{oc} que una celda solar puede alcanzar con corriente cero; dado que sus terminales están abiertas, es decir, sin carga a la salida, no hay corriente neta a través del dispositivo.

El voltaje de circuito abierto corresponde a la cantidad de polarización directa sobre la celda solar debido a la polarización de la unión con la corriente generada por luz incidente I_L . La ecuación que describe a este término es:

$$V_{oc} = \frac{nkT}{q} \ln\left(\frac{I_{sc}}{I_0} + 1\right) \quad (22)$$

Donde I_0 es la corriente de saturación.

Se puede observar que V_{oc} depende de la corriente de saturación y de la corriente generada por luz. Como veremos en el siguiente apartado, I_{sc} típicamente tiene una pequeña variación, entonces el mayor efecto en el voltaje de circuito abierto es por la corriente de saturación.

3.10. Densidad de corriente en corto circuito y densidad de corriente en oscuridad

La corriente de corto circuito I_{sc} es la corriente a través de la celda solar cuando el voltaje a través de esta es cero. I_{sc} es debido a la generación y colección de portadores generados por la luz incidente. Es la máxima corriente que puede alcanzar una celda solar.

Cabe mencionar que para una celda solar ideal la corriente de corto circuito y la corriente generada por luz incidente en la celda son similares.

Dicha corriente depende de algunos parámetros:

- El área de la celda solar

- El número de fotones (potencia) incidentes de la fuente
- El espectro de la luz incidente: típicamente usado el estándar de medición AM1.5
- Las propiedades ópticas de la celda solar (absorción y reflexión), y
- La probabilidad de colección de portadores de la celda solar

Cuando se aplica un voltaje a la celda solar con una carga, entre las terminales se crea una diferencia de potencial; esta diferencia de potencial genera una corriente que viaja en oposición a la fotocorriente, por lo cual la corriente neta de la celda es reducida debido a esta corriente que es llamada corriente en la oscuridad (I_{dark}). Muchas celdas solares se comportan como un diodo en la oscuridad. Así pues, para un diodo ideal la corriente en la oscuridad es [22]:

$$I_{dark} = I_0(e^{\frac{qV}{kT}} - 1) \quad (23)$$

3.11. Factor de llenado o Fill Factor

Como se mencionó antes, el voltaje de circuito abierto V_{oc} y la corriente de corto circuito I_{sc} son el máximo voltaje y corriente de una celda solar, respectivamente. Sin embargo, la potencia en estos dos puntos de operación es cero. El fill factor (factor de llenado), junto con V_{oc} e I_{sc} , determinan la máxima potencia de la celda solar; el cual está determinado como la tasa de la potencia máxima de la celda a el producto de V_{oc} e I_{sc} .

El FF puede verse gráficamente como la cuadratura de la curva IV (Figura 17) y comúnmente la ecuación utilizada es:

$$FF = \frac{J_m V_m}{I_{sc} V_{oc}} \quad (24)$$

Donde el producto de J_m y V_m es la potencia máxima de operación P_m de la celda solar; entonces: $FF = \frac{P_m}{I_{sc} V_{oc}}$



Figura [17]. Cuadratura en la gráfica IV representando el FF [6]

3.12. Eficiencia total

La eficiencia η de la celda solar es la densidad de potencia entregada en un punto de operación como fracción de la densidad de potencia de luz incidente. Es decir, es la razón de energía de salida de la celda a la energía de entrada desde la fuente de luz. La eficiencia depende del espectro e intensidad de luz incidente y de la temperatura de la celda solar. Para celdas solares de uso terrestre se usan las condiciones AM1.5 a temperatura de 300°K (25°C) y para celdas espaciales la condición AM0.

La eficiencia es determinada por:

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} \quad (25)$$

Donde $P_{max} = V_{oc} I_{sc} FF$ y para cálculos de eficiencia [4] la potencia de entrada $P_{in} =$

$$\frac{1kW}{m^2} \text{ o } \frac{100mW}{cm^2}$$

Capítulo 4

4.1. Resultados

Para el cálculo de los parámetros ópticos de la celda solar $T(\lambda)$ y η_{int} se toman en cuenta algunas constantes dadas en la tabla 1 tratando de reproducir los resultados de los estudios teóricos de Mohamed [6].

Tabla 1. Valores constantes

Symbol	Value	Reference
d_1	100 nm	Current work
d_2	100 nm	Current work
$\Phi_0 - qv$	0.7 eV	Current work
D_n	25.8	Current work
μ_n	1000 cm ² /(V S)	Current work
μ_p	80 cm ² /(V S)	Current work
τ_n	10 ⁻⁹ s	Current work
τ_p	10 ⁻⁹ s	Current work
ϵ	18	Akhtar et al. (2010)

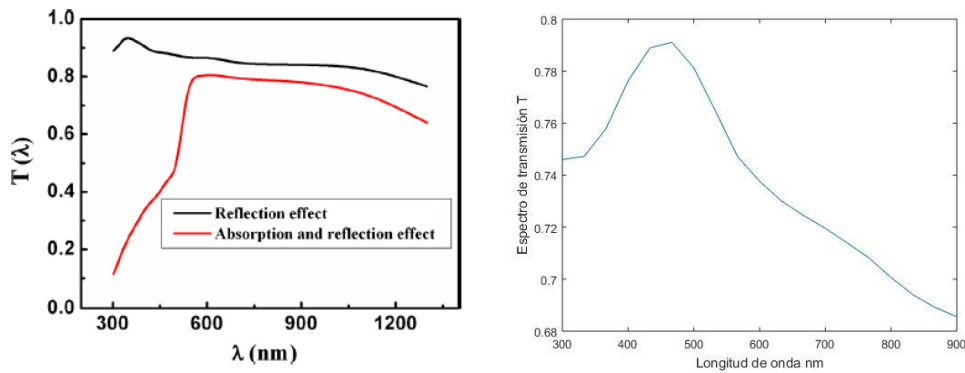


Figura [18]. Espectro de transmisión $T(\lambda)$ debido a la reflexión de todas las capas de la celda y la absorción de las capas ITO y CdS.

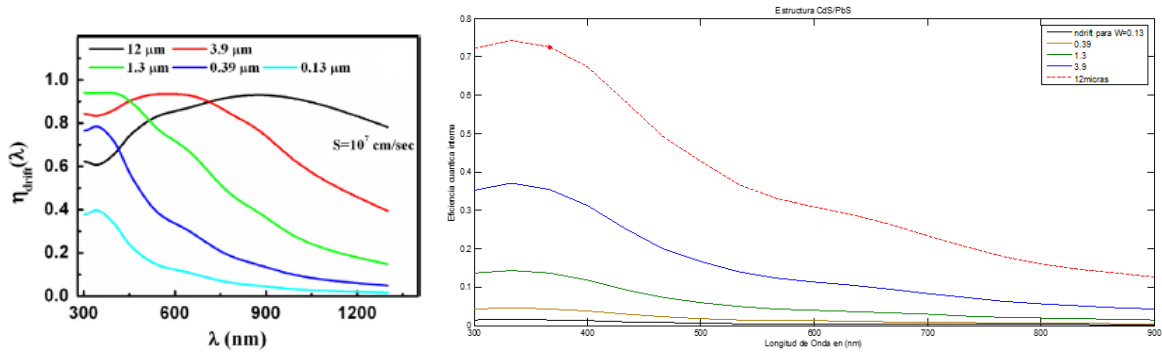


Figura [19]. Componente de desvío $\eta_{drift}(\lambda)$ como función de la longitud de onda λ a diferentes valores del ancho de la zona de depleción W .

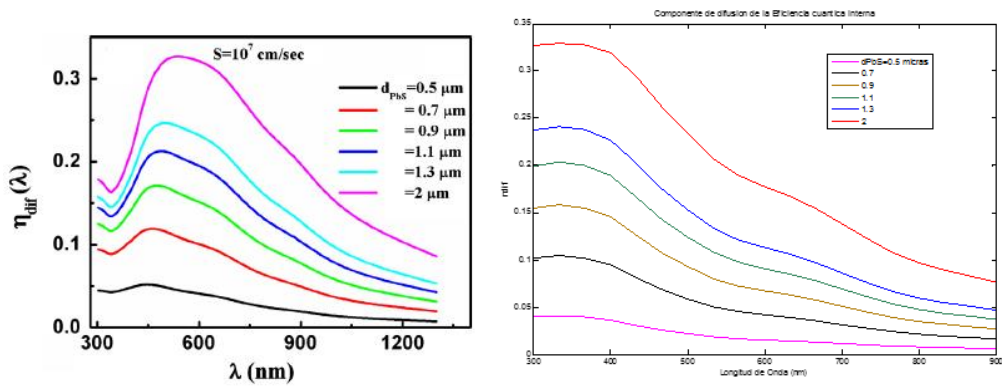


Figura [20]. Componente de difusión $\eta_{diff}(\lambda)$ como función de la longitud de onda λ a diferentes grosores de la capa PbS (d_{PbS}).

Capítulo 5

5.1. conclusiones

El coeficiente de absorción es directamente proporcional al coeficiente de extinción cuando se tienen materiales que proporcionan pérdidas o ganancias, en este caso dichos parámetros son complejos y están directamente relacionados mediante una constante como se ve en la fórmula 14. Ambos parámetros son dependientes de la longitud de onda. El índice de refracción es también complejo para estos mismos materiales y depende de la síntesis utilizada para crecer películas, encontrándose por tanto diferentes valores del índice de refracción dependiendo del material en

cuestión. Por otra parte el coeficiente de transmisión depende del grosor de la película.

Mediante el estudio de la estructura CdS/PbS se encontraron diversas fuentes para los parámetros (tabla 1) y ecuaciones [6], [30] y [31]. Es claro que las gráficas presentan una diferencia de forma, pero amplitudes similares; esto es debido a las diferencias en las bases de datos tomadas: índice de refracción, coeficiente de extinción y de absorción de las diferentes películas ITO, CdS y PbS. Cabe señalar que las bases de datos no fueron encontradas en una sola referencia lo cual también son motivo de error.

El rango de 300nm a 500nm de longitud de onda λ es el que presentó diferencias en los resultados obtenidos, debido a que las bases de datos tenían diferentes rangos. Sin embargo, en los resultados de los gráficos del coeficiente de transmisión $T(\lambda)$, la componente de arrastre cuántica η_{arift} y la componente de difusión η_{dif} tienen amplitudes y comportamientos de la onda parecidos; principalmente en el rango de 600nm a 900nm, esto no tiene nada que ver con los parámetros usados y sí con las bases de datos de $n(\lambda)$ y $k(\lambda)$.

Para trabajo a futuro se propone calcular los siguientes parámetros para la completa caracterización de la celda solar, abarcando desde la curva I-V obteniendo así el voltaje de circuito abierto como la corriente de corto circuito de dicha curva y la potencia máxima que entrega la estructura de celda solar de este trabajo. Se procedería a calcular después el factor de llenado para concluir con la eficiencia total de la celda.

Una vez la caracterización sea completada en el código se podrán sustituir parámetros de otro tipo de estructuras (por ejemplo: CdS/CdTe, CIGS/CdS, entre otras) bajo las consideraciones ideales que se asumieron en este trabajo como el no considerar el contacto trasero (Al) que contribuiría a pérdidas de transmisión [30].

Una línea de investigación para trabajo a futuro es la realización de un análisis completo acerca de diferentes opciones de contactos tanto en trabajo teórico como práctico.

Referencias

- [1] "Determinación experimental de los coeficientes de extinción molar (ϵ) y de las secciones eficaces de absorción (σ) UV de una serie de vinil éteres en distintas fases".
- [2] Marcela P. Barrera - "Simulación y caracterización de celdas solares multijuntura y de silicio cristalino para aplicaciones espaciales", 2009.
- [3] Andrés Aranzabal Olea, "teoría de semiconductores".
- [4] <http://pveducation.org/es> "photovoltaic Education Network".
- [5] <http://rredc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5/> "Reference Solar Spectra Irradiance: Air Mass 1.5".
- [6] H. A. Mohamed, "Theoretical Study of the efficiency of Cds/PbS thin film solar cells", 2014.
- [7] W. Shockley, "The theory of p-n junctions in semiconductors and p-n junction transistors," Bell Sys. Tech. J., vol. 28, July, 1949.
- [8] Electrónica: Teoría de circuitos y dispositivos electrónicos" 10ma ed. – Robert L. Boylestad & Louis Nashelsky
- [9] M. Barrera, J. Plá & F. Rubinelli, "Simulación numérica de celdas solares de GaAs", 2009.
- [10] CHIH-TANG et. Al., "Carrier Generation and recombination in P-N junctions and P-N Junction Characteristics".
- [11] E.F. Shubert, "Physical foundation of solid-state devices", 2006.
- [12] H. M. Christen and G. Eres, "Recent advances in pulsed-laser deposition of complex-oxides".
- [13] "Basic Semiconductor Physics" (página)
- [14] K. Kano, "Semiconductores intrínsecos y extrínsecos", 2006.

- [15] Gerardo A. Alvarez et. Al., "Principio de exclusión de Pauli y simetría en la función de onda".
- [16] "Física de semiconductores"
- [17] S. Manouchehri et al, The Experiment, "refractive index, optical bandgap and oscillator parameters of pbs thin films deposited by CBD technique", 2014.
- [18] M. M. abbas et al, "Effect of temperature and deposition time on the optical properties of chemically deposited nanostructure PbS thin films", 2011.
- [19] Katarzyna Skorupska, "Optical properties of semiconductors".
- [20] Jia-ming Liu, "Photonic Devices", 2015.
- [21] Mustafa Merdan et al, "Dispersion Analysis of SnS and SnSe", 2001.
- [22] Jenny Nelson, "The physics of solar cells", Imperial College Press, 2013.
- [23] Miguel Pareja Aparicio, "PV cell simulation with QUCS, a generic model of PV cell", 2013.
- [24] Miguel Pareja A. et al, "Modeling of photovoltaic cell using free software application for training and desing circuit in photovoltaic solar energy", InTech, 2013.
- [25] J. M. Albella, J. M. Martínez-Duart, "Fundamentos de electrónica física y microelectrónica".
- [26] <https://nanotecnologia.fundaciontelefonica.com/2016/02/23/quantum-dots-el-control-de-la-emision-de-luz/> Nano tecnología, "innovación tecnológica y transformación social en I-Europa".
- [27] www.textoscientificos.com "Defecto de los cristales".
- [28] A.I. Olivia et al., "Formation of the band gap energy on CdS thin films growth by two different techniques", 2001.
- [29] www.pvlighthouse.com.au
- [30] H. A. Mohamed, "Dependence of efficiency of thin-film CdS/CdTe solar cell on optical and recombination losses", 2013.
- [31] L.A. Kosyachenko et al, "Dependence of efficiency of thin-film CdS/CdTe solar cell on parameters of absorber layer and barrier structure", 2009.

[32] I.T.T.(S.E.), “Estadística y fenómenos de transporte en semiconductores”,
Universidad de Valencia.