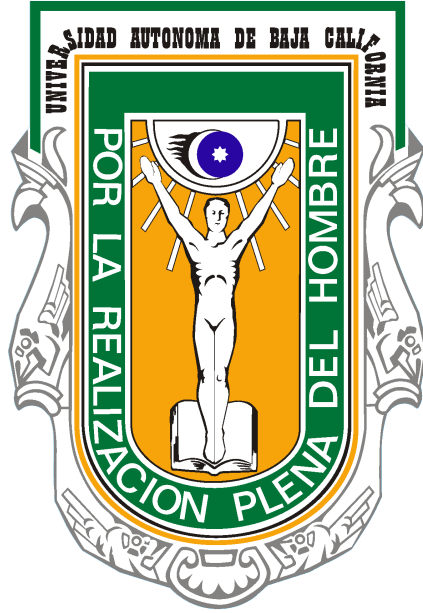


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
INSTITUTO DE INGENIERÍA
MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS E INGENIERÍA



**“ESTUDIO POR SIMULACIÓN DE LOS EFECTOS DE DISEÑO EN
CELDAS SOLARES SEMICONDUCTORAS”**

TESIS

Que para obtener el grado de:

Maestría en Ingeniería

Presenta:

Noe Misael Nieto Arroyo

Director:

Dr. Nicola Radnev Nedev

Co-Director:

Dr. Mario Alberto Curiel Álvarez

Tesis defendida por
Noe Misael Nieto Arroyo

Dr. Nicola Radnev Nedev
Presidente del Jurado

Dr. Benjamín Valdez Salas
Sinodal

Dr. Rogelio Arturo Abraham José María
Ramos Irigoyen

Sinodal primero

Dr. Francisco David Mateos Anzaldo

Sinodal segundo

Dr. Mario Alberto Curiel Álvarez
Sinodal secretario

Agradecimientos

Al Dr. Nicola Nedev por su infinita paciencia y amor a la enseñanza.

Al Dr. David Mateos y Dr. Mario Curiel por su enseñanza y amistad.

A mi padres Alfredo y Paula por traerme a la vida y todo su amor. A mis hermanos por haberme acompañado desde que nací.

A los amigos Ignacio, Marianela, Rubén y Ceci. Sigamos conspirando para intentar vivir la vida en Percepción Unitaria.

A los colegas del laboratorio del LSMN, ha sido muy bello haber compartido clases, trabajos, preocupaciones y cumpleaños.

τὸ πνεῦμα ὅπου θέλει πνεῖ, καὶ τὴν φωνὴν αὐτοῦ ἀκούεις, ἀλλ' οὐκ οἶδας πόθεν
ἔρχεται καὶ ποῦ ὑπάγει· οὕτως ἐστὶν πᾶς ὁ γεγεννημένος ἐκ τοῦ Πνεύματος.

El viento sopla de donde quiere, y oyes su sonido; mas ni sabes de dónde viene,
ni a dónde va; así es todo aquel que es nacido del Espíritu.

Juan 3:8

Índice

Capítulo 1 Introducción

1.1	Introducción.....	1
1.2	Objetivos.....	2
1.3	Justificación.....	3

Capítulo 2 Marco teórico

2.1	Física de semiconductores.....	4
2.1.1	Átomos y electrones.....	4
2.1.2	Bandas de energía.....	5
2.1.3	Resistividad y conductividad.....	6
2.1.3.1	Semiconductores.....	7
2.1.3.2	Movilidad.....	9
2.1.3.3	Nivel de Fermi.....	9
2.1.3.4	La unión <i>p-n</i>	10
2.1.3.5	Ecuaciones de Poisson y de continuidad.....	12
2.2	Fenómenos ópticos en Semiconductores.....	13
2.2.1	Absorción óptica.....	13
2.2.2	Generación de portadores por luz.....	14
2.3	Técnicas de fabricación de dispositivos microelectrónicos.....	15
2.3.1	Fabricación de obleas de silicio.....	15
2.3.2	Litografía.....	16
2.3.3	Oxidación térmica.....	16
2.3.4	Difusión.....	18
2.3.5	Implantación de Iones.....	19
2.3.6	Deposición de películas.....	21
2.3.7	Etching o grabado.....	22
2.3.8	Contactos e interconexiones.....	22
2.3.9	Contactos ohmicos.....	23
2.4	Celdas Solares.....	24
2.4.1	Antecedentes históricos.....	24

2.4.2 Figuras de desempeño de celdas solares.....	25
2.4.2.1 El sol.....	25
2.4.2.2 Los estándares AM.....	26
2.4.2.3 La curva I-V.....	28
2.4.2.4 Eficiencia <i>externa</i> de una celda solar.....	29
2.4.2.5 External Quantum Efficiency.....	30
2.4.2.6 Internal Quantum Efficiency.....	30
2.4.2.7 Power conversion efficiency.....	30
2.4.2.8 Problemas que afectan el desempeño de celdas solares.....	30
2.4.3 Generaciones de celdas solares.....	30
2.4.3.1 Primera generación.....	32
2.4.3.2 Segunda generación.....	32
2.4.3.3 Tercera generación.....	32

Capítulo 3 Simulación de Celdas Solares con Silvaco

3.1 Acerca de Silvaco.....	35
3.2 Conceptos básicos de simulación para celdas solares.....	36
3.2.1 Malla de cálculo.....	37
3.2.2 Materiales.....	39
3.2.3 Simulación de dispositivos ópticos.....	39
3.3 Proceso general de simulación de celdas solares con Silvaco.....	41
3.3.1.1 Otras características.....	46

Capítulo 4 Resultados de simulación

4.1 Control de profundidad de unión.....	47
4.2 La relación entre la profundidad de unión y la concentración de dopantes en el sustrato.....	48
4.3 Estudio de modelos de implantación.....	51
4.4 Estudio de parámetros de implantación tipo Gauss.....	52
4.5 Estudio del proceso de <i>drive-in</i>	54
4.6 Efectos de una capa de SiO ₂ en el proceso de implantación.....	56
4.7 Efectos del tiempo y la temperatura en un proceso de drive-in.....	57
4.8 Estudio más detallado de la unión P-N.....	62
4.9 Unión p-n de 1 μm por implantación de iones.....	64

4.10	Detalles de la zona de agotamiento de la unión p-n.....	66
4.11	Unión P-N abrupta.....	67
4.12	Efectos del dopaje en una celda solar con sustrato tipo P.....	70
4.13	Comparación entre uniones con sustrato P y N.....	73
4.13.1	Dopaje y portadores libres.....	73
4.13.2	Parámetros eléctricos.....	75
4.14	Efectos de la profundidad de unión con sustrato N.....	76
4.14.1	Resultados.....	76
4.15	Efectos de la profundidad de unión con sustrato P.....	79
4.15.1	Resultados.....	79
4.16	Variaciones simultáneas de sustrato, dopaje y profundidad de unión.....	82
4.16.1	Resultados.....	83
4.17	Reducción del tiempo de simulación.....	83

Capítulo 5 Conclusiones

5.1	Conclusiones.....	85
-----	-------------------	----

Tablas

Tabla 1: Intensidad solar y angulo de incidencia.....	28
Tabla 2: Historial de resultados para unión de 1 μm	65
Tabla 3: Porcentaje de error y número de muestras.....	84

Capítulo 1 Introducción

1.1 Introducción

Conforme avanzan los años la civilización depende cada día más de la energía eléctrica; las fuentes de energía son diversas y cada una de ellas tiene sus ventajas y desventajas. Una de las fuentes de energía más importantes en nuestro planeta es la luz solar.

En este trabajo se busca indagar sobre cómo influyen los diferentes parámetros de construcción de celdas solares en el desempeño usando simulación como herramienta.

De acuerdo al reporte del panorama energético de la Agencia Internacional de Energía (IEA, 2017) [1]:

- En 1974 el petróleo proveía el 45% del consumo de energía global, mientras que en 2017 ha bajado a 32%.
- El costo de producción de energía¹ solar fotovoltaica se ha reducido a la mitad en el periodo de 2010 a 2014. Esto indica que el uso de paneles solares se vuelve cada vez más conveniente
- La generación de energía mediante la energía solar es, de hecho, uno de las mejores posibilidades en términos de potencial: la cantidad de energía solar que llega a la tierra en una hora y 40 minutos (aproximadamente 544×10^{18} Joules) es la misma cantidad de energía que se consume en el planeta en 2014.
- Se espera que para 2040 las fuentes de energía alterna generarán el 40% de la energía consumida en el mundo.
- Se espera que en los siguientes se continuara apoyando el desarrollo de la energía renovable en todo el mundo; además el crecimiento del sector de energía solar fotovoltaica no solo se confina al sector industrial, sino que se espera que millones de hogares, comunidades y empresas inviertan directamente en proyectos de generación de energía eléctrica fotovoltaica distribuida.

Por otra parte, de acuerdo al reporte del panorama energético de México elaborado por la IEA en 2016 [2]:

- Las nuevas políticas de la reforma energética llevadas a cabo en 2013 establecen que para 2040 México debe reducir la emisión de gases de efecto de invernadero

¹ *Levelized Cost Of Electricity* (LCOE) se define como la tasa del costo total de producción vs la energía total producida durante todo el tiempo de vida de alguna fuente de energía.

causados por la generación de energía de 450g de CO₂/kWh en 2014 a 220g CO₂/kWh en 2040.

- De toda la electricidad generada en 2040, el 35% deberá provenir de fuentes de energía limpia.
- Para el 2040 se deberán agregar 120 GW de capacidad de generación de energía. Casi la mitad de estos deberán provenir de fuentes de energía renovables.
- El mercado en México de energía solar esta creciendo. Para poder cumplir sus metas de generación de energía, cerca de la mitad de la inversión total en generación de energía y la mitad de la adición de capacidad generadora deberán ser destinadas para fuentes renovables mediante granjas eólicas y fotovoltaicas.
- México se localiza en una de las mejores zonas de recepción de irradiación del sol: de 15 a 35 grados de latitud; los niveles de irradiación oscilan entre 4.4 y 6.3 kWh/m². El promedio es 5.5 kWh/m²; en 2014, la Secretaría de Energía estima que la energía solar total que es aprovechable es de 5000 GW (ó 5 TW).
- Es posible que en 2040 la energía solar provea al rededor de 10% de la energía producida en el país (entre 30 y 40 GW).
- Los principales métodos de generación de energía de fuentes renovables son la energía eólica y mediante paneles solares: la generación de energía mediante paneles solares salta de 0.2 TWh en 2014 a 52 TWh en 2040.
- La región de **Baja California** es la que más tiene potencial solar ya que tiene una irradiación solar solar de hasta 8.5 kWh.

1.2 Objetivos

El objetivo general de este proyecto es estudiar vía simulación cómo influyen los parámetros de diseño en las figuras de mérito de celdas solares semiconductoras.

Los objetivos específicos son los siguientes:

- Formación de uniones p-n mediante implantación con *drive-in*.
- Obtener las mejores figuras de mérito variando los siguientes parámetros de diseño: tipo de sustrato, características de dopaje y la profundidad de la unión
- Proponer una estructura de celda solar optimizada en base a los resultados de simulación obtenidos.

1.3 Justificación

Por otra parte, la simulación numérica de dispositivos semiconductores tiene varios usos importantes y atractivos:

- Ayuda a mejorar el entendimiento del funcionamiento interno de los dispositivos, incluso de secciones o fenómenos que normalmente no son observables de manera directa.
- Acelera a la investigación de nuevos dispositivos ya que:
 - no se usan activos físicos para cada experimento
 - no se necesita instalación y manejo de infraestructura compleja y costosa requerida para la investigación de dispositivos semiconductores.
 - se evita el uso y manejo de sustancias inflamables, tóxicas, etc.
- Reduce los costos por que se pueden hacer muchas iteraciones sin tener que fabricar estructuras experimentales.

Lo que se puede simular es:

- Proceso de fabricación
- La operación del dispositivo
 - Fenómenos de transporte de carga en dispositivos y sistemas.
 - Efectos de la temperatura en el funcionamiento de dispositivos.
 - Comportamiento del dispositivo bajo diferentes condiciones controladas

Capítulo 2 Marco teórico

2.1 Física de semiconductores

Para poder entender la metodología del simulador es necesario revisar las bases teóricas de la física de estado sólido que permiten la formulación de dispositivos microelectrónicos tales como transistores, diodos, LEDs y, en especial, las celdas solares.

2.1.1 Átomos y electrones

Es bien conocido que los materiales se componen de átomos, cada átomo tiene un núcleo (con carga positiva) y hay electrones (con carga negativa) orbitando alrededor de éste. La interacción electrostática entre el núcleo y los electrones son los responsables de mantener la estructura unida.

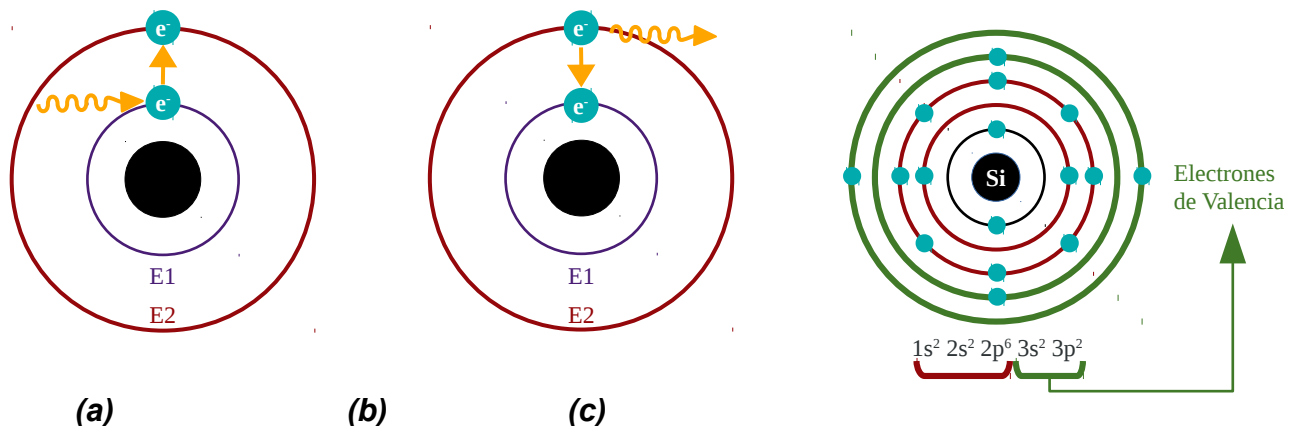


Figura 1: (a) Un electrón absorbe energía y salta a una órbita superior (b) El electrón pierde energía y cae a una órbita inferior (c) Configuración electrónica del Silicio

De acuerdo a Niels Bohr los electrones existen en órbitas, capas o niveles bien definidos alrededor del núcleo; los electrones pueden absorber energía y moverse al siguiente nivel, como en la Figura 1 (a) o perder energía y caer al un nivel inferior, como en la Figura 1 (b). La energía absorbida o emitida es igual a la diferencia de energía entre los dos niveles E1 y E2.

Exceptuando la primera capa de valencia, que solo puede acomodar 2 electrones, para lograr la estabilidad cada átomo necesita que la capa de valencia esté llena por ocho electrones. Los elementos con cinco o más electrones de valencia van a sujetar fuertemente sus electrones en la capa de valencia y van a atraer otros electrones para completarla y lograr la estabilidad. Los electrones adicionales van a incrementar la carga negativa del átomos convirtiéndolos en *iones negativos*. De manera contraria, los átomos con menos de 3

electrones de valencia no sujetan los electrones de manera tan fuerte como los elementos con cinco o mas electrones y dejarán escapar a sus electrones para lograr la estabilidad; el átomo se convierte en un *ion positivo*. Los iones positivo y negativo se atraen y forman **enlaces iónicos**. Por otra parte los elementos con cuatro electrones en la capa de valencia (Como el silicio, ver Figura 1 (c)) prefieren compartir sus electrones con otros átomos; de esta manera se crean **enlaces covalentes**.

2.1.2 Bandas de energía

Un sólido esta formado por un gran numero de átomos (N) cercanos entre si y los electrones son afectados por las fuerzas electrostáticas producidas por los átomos cercanos.

* Fig. 3-3, Solid State Electronics, Streetman 6th Ed.

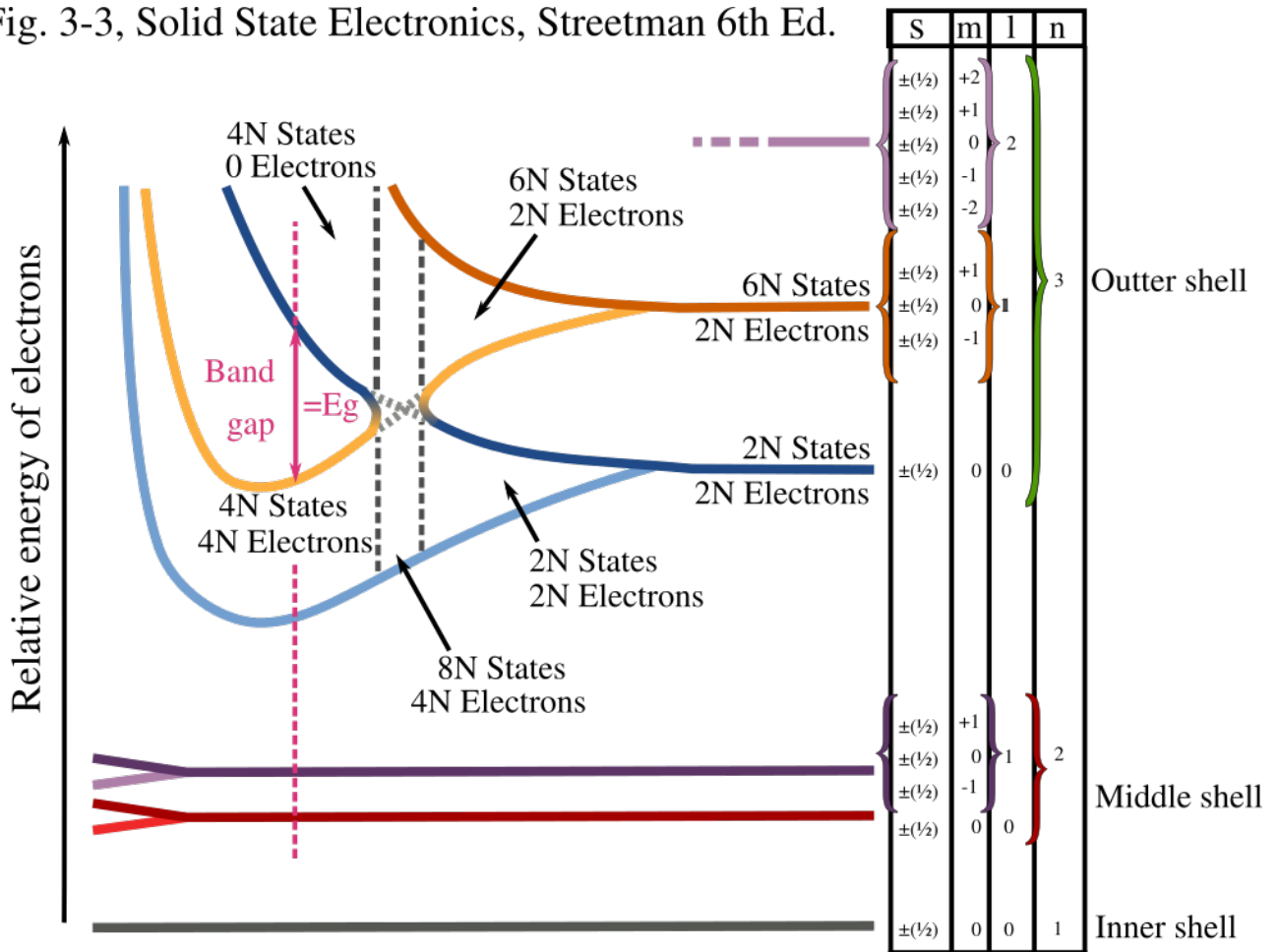


Figura 2: Niveles energéticos de electrones (Adaptación de [3] p. 66)

Cuando estos se aproximan los niveles de energía de cada átomo se ven influenciados por los otros átomos, de manera que el nivel de energía del átomo se divide en una cantidad de N niveles formando una *banda* (Figura 2).

La banda de energía más alta que contiene electrones es la **banda de valencia**, mientras que los niveles vacíos por arriba de la banda de valencia conforman la **banda de conducción**, finalmente, en los aislantes y semiconductores existe una **banda prohibida** entre la banda de conducción y la de valencia (Figura 3) donde no puede haber electrones.

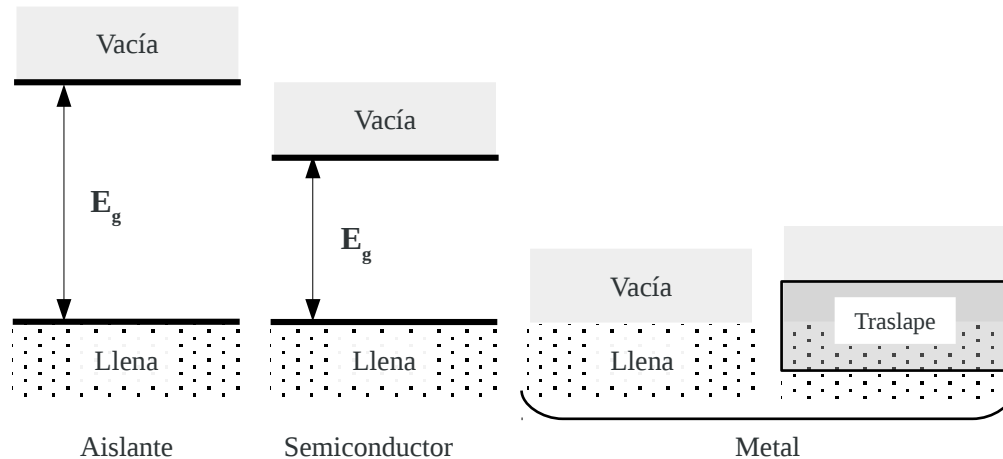


Figura 3: De izquierda a derecha: diagrama de bandas para aislante semiconductor y metales (últimas dos). Adaptado de [4] p. 68

Los metales no tienen banda prohibida o las bandas de valencia y conducción están traslapadas así que solo se necesita muy poca energía para que los electrones del metal participen en la conducción.

Existen algunos materiales que tienen una banda prohibida muy grande; un electrón necesita una gran cantidad de energía para superar la banda prohibida; estos son los aislantes.

Los sistemas eléctricos usan casi exclusivamente conductores y aislantes; en cambio, los sistemas electrónicos usan primordialmente semiconductores debido a que es posible controlar sus propiedades de acuerdo a nuestras necesidades.

2.1.3 Resistividad y conductividad

Si clasificamos los diferentes materiales existentes en la naturaleza podemos categorizarlos en base a sus propiedades eléctricas: conductores, semiconductores y aislantes. Dos de sus propiedades más importantes son la resistividad (ρ) y la conductividad (σ) relacionadas por la ecuación: $\rho = 1/\sigma$. En la Figura 4 podemos ver rangos de conductividad y resistividad de conductores, semiconductores y aislantes más comunes.

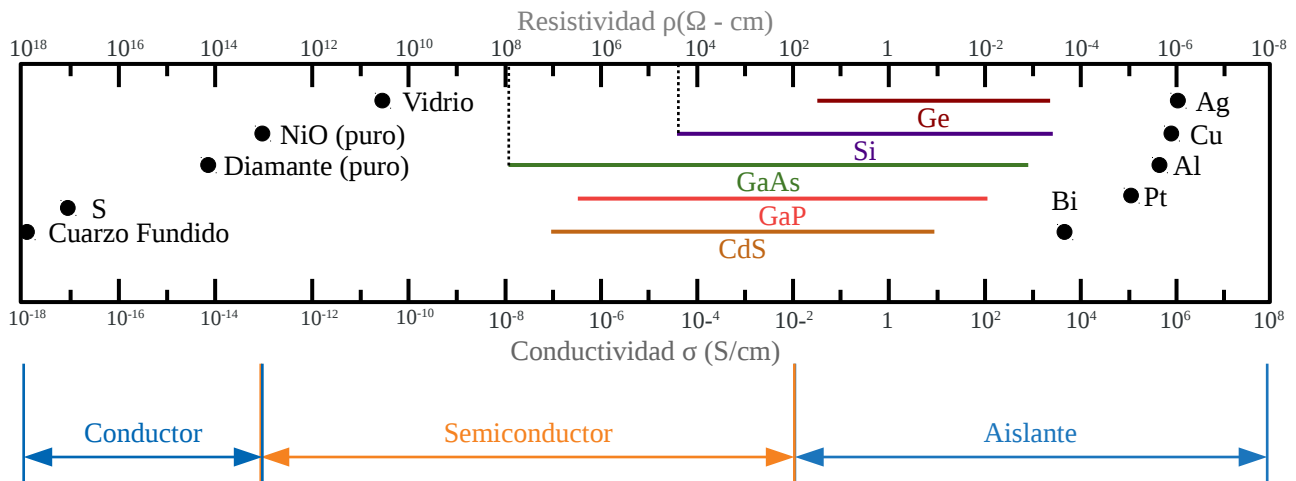


Figura 4: Rango típico de conductividad para aislantes, semiconductores y conductores. (Adaptado de [5] p.18).

La explicación de la resistividad/conductividad se puede entender en base a la estructura de bandas en un cuerpo sólido. Los electrones libres tienen mayor energía y se encuentran en la *banda de conducción*, mientras que los electrones de las capas inferiores tienen menos energía y por ende están firmemente sujetos al núcleo y necesitan mucha energía para convertirse en un electrón libre, por ende solo éstos participan en la conducción.

En un semiconductor los electrones en la banda de valencia pueden excitarse térmicamente y llegan a la banda de conducción. Conforme la temperatura se acerca al cero absoluto, los electrones en la banda de valencia cada vez tienen menos energía térmica y no se pueden liberar. La cantidad de electrones libres aumenta con la temperatura, al igual que la conductividad, pero solo hasta un nivel máximo donde la oscilación de los átomos comienza a afectar negativamente la velocidad de los electrones debido a que aumentan la cantidad de choques entre átomos y electrones libres. Entre más oscilación haya entre los átomos, mayor será la dificultad de que los electrones libres se muevan por el material.

Otra manera de generar electrones libres es mediante la irradiación con luz.

2.1.3.1 Semiconductores

Como podemos ver en las figuras 3 y 4, un semiconductor es un material cuya conductividad eléctrica debida al flujo de electrones se encuentra en un nivel medio entre aislantes y conductores. La conductividad de un semiconductor se encuentra entre 10^3 y 10^{-6} Siemens por centímetro (S/cm).

Es fácil imaginar el mecanismo de conducción en el caso de un metal ya que cerca de 0 K ya tienen una gran cantidad de electrones libres para participar en la conducción; basta con

proporcionar un campo eléctrico para que comience el flujo de electrones por el conductor. Sin embargo, el mecanismo del flujo de corriente a través de un semiconductor es más complicado ya cerca de 0 K la banda de conducción esta vacía y aunque la cantidad de electrones en la banda de conducción y huecos en la banda de valencia incrementan con la temperatura, la cantidad de portadores libres en ambas bandas aún es demasiado pequeña.

Pero una de las características más importantes de los semiconductores es que es posible controlar la conductividad del material agregando intencionalmente impurezas o dopantes. También se puede generar portadores libres mediante iluminación con luz.

Otra manera de mostrar la estructura interna de un semiconductor se ve en la Figura 5. Los electrones de valencia están compartidos entre los átomos de la estructura atómica del semiconductor. El material es eléctricamente neutro ya que todos los átomos contienen cuatro electrones.

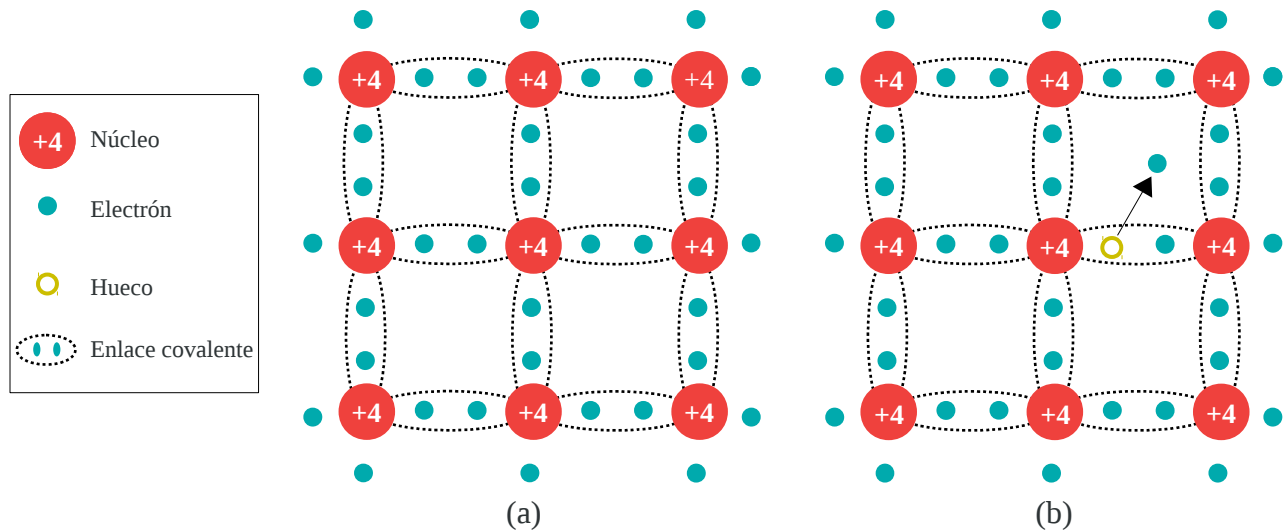


Figura 5: Estructura atómica de un semiconductor. Tomada de [6] p. 11

En condiciones de equilibrio (sin perturbaciones externas y a temperatura ambiente) hay una cantidad pequeña de portadores libres, electrones y huecos (10^{10} cm^{-3}), pero si las condiciones de equilibrio se pierden y un electrón absorbe suficiente energía para volverse un electrón libre (como, por ejemplo, absorbiendo un fotón) y el enlace covalente se rompe; el átomo que tenía cuatro electrones ahora solo tiene tres y se ha quedado con carga positiva, un hueco, generando de esta manera (Figura 5 (b)) un par de electrón-hueco adicional (EHP, por sus siglas en inglés: *Electron-Hole Pair*).

2.1.3.2 Movilidad

Los portadores de carga (como los electrones y huecos) se mueven dentro de un sólido constantemente y aún en condiciones de equilibrio térmico los portadores sufren choques aleatorios con los átomos del material, pero de manera estadística el movimiento neto de portadores de carga es nulo. Cuando se aplica un campo eléctrico al material, cada electrón sufre una fuerza neta proporcional al campo eléctrico causando un desplazamiento; su velocidad depende, entre otros factores y a la magnitud del campo eléctrico.

$$V_{p,n} = \mu_{p,n} E$$

Donde $V_{p,n}$ es la velocidad de arrastre (*drift velocity*) para huecos o electrones, E es el campo eléctrico y μ es la movilidad.

Como resultado de este movimiento se obtiene una densidad de corriente neta de portadores:

$$J = q(n\mu_n + p\mu_p)E = \sigma E$$

2.1.3.3 Nivel de Fermi

En sistemas con gran número de partículas similares con giro (*spin*) de $\frac{1}{2}$ (ej. electrones) la distribución de electrones en el rango de los niveles de energía permitidos y en equilibrio térmico se puede modelar en base a la estadística de Fermi-Dirac.

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

Donde:

- **f(E)** – La función de distribución de Fermi-Dirac. Es la probabilidad de que un nivel E este ocupado solamente en los niveles E ; No hay electrones en la banda prohibida.
- **k** - Constante de Boltzmann (8.62×10^{-5} eV/K).
- **E** - El estado de energía.
- **E_F** - El nivel de Fermi, correspondiente a la mitad del valor de la banda prohibida.
- **T** - Temperatura

Lo anterior es correcto si se mantienen tres condiciones: 1) Las partículas son idénticas, 2) la interacción entre dichas partículas es tan pequeña que se puede ignorar y 3) cada partícula tiene su propio estado.

La concentración de electrones en la banda de conducción esta dada por

$n_0 = N_c f(E_c)$ ó $n_0 = N_c e^{-(E_c - E_f)/kT}$, donde $N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$ y m_n^* es la masa efectiva del electrón.

Y la concentración de huecos en la banda de valencia es:

$p_0 = N_v [1 - f(E_v)]$ ó $p_0 = N_v e^{\frac{-(E_f - E_v)}{kT}}$ donde $N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$ y m_p^* es la masa efectiva de un hueco.

Y además, en equilibrio, la relación entre n_0 y p_0 es:

$$n_0 p_0 = n_i^2$$

Donde n_i es la concentración de portadores para un semiconductor intrínseco.

Si N_c y N_v son iguales, el nivel de Fermi en un semiconductor esta a la mitad de la banda prohibida, pero si N_c y N_v son diferentes, el nivel de Fermi se desplaza de la mitad.

Las concentraciones de los portadores móviles se pueden obtener en relación a n_i :

$$n_0 = n_i e^{(E_f - E_i)/kT} \quad \text{y} \quad p_0 = n_i e^{(E_i - E_f)/kT}$$

La concentración de portadores en un material intrínseco es dependiente de la temperatura mediante el factor kT : $n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-E_g/2kT}$

2.1.3.4 La unión p-n

Una unión p-n es un semiconductor con dos regiones bien definidas con diferente conductividad. Al momento de la fabricación se puede controlar tanto el tipo de semiconductor (positivo o negativo), como el número de portadores para satisfacer las necesidades de algún diseño mediante la adición controlada de dopantes.

Consideremos lo que pasa cuando un semiconductor tipo p se junta con un semiconductor tipo n . formando una unión $p-n$. Primero encontraremos que en este dispositivo se pueden distinguir tres zonas o regiones, como se muestra en la Figura 6 (a): la región p , la zona de *agotamiento* (entre x_{n0} y x_{p0}) y la región n . La unión metalúrgica se encuentra justo en $x=0$ y a partir de ahí los electrones excedentes de la región n se difunden hacia la región p , dejando atrás una región de iones positivos; de igual manera los huecos de la región p se difunden hacia la región n , dejando atrás una región de iones negativos. La zona de agotamiento recibe su nombre debido a que justo en esta zona existe un campo eléctrico inmóvil de entre 10^3 a 10^5 V/cm, que rechaza los portadores, manteniendo esta zona libre de portadores de carga móviles Ver la Figura 6 (b).

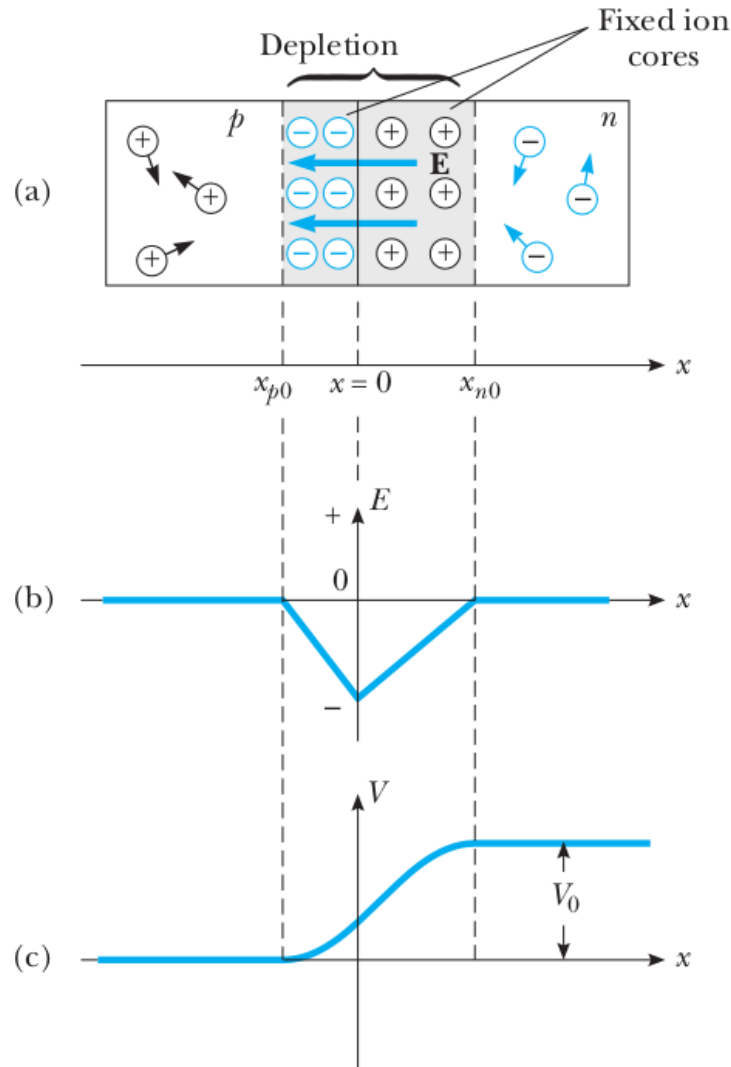


Figura 6: (a) Disposición clásica de una unión p-n (b) Campo eléctrico interno vs x (c) Potencial interno vs x.
Adaptado de: [7] p.435

El campo eléctrico de la Figura 6 (b) crea una barrera de potencial que impide que los electrones y huecos se difundan aún más y como consecuencia, la corriente que pasa por la unión es 0 A en condiciones de equilibrio.

La característica más notable de la unión p-n es que solo permite el paso de corriente en un solo sentido, osea, un diodo. Si se polariza la unión de manera directa (ver Figura 7 (a)), la corriente que pasa por el dispositivo crece de manera exponencial. En cambio, cuando se

polariza inversamente, la corriente que pasa por el diodo decrece de manera exponencial por que la barrera de potencial se ha incrementado; la corriente seguirá disminuyendo hasta llegar a saturarse, lo cual corresponde con la corriente de saturación que se muestra en la Figura 7 (b).

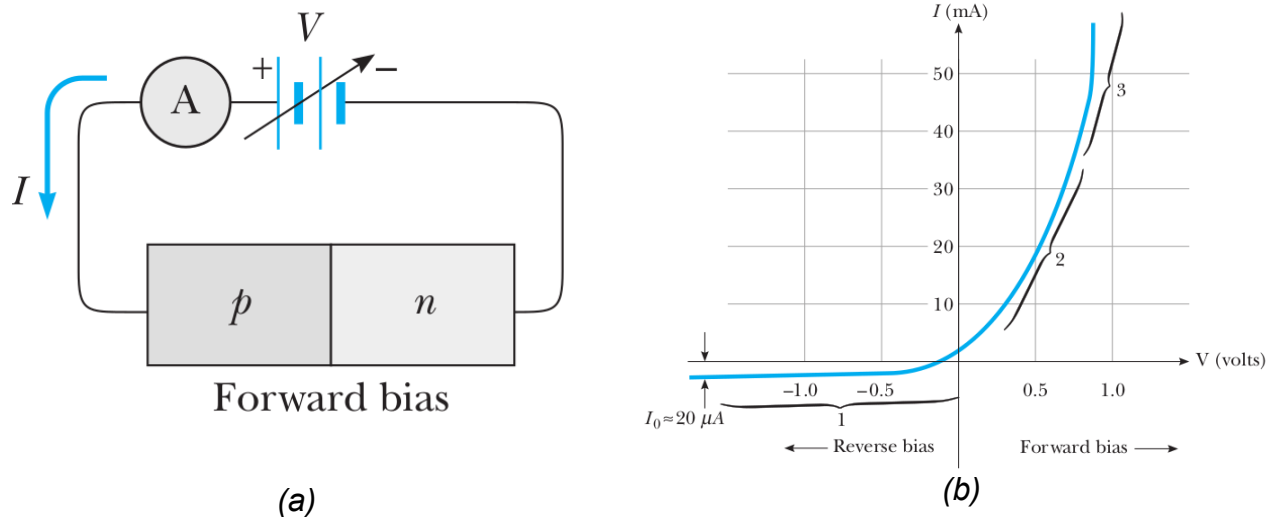


Figura 7: (a) Polarización directa de un diodo de unión p-n (b) Curva característica de un diodo

La relación entre la corriente y voltaje de una unión p-n es:

$$I = I_0 (e^{qV/kT} - 1)$$

Donde I_0 es la corriente de saturación, V es el valor del voltaje de polarización, q es la carga del electrón, k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura.

2.1.3.5 Ecuaciones de Poisson y de continuidad

La cantidad de flujo eléctrico que sale de una superficie cerrada es igual a la carga que envuelve dividido entre la permitividad:

$$\int_S \epsilon \vec{E} \cdot \vec{ds} = Q$$

Donde ϵ es la permitividad local, \vec{E} es el campo eléctrico, \vec{ds} es la superficie cerrada y Q es la carga.

La ecuación de Poisson relaciona el potencial eléctrico con la densidad de carga en el espacio.

$$\text{div}(\epsilon \nabla \psi) = -\rho$$

Donde ψ es el potencial electrostático, ρ es la densidad de carga en el espacio, ∇ es el operador Nabla y div es el operador de divergencia (el producto entre nabla y un vector).

Las ecuaciones de continuidad de portadores en forma diferencial son

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_n + G_n - R_n \quad \text{y} \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_p + G_p - R_p$$

para electrones y huecos respectivamente.

El diferencial dn/dt indica la cantidad de portadores con respecto al tiempo, q es la carga del electrón, $\nabla \cdot \vec{J}_{n,p}$ es la densidad de corriente, $G_{n,p}$ es la generación de portadores por unidad de tiempo y $R_{n,p}$ es la recombinación.

La componente de densidad de corriente están relacionadas con la carga, la movilidad y el nivel quasifermi de la siguiente manera

$$\vec{J}_n = q(\mu_n E_n n + D_n \nabla n) \quad \text{y} \quad \vec{J}_p = -q(\mu_p E_p p + D_p \nabla p)$$

para electrones y huecos respectivamente. Donde p o n son la concentración de huecos y electrones, respectivamente, μ_p y μ_n son las movilidades para huecos y electrones, respectivamente, D_n y D_p son los coeficientes de difusión de huecos y electrones.

Los niveles cuasifermi se pueden definir mediante la aproximación de Boltzmann:

$$\phi_n = \psi - \frac{kT_L}{q} \ln \frac{n}{n_{ie}} \quad \text{y} \quad \phi_p = \psi - \frac{kT_L}{q} \ln \frac{p}{n_{ie}}$$

para electrones y huecos respectivamente, donde ψ es el potencial electrostático, k es la constante de Boltzmann, T_L es la temperatura, p ó n es la concentración de huecos o electrones, respectivamente y q es la carga del electrón.

2.2 Fenómenos ópticos en Semiconductores

2.2.1 Absorción óptica

Cuando un semiconductor es iluminado, pueden ocurrir tres cosas:

- La energía $h\nu$ del fotón es mayor al de la banda prohibida ($h\nu > E_g$): el fotón creará un par de electrón-hueco y el exceso ($h\nu - E_g$) de energía será disipada como calor.
- La energía $h\nu$ del fotón es igual a la de la banda prohibida ($h\nu = E_g$), el fotón creará un par de electrón hueco.

- Si la energía $h\nu$ del fotón es menor a la de la banda prohibida ($h\nu < E_g$), el fotón solamente será absorbido si hay niveles energéticos disponibles en la banda prohibida debido a impurezas químicas o defectos.

La absorción óptica se modela matemáticamente de la siguiente manera. Asumamos que existe un flujo de fotones I_0 en unidades de fotones $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ y con energía $h\nu$ incidiendo sobre un semiconductor con banda prohibida E_g . y además $h\nu > E_g$. El número de fotones que van siendo absorbidos en una *profundidad* Δx esta dado por $\alpha I_0(x) \Delta x$, donde α es una constante de proporcionalidad definida como el *coeficiente de absorción*. La ecuación que define la absorción de luz de un semiconductor es:

$$-\frac{dI(x)}{dx} = \alpha I(x)$$

Con solución:

$$I(x) = I_0 e^{-\alpha x}$$

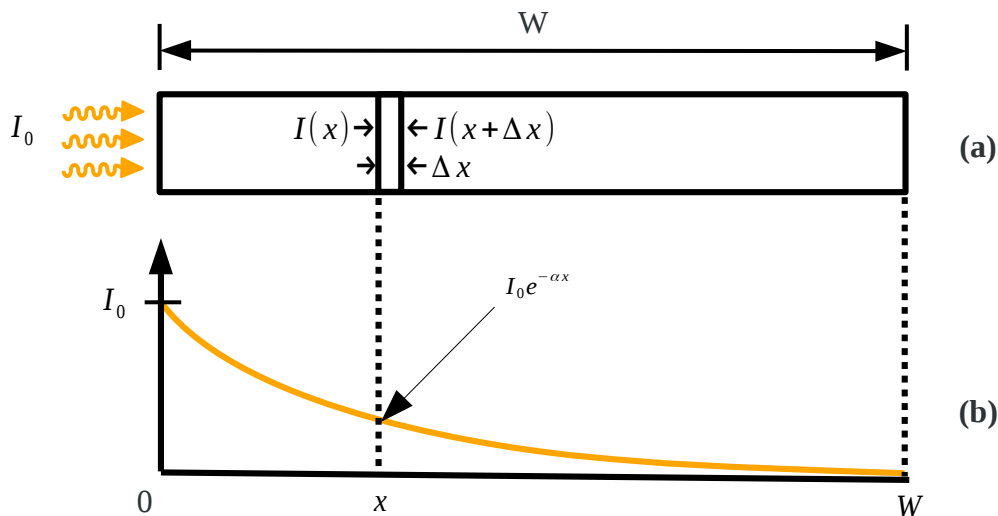


Figura 8: Absorción óptica; (a) Semiconductor bajo iluminación (b) Decaimiento exponencial de flujo de fotones. (Tomado de [5] p. 286)

2.2.2 Generación de portadores por luz

Cuando los fotones penetran un semiconductor, por un tiempo muy corto cada fotón se convierte en un par electrón-hueco si su energía es mayor que la banda prohibida. Cuando esto ocurre en la zona de agotamiento de una unión $p-n$, el par electrón-hueco recién generado se separa debido a la acción del campo eléctrico de la zona de agotamiento; los

electrones son recolectados por la parte n y los huecos por la parte p . Por otra parte, en un rango equivalente a 1 vez la longitud de difusión (L_n) comenzando por la zona de agotamiento, los portadores minoritarios generados se difunden hacia la zona de agotamiento e inmediatamente son arrastrados por el campo eléctrico existente.

Si la unión se ilumina uniformemente con fotones de energía $h\nu > E_g$ se están agregando portadores de carga a una tasa de generación de g_{op} (EHP/cm³-s).

El número de electrones y huecos creados por unidad de tiempo dentro del rango de una longitud de difusión son $AL_n g_{op}$ y $AL_p g_{op}$ respectivamente.

Y al final la corriente generada de manera óptica es:

$$I_{op} = q A g_{op} (L_n + L_p + W)$$

Donde I_{op} es la corriente generada por la luz, q es la carga del electrón, A es el área, g_{op} la tasa de generación de portadores de carga, L_n y L_p son las longitudes de difusión para electrones y huecos, respectivamente, y W es el ancho de la zona de agotamiento.

2.3 Técnicas de fabricación de dispositivos microelectrónicos

Para entender el funcionamiento de Silvaco Athena es conveniente comprender algunos de los procesos de fabricación de dispositivos microelectrónicos.

2.3.1 Fabricación de obleas de silicio

La mayoría de las obleas usadas en celdas solares usan las mismas dimensiones que las usadas en la industria microelectrónica. Para maximizar el espacio, las obleas para celdas solares tienen forma cuadrada, pero con la esquina redondeada. Esto reduce el área expuesta de la celda solar de 2% a 5% en comparación con un cuadrado de dimensiones similares [8]. Los procesos más usados para fabricar obleas para la industria fotovoltaica son:

- Czochralski: Es el más conocido de todos. El producto final del proceso Czochralski es un lingote de Silicio cristalino con diferentes grados de impurezas controladas. El lingote es cortado en obleas circulares con diámetros de entre 25 y 450 mm de diámetro y grosor de alrededor de 500 μm .

En las últimas décadas la industria microelectrónica ha desarrollado la capacidad de crecer cristales de Silicio puro, sin defectos usando simulación numérica para predecir el comportamiento de la solidificación del Silicio en las diversas variaciones del proceso de crecimiento Czochralski [9].

Un método alternativo de fabricación del sustrato de celdas solares es fundición de Silicio sobre un molde para obtener obleas a partir de lingotes (*Silicon Ingot Casting [10]*). Este método es especialmente útil para fabricación de celdas solares de silicio multicristalino de alta calidad, útil para fabricar celdas solares con mayor eficiencia, de entre 16 y 17%. En los últimos años, éste método de fabricación ha sufrido mejoras en economía y reducción en la densidad de defectos cristalinos gracias a la simulación por computadora.

2.3.2 Litografía

Las técnicas de litografía son cruciales para la fabricación de dispositivos microelectrónicos. Estas técnicas permiten depositar películas delgadas de diferentes materiales para cortar agujeros o *ventanas* que hacen función de barrera de protección para procesos de difusión, implantación de iones o como aislantes entre material conductor y el sustrato de silicio. De manera análoga hay zonas que deliberadamente no son cubiertas y funcionan como ventanas para permitir la fabricación de un contacto o para permitir la penetración de impurezas en procesos de difusión o implantación de iones.

La fotolitografía se refiere, en general, a todos los procesos necesarios para la fabricación de máscaras y la transferencia de patrones de dichas máscaras a la superficie de una oblea. El proceso fotolitográfico es crítico para la producción de circuitos integrados y el número de pasos de dicho proceso normalmente sirve como una medida de la complejidad cuando se comparan procesos de fabricación.

El método consiste en aplicar resina fotosensible a la oblea, previamente limpia, y después exponer solo ciertas áreas de la oblea a la luz UV ($\lambda < 300\text{nm}$) mediante una máscara metálica. Algunos materiales fotosensibles se sensibilizan al ser expuestos a la luz UV y otros a la inversa. Se calienta la oblea para endurecer el material fotosensible expuesto. A continuación se somete a un proceso de limpieza que removerá las secciones del material fotosensible que no han sido endurecidas; la oblea se vuelve a limpiar y se somete al siguiente proceso (*etching*, oxidación, CVD, etc). Finalmente, para remover todo el el material fotosensible que falta se somete la oblea al proceso de limpieza orgánica.

2.3.3 Oxidación térmica

Incluso a temperatura ambiente (25 °C) al momento de la exposición al oxígeno, la superficie de una oblea de silicio comienza la formación de una fina capa de dióxido de silicio (de algunos angstroms), llamada óxido nativo. Luego, la capa de óxido crecido es un aislante eléctrico de alta calidad y puede ser usado como material de barrera durante el procedimiento de deposición de impurezas e implantación de iones.

El proceso de oxidación normalmente se lleva a cabo a altas temperaturas de entre 900 °C y 1200 °C para obtener capas mas gruesas de SiO₂. Se usan dos tipos de óxido:

- a) **Óxido seco:** cuando el proceso de oxidación se realiza en un atmósfera que solamente contiene oxígeno.
- b) **Óxido húmedo** cuando el proceso de oxidación se realiza en una atmósfera controlada que contiene oxígeno y vapor de agua.

El óxido seco se considera de mejor calidad que el óxido húmedo, pero el óxido húmedo se crece más rápido que el óxido seco. En cualquiera de los dos procesos de oxidación el oxígeno penetra en la oblea de silicio y se difunde para luego reaccionar con el silicio formando SiO₂ expandiéndose de tal manera que la capa final de óxido ocupa aproximadamente 54% por encima de la superficie y 46% por debajo de la superficie original.

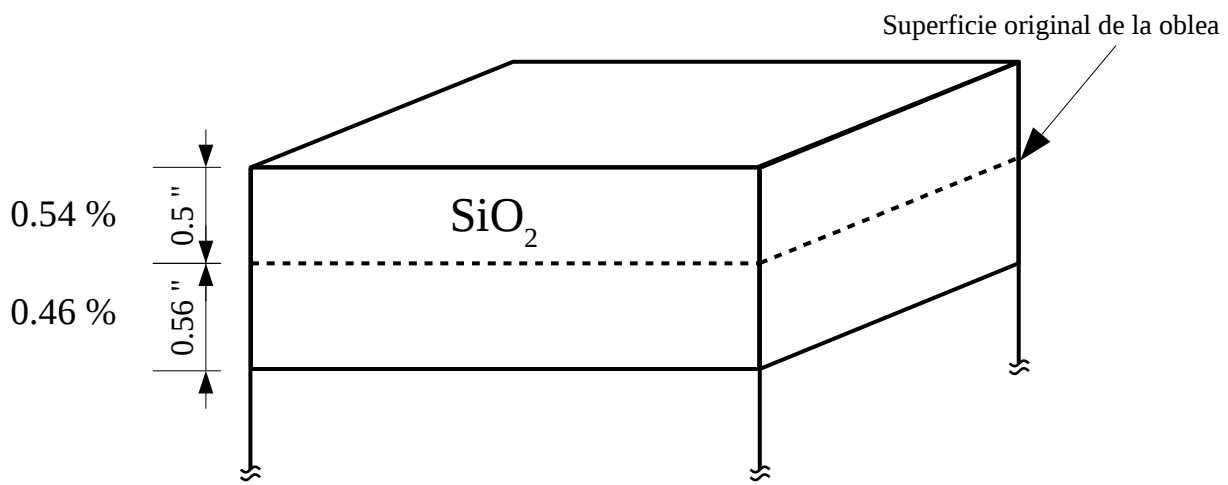


Figura 9: Crecimiento de óxido arriba y por debajo de la superficie de la oblea

La oxidación se puede modelar usando la ley de Fick para la difusión:

$$J = -D \frac{\partial N(x,t)}{\partial t}$$

Donde **J** es el flujo de Oxígeno por unidad de área, **D** es el coeficiente de difusividad térmica (específica para cada material) que representa cuán rápido un material reacciona a un cambio de temperatura y **N(x,t)** es la concentración del oxígeno dentro del Silicio. El signo negativo indica que el Oxígeno se mueve de una región de mayor concentración a una de menor concentración.

La tasa de crecimiento de capas finas de SiO_2 crecen proporcionalmente al tiempo, pero entre más grueso se vuelve la capa, la tasa de crecimiento se vuelve más lenta.

2.3.4 Difusión

La difusión es uno de las técnicas más usadas para la creación de dispositivos microelectrónicos; permite la introducción de dopantes tales como Boro, Fósforo o Arsénico al Silicio y de esa manera es posible controlar el tipo de portadores de carga mayoritarios, así como permite el control de la resistividad de diferentes capas formadas en una oblea.

De manera similar a la oxidación, la difusión se puede modelar matemáticamente mediante la ley de Fick, donde el coeficiente de difusión se calcula de acuerdo a la temperatura, el dopante y el tipo de oblea.

Existen dos tipos de difusión:

- Difusión de fuente constante: La oblea absorbe parte de las impurezas y la concentración baja; para mantener la concentración de la impurezas al mismo nivel (constante) durante todo el proceso es necesario reponer la impureza que ya ha sido absorbida.
- Difusión de fuente limitada. Inicialmente hay una dosis aplicada (modelada como un impulso) que predispone el nivel de concentración, pero conforme el frente de difusión penetra la oblea la concentración en la superficie disminuye.

Algunos importantes procesos se derivan de la difusión.

- Difusión de dos pasos. Primero se hace una difusión de fuente constante (*pre-deposición*) y después se hace la difusión de fuente limitada (llamada *drive-in*) que hace que las impurezas penetren hasta la profundidad deseada.
- Difusiones sucesivas. Las obleas pasan por varios ciclos variados por temperatura y tiempo.

La mayoría de las difusiones son para formar uniones *p-n* convirtiendo el substrato tipo *p* a tipo *n* y viceversa. El punto donde la concentración de impurezas difundidas iguala a la concentración de fondo (de la oblea) es la **unión metalúrgica**.

Las impurezas se difunden de manera vertical y horizontal o lateral. Eso quiere decir la difusión ocurre también por debajo de las barreras como SiO_2 , metales y material fotorresistente.

El proceso de difusión se hace regularmente a temperaturas de entre 900 °C y 1200 °C y se pueden usar capas de SiO_2 para hacer máscaras y patrones, a excepción del Galio y el Aluminio que no funcionan muy bien con el SiO_2 .

Los sistemas normalmente usados para la difusión son hornos abiertos de alta temperatura y las fuentes de dopantes vienen en fase solida, liquida y gaseosa. Los dopantes mas usados en estos procesos son Boro, Fósforo y Antimonio por que se difunden bastante bien en Silicio. La deposición con Arsénico es más difícil y por eso se prefiere usar implantación de iones.

Muchos de los precursores usados para la difusión son altamente tóxicos así que deben de manejarse con cuidado.

2.3.5 Implantación de Iones

La implantación de iones usa un acelerador (usando alto voltaje) para introducir átomos de impurezas en la superficie de la oblea de silicio y ofrece varias ventajas con respecto a la difusión a altas temperaturas. La implantación de iones es un proceso que puede llevarse a cabo a bajas temperaturas lo cual minimiza la difusión de las impurezas por el calor. La posibilidad de usar bajas temperaturas también permite el uso de una mayor gama de materiales de barrera para enmascarar la implantación, como ejemplos: Material fotorresistente, óxidos, nitruros, Aluminio y otros metales lo que agrega una gran flexibilidad al momento de diseñar el proceso.

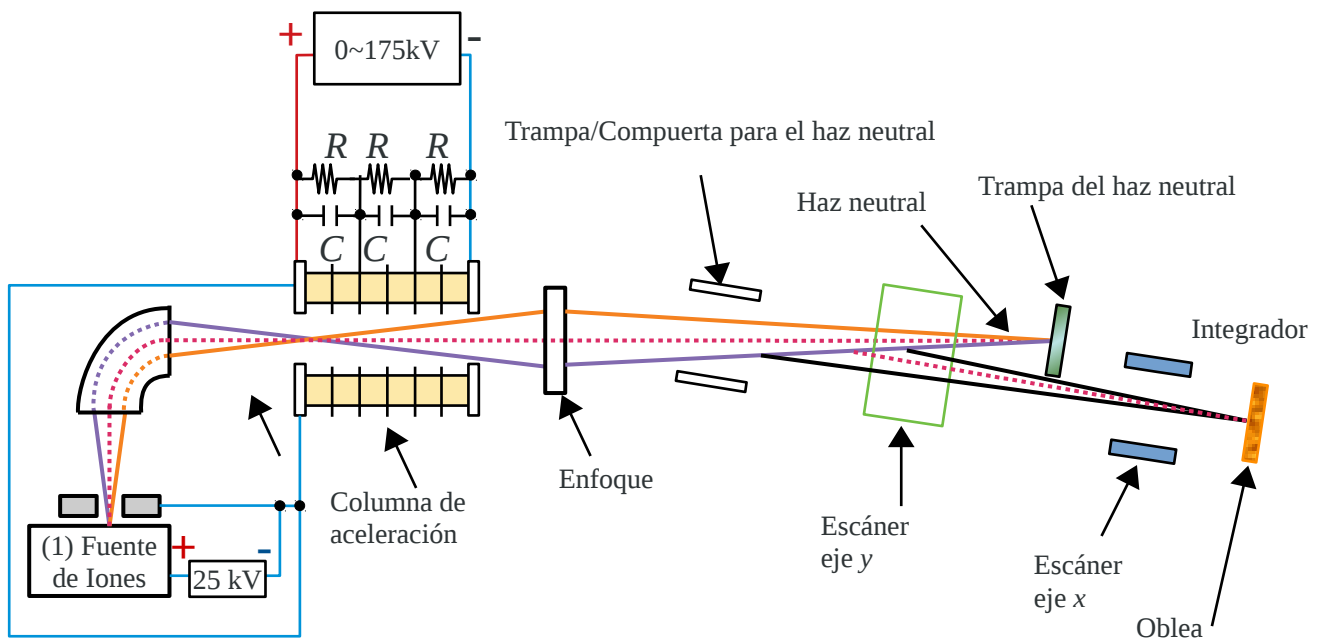


Figura 10: Diagrama de implantación de iones. Adaptación de [11] p.

En todos los esquemas analizados se pueden identificar los principales componentes:

- **Fuente de iones.** Operando con voltaje elevado (25 kV) que admite distintos tipos de material dopante, ya sea en gas o pulverizado.
- **Espectrómetro de masas.** Se trata de un magneto que induce un cambio de dirección de 90° en el haz de iones y hacia una ranura por la que solo pasa el dopante escogido.
- **Acelerador de voltaje.** La fuente de iones le da el impulso inicial al haz de iones, pero aún no tiene la energía suficiente. El acelerador de voltaje se encarga de brindar esa energía al haz de iones, la cual puede llegar hasta 25 MeV.
- **Deflector o Yugo.** Realiza la deflexión horizontal y vertical del haz de iones para hacer un barrido por todo el objetivo. El haz de iones pasa por una trampa (*neutral beam trap*) que desvía y atrapa las partículas con carga neutral.
- **Cámara de reacción.** Es donde el haz de iones impactará las obleas de silicio. Por seguridad esta cámara se sitúa cerca del potencial de tierra.

Cuando los iones entran a la oblea ocurren colisiones que gradualmente le quitan energía al ión hasta que eventualmente para en alguna parte del interior de la oblea. La interacción de los iones se modela estilísticamente como una campana de Gauss, donde el eje x es la distancia de penetración y el eje y es la concentración de impurezas. El promedio de la campana coincide con el rango de penetración proyectada (R_p) en el eje x y la concentración máxima (N_p) en el eje y . Algunos iones penetrarán más y otros menos, es decir algunos quedarán *rezagados* o *perdidos* (*straggled*); estos iones se caracterizan mediante la ayuda de la desviación estándar (σ) que reciben el símbolo ΔR_p ; dichos electrones penetraron más allá de la profundidad proyectada (R_p) o, por el contrario, no penetraron lo suficiente y quedaron lejos de R_p . Siguiendo con el modelo matemático estadístico, en la región de 2σ se concentra el 61% de los iones implantados, así mismo, en 2σ se concentra el 86% de los iones y en 6σ esta el 98.9% de los iones implantados. Si todos los iones implantados quedaron dentro del sustrato, la dosis total implantada (Q) es el área bajo la campana de Gauss.

La implantación de iones también permite el usar muchos mas materiales de impurezas que la difusión. En teoría, cualquier elemento puede ser ionizado e introducido a una oblea mediante implantación. Además la implantación ofrece mucho mejor control de la dosis introducida a la oblea, e incluso se pueden lograr un rango mucho mayor de dosis que la que permite la difusión.

Entre las desventajas de la implantación de iones:

- El costo es mucho más alto que la difusión.

- Hay problemas para lograr dosis mayores a 10^{16}cm^{-3} en tiempo razonable para ser usado en producción de alto volumen.
- Usa gran cantidad de energía eléctrica.

Aún así las ventajas superan a las desventajas y la implantación de iones es la técnica mas usada para la creación de circuitos integrados con transistores bipolares y MOS.

Los perfiles resultantes de la implantación por iones pueden ser modelados por un perfil de distribución gaussiano. La profundidad de la distribución dependen del tipo de ion implantado y la energía de implantación.

El efecto de *channeling* ocurre cuando los dopantes penetran más debido a que algunas partículas pasan por el intersticio entre los átomos de la red cristalina. Para corregir esto la implantación se hace normalmente a un ángulo de inclinación de 8 grados con respecto a la normal de la superficie de la oblea.

El proceso de implantación daña la superficie, así que normalmente después de la implantación se hace un proceso de recocido para remediar los efectos del daño. Las dosis bajas pueden resultar en la necesidad de recocido a temperaturas entre $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ hasta por 30 minutos. Pero si la capa superficial se convirtió en amorfa, el recocido solo se puede lograr mediante epitaxia de fase solida a temperaturas de solo $600\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Las implantaciones muy superficiales y poco profundas, requeridas para fabricación de tecnología con dimensiones de características menores a un micrómetro se pueden hacer usando poca energía (menos de 5 keV). Luego se somete el producto a un proceso de recocido rápido (RTA, del inglés *Rapid Thermal Annealing*) para activar el ion implantado manteniendo un producto con poca longitud de difusión D_t . La desventaja del tratamiento termal es que causa difusión de la capa implantada y afecta la profundidad de la unión que se encontrará a más profundidad

2.3.6 Deposición de películas

Los procesos de fabricación involucran muchos pasos en los cuales se depositan películas delgadas de diferentes materiales (SiO_2 , poli-Si, Si_3N_4 , etc.) sobre la superficie de la oblea. Los métodos más usados incluyen Evaporación CVD (*Chemical Vapor Deposition*), Epitaxia y *Sputtering* (erosión iónica).

El proceso de *Sputtering* se usa para depositar metales, Si, poly-Si y dieléctricos como SiO_2 y Si_3N_4 , pero requieren operar en presiones muy bajas, mientras que CVD y epitaxia pueden ser realizadas a presión atmosférica.

La ventaja de las técnicas de evaporación física (usando filamentos o haces de electrones) es que pueden ser usadas para depositar metales y otros materiales que pueden ser derretidos fácilmente. Como desventaja los sistemas de evaporación por haz de electrones pueden dañar las películas delgadas por la radiación y es difícil depositar materiales compuestos y aleaciones.

2.3.7 Etching o grabado

El grabado es un método bastante importante en la fabricación de celdas solares. Se usa en conjunto con capas de material fotosensible/foto-resistivo, el cual se endurece cuando es expuesto a la luz. Se pueden sensibilizar solamente ciertas áreas de interés mediante placas que contienen patrones. Una vez endurecida la capa de material fotosensible las capas no endurecidas pueden ser removida mediante dos métodos:

1. **Húmedo.** Se sumerge una oblea dentro de una solución química que ataca algún material de barrera, por ejemplo SiO_2 ; Solo ciertas áreas de la oblea serán atacadas por que el área restante esta cubierta de material fotosensible.
2. **Seco.** Se somete a la oblea a un tratamiento con plasma para remover el material de barrera.

2.3.8 Contactos e interconexiones

Es importante interconectar los dispositivos microelectrónicos entre ellos o hacia afuera del chip. En los 70's solo había difusión y metalización. Años más tarde se comenzó a usar Silicio policristalino, que ofrece resistencia laminar alta, se usan para interconexiones locales.

La metalización ofrece resistencia laminar baja y es posible combinar capas de polisilicio y metalización para obtener múltiples niveles de interconexión.

Problemas con la metalización:

- El Aluminio no es bueno para hacer conexiones poco profundas. La solución es usar capas de Tungsteno o Titanio como barreras de difusión que protegen aíslan las capas de Silicio o Siliciuros del Aluminio.
- *Electromigración:* En corrientes grandes causa tanto cortos como circuitos abiertos en capas metálicas. Una solución es usar aleaciones de Aluminio con 4% de cobre.
- *Spiking:* El silicio se difunde hacia el Aluminio causando cortos. Una solución es usar Aluminio mezclado con Silicio al 1%.

- El aluminio cubierto de capas de óxido o polymidel es demasiado rugoso. Para solucionar este problema se desarrolló el proceso damasceno que es chapar con Cobre y luego hacer pulimento químico mecánico para obtener niveles de metalización muy planos.

2.3.9 Contactos ohmicos

La manera de conectar la celda solar con el exterior es mediante una unión entre un semiconductor y un metal, llamada contacto ohmico. Idealmente la corriente que pasa a través de un contacto ohmico ideal es una función lineal del voltaje aplicado y la corriente puede circular en cualquier sentido, como se muestra en la Figura 11 (a). Este contacto ohmico ofrece una resistencia muy baja cuando es polarizado con voltaje bajo.

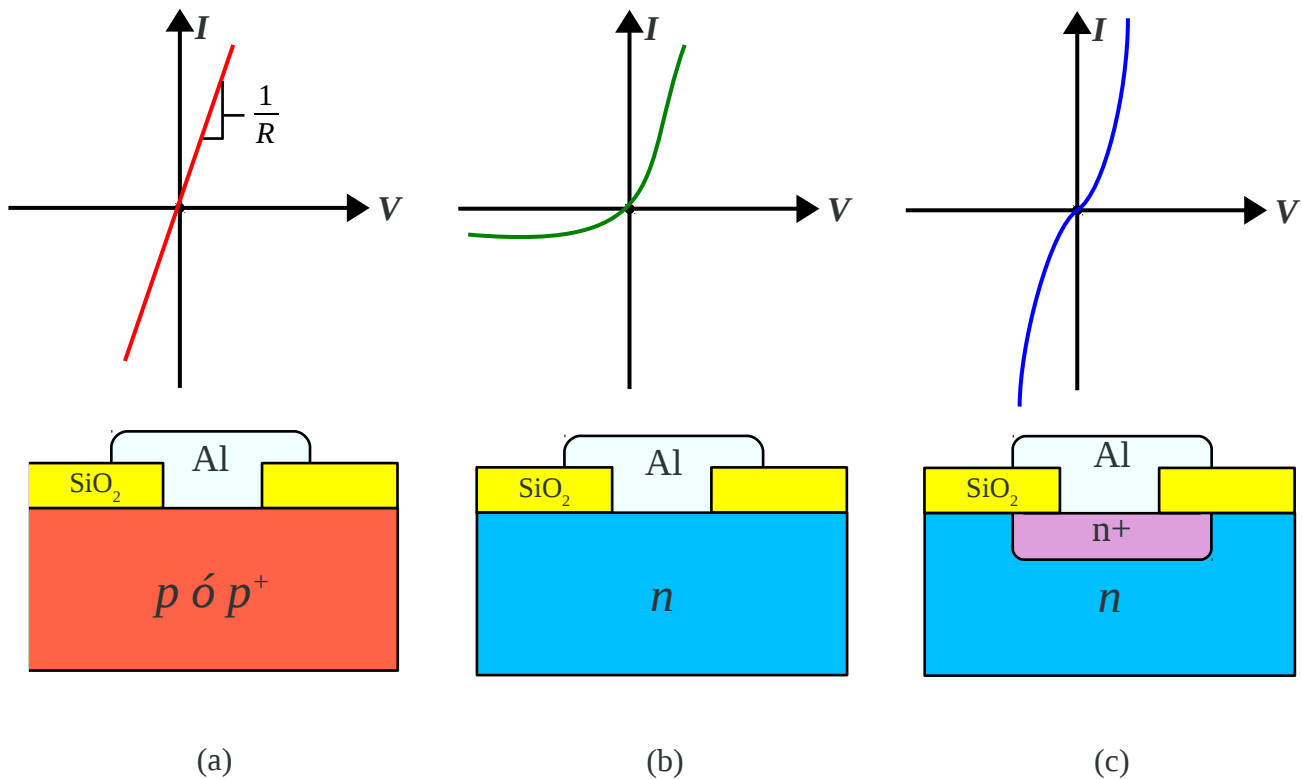


Figura 11: Tipos de contacto (a) Aluminio con semiconductor tipo p : contacto óhmico ideal (b) Aluminio con semiconductor tipo n : contacto rectificador (c) Aluminio con semiconductor n^+ : contacto óhmico no lineal. Adaptado de [11] p. 154

El problema ocurre cuando queremos fabricar un contacto ohmico para un semiconductor tipo n levemente dopado, como el de la Figura 11 (b). En este caso el contacto metálico se

comporta como un diodo Schottky de barrera, también llamado contacto rectificador. Para evitar este efecto, se crea una región altamente dopada (n^+) entre el contacto de aluminio y el sustrato n . En la Figura 11 (c) podemos ver que la curva IV de dicho contacto se asemeja más la de la Figura 11 (a); el contacto tendrá una pequeña caída de voltaje.

2.4 Celdas Solares

2.4.1 Antecedentes históricos.

En 1839, Alexandre Edmond Becquerel, de apenas 19 años, descubre el efecto fotoeléctrico cuando estudiaba los efectos eléctricos que ocurrían entre dos electrodos sumergidos en electrolitos. En 1869, W. G. Adams descubre la fotosensibilidad en Selenio [12]. En 1883 Charles Fritts demuestra la primera celda solar formada de Cobre, una película de Selenio y Oro [13] y luego en 1884, el mismo Fritts instala el primer arreglo de celdas solares en el techo de un edificio en Nueva York; esto cambia la percepción de las fuentes de energía por que la gente no pensaba en la luz como una fuente de energía o combustible. En 1905 Einstein explica el efecto fotoeléctrico y el fotovoltaico en base a la física cuántica [14]. En 1941 Russel Ohl descubre que el Silicio tiene mejor desempeño en comparación con el Selenio o el óxido de Cobre. Sus investigaciones lo llevan al descubrimiento de la unión p-n y los fenómenos de dopaje y eventualmente patenta, en 1941, una celda solar de Silicio [15] y en 1952 Ohl reporta una celda solar con eficiencia de 1%. En 1947 Maria Telkes reporta el 1% de eficiencia de conversión de directa de radiación solar con uniones termoeléctricas [16]. En 1953 científicos de Bell Labs anuncian mejoras a la eficiencia de una celda solar de 4.5% gracias a la difusión de Litio. Un año después, en 1954, Calvin Fuller, Gerald Pearson y Daryl Chapin, de los laboratorios Bell, anuncian la primera celda fotovoltaica de Silicio con eficiencia de alrededor de 6% (comparada con 0.5% de eficiencia de una foto celda comercial en esa época). En 1958 el satélite vanguard se convierte en el primer satélite equipado con celdas solares. Para 1959 Daryl Chapin simplifica el proceso de construcción de celdas solares; dicho proceso se convertiría en uno de los experimentos que los estudiantes de preparatoria de todo estados unidos harían con apoyo de Bell Systems [17]. En 1960 M. Rodot y colaboradores anuncian reportan eficiencia de 14% en celdas de Si. En el mismo año, William Shockley y Hans J. Queisser caracterizan matemáticamente las limitaciones de las celdas solares de unión p-n y describen el límite máximo de eficiencia de este tipo de celdas bajo diferentes condiciones [18]. En 1973 se reporta un nuevo récord de eficiencia con 15.2% usando una celda solar recubierta con antireflejante; para 1974 la eficiencia reportada asciende a 17.2%. En 1985 la eficiencia llega a 25% gracias a la tecnología PERL (Passivated Emitter, Rear Locally) [19].

A partir de los años setenta hay una explosión en la investigación y desarrollo de celdas solares. Los mejores registros de eficiencia reportada son de 46% y 44.4% para celdas solares con cuatro y tres uniones, respectivamente [20].

2.4.2 Figuras de desempeño de celdas solares

2.4.2.1 El sol

La luz que vemos durante el día es solo una fracción de la luz generada por el sol y que incide sobre la tierra. El sol libera la mayor cantidad de su energía (95%) en forma de luz; mucha de esta luz esta en el rango UV. El pico de la intensidad esta en el rango de luz verde.

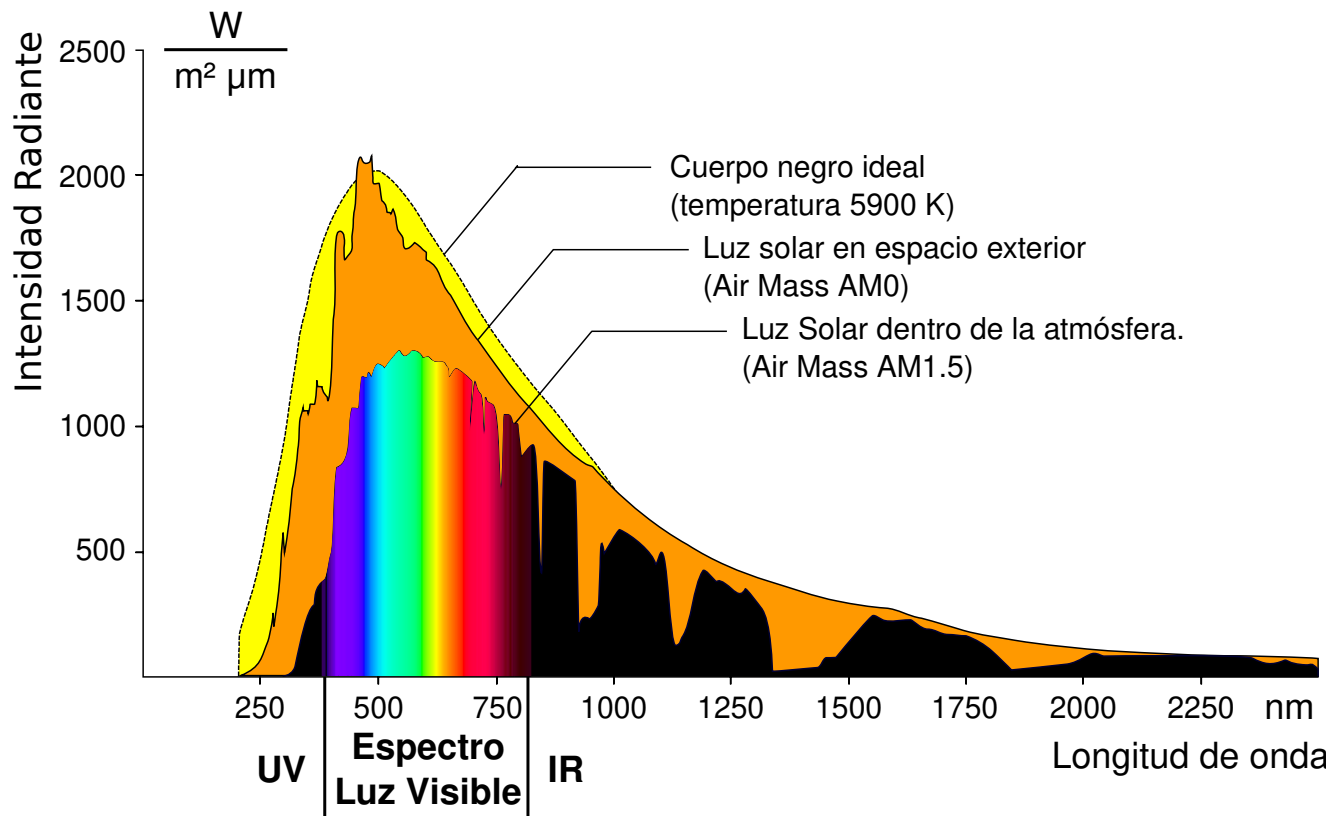


Figura 12: Espectro de luz visible irradiada por el sol

Si deseamos conocer la eficiencia de una celda solar primero tenemos que tener en cuenta cuánta energía esta llegando a la superficie de la celda solar.

En el interior del sol ocurre la fusión de átomos de Hidrógeno en Helio; el sol pierde masa a una tasa de 4300 millones de kilogramos cada segundo en forma de luz; en base a lo

anterior podemos calcular la cantidad de energía que emite el sol de manera continua mediante la ecuación de Einstein:

$$E = mc^2 = (4.3 \times 10^{12} \text{ g})(2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s})^2 = 3.864 \times 10^{26} \text{ gm}^2/\text{s}^2$$

La luminosidad del sol es de **3.828 x10²⁶ W** (ó 3.828 x10¹⁴ TW) y la distancia que hay entre el sol y la tierra es de **1 UA = 1.496x10¹¹ m**, con esto podemos calcular la *constante solar* de la siguiente manera:

$$\sigma = \frac{P_{sol}}{4\pi r^2} = \frac{3.828 \times 10^{26} \text{ W}}{4\pi(1.496 \times 10^{11} \text{ m})^2} = 1361 \text{ W/m}^2$$

Lo anterior significa que repartimos la luminosidad del sol entre el área de una esfera con radio de 1 UA, de tal manera que la cantidad de luz incidente en la tierra² es de 1361 W/m².

Con la anterior ecuación también podemos calcular la constante solar para la órbita del planeta Marte³ que se encuentra a 2.2795x10¹¹ m del sol.

$$\sigma_{marte} = \frac{P_{sol}}{4\pi r^2} = \frac{3.828 \times 10^{26} \text{ W}}{4\pi(2.2795 \times 10^{11} \text{ m})^2} = 586.24 \text{ W/m}^2$$

El radio terrestre r_T es de 6400 km, la potencia total incidente sobre el planeta es:

$$P_{total} = \pi \cdot r_T^2 \cdot \sigma = (3.1416)(6400 \times 10^3 \text{ m})^2(1361 \text{ W/m}^2) = 1.7651 \times 10^{17} \text{ W} = 1.7651 \times 10^5 \text{ TW}$$

Además de la *constante solar*, debemos de considerar que la luz atraviesa la atmósfera y sufre cambios que son necesarios tomar en cuenta, como la reflexión y absorción, dispersión Rayleigh y por aerosoles y partículas de polvo

2.4.2.2 Los estándares AM

Durante el trayecto desde el sol a hasta el panel solar, la luz tiene que tiene atravesar la atmósfera la cual absorbe hasta el 30% de la luz incidente. El rango de este trayecto es conocido como Masa de Aire (*Air Mass*, en inglés) y la atenuación de intensidad no es la misma en las diferentes longitudes de onda y además depende de la ubicación sobre la tierra y las diferentes condiciones climáticas de la zona; cuanto más nos alejemos de la condición de incidencia perpendicular, mayor será el grosor de la atmósfera que la luz tendrá que atravesar.

2 La constante solar también es conocida como irradiación total solar (o TSI por sus siglas en inglés: Total Solar Irradiance) y aunque es bastante estable, no es constante ya que se han medido variaciones de más de 6 W/m² [21]. Por conveniencia, usaremos 1361 W/cm² de aquí en adelante.

3 La cifra usada es el promedio entre las distancias de afelio y perihelio

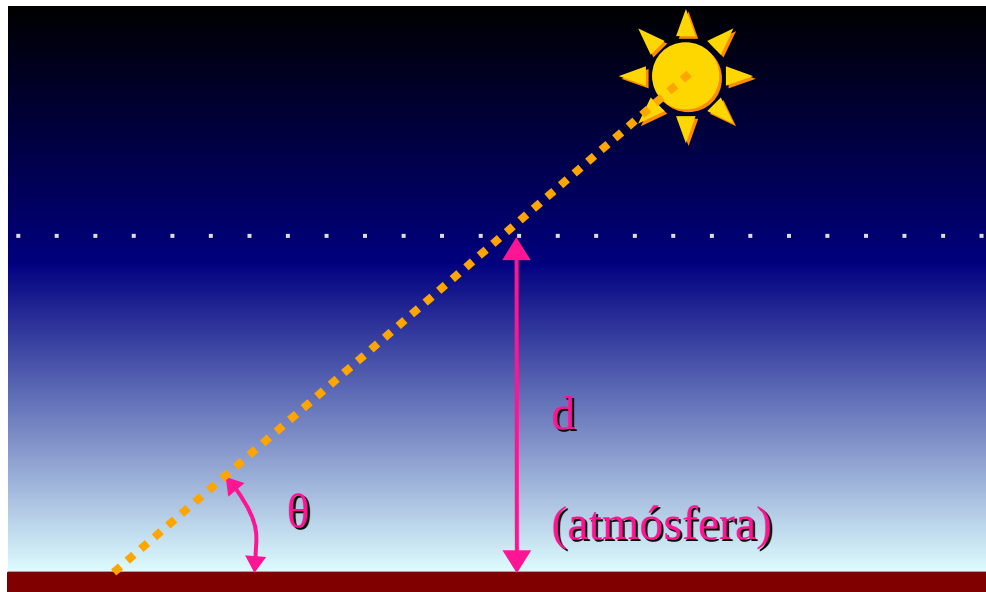


Figura 13: Definición del índice AM indicando su proporcionalidad con el espesor de la capa atmosférica y al ángulo de incidencia θ de la luz del sol con respecto su posición en relación al horizonte. (Adaptado de [22] p. 43)

El coeficiente de atenuación AM es usado como referencia para caracterizar el desempeño de las celdas solares bajo diferentes condiciones. El cálculo proviene de la geometría de la Figura 13 donde θ es el ángulo entre el sol y el horizonte. Por ejemplo, el coeficiente AM1 se define como:

$$AM\ 1 = \frac{1}{\sin(\theta)}$$

Lo anterior indica que la radiación atraviesa una cantidad igual a 1 vez el grosor de la atmósfera. Esto ocurre en el ecuador a medio día de los equinoccios del 21 de Marzo o de Septiembre) en el trópico de Capricornio; o también al medio día de los solsticios del 21 de Junio y Diciembre sobre el trópico de Cáncer.

A continuación listamos los índices AM más comunes.

- **AM0.** Es el espectro de la luz solar fuera de la atmósfera se aproxima a la forma del espectro de un cuerpo negro a 5800K (Ver Figura 12 parte naranja).
- **AM1.** Este es el espectro de la luz solar después de que atravesó el grosor de una atmósfera.

- AM1.1. Es el espectro de la luz solar después de que atravesó la atmósfera y medido a nivel del mar con el sol a 25 grados del cenit. Esta medida es particularmente útil para paneles solares instalados en regiones tropicales y ecuatoriales.
- AM1.5: En la gran mayoría de los casos una celda solar no opera exactamente bajo el grosor de una atmósfera AM1. Lo más seguro es que reciba luz solar a cierto ángulo de inclinación lo que ocasiona que la luz tenga que atravesar un mayor grosor de atmósfera. Para esas situaciones se usa el estándar AM1.5 que es medido con el sol a 48.2 grados del cenit.

La potencia integrada de AM0 y AM1.5 es: X y Z respectivamente.

	Ángulo de incidencia	Intensidad (W/m ²)
AM0	N/A	1367
AM1	0	1040
AM1.1	25	1020
AM1.5	48.2	1000

Tabla 1: Intensidad solar y angulo de incidencia

2.4.2.3 La curva I-V

Los semiconductores comúnmente se pueden clasificar basándose en su conductividad σ (o su resistividad ρ), ubicándolos desde un semi-aislante hasta un cuasi-metal. Es por eso que es importante medir su conductividad para determinar los mecanismos principales que controlan el transporte de corriente e identificándolos al mismo tiempo y en algunos casos también para observar el papel de los niveles superficiales.

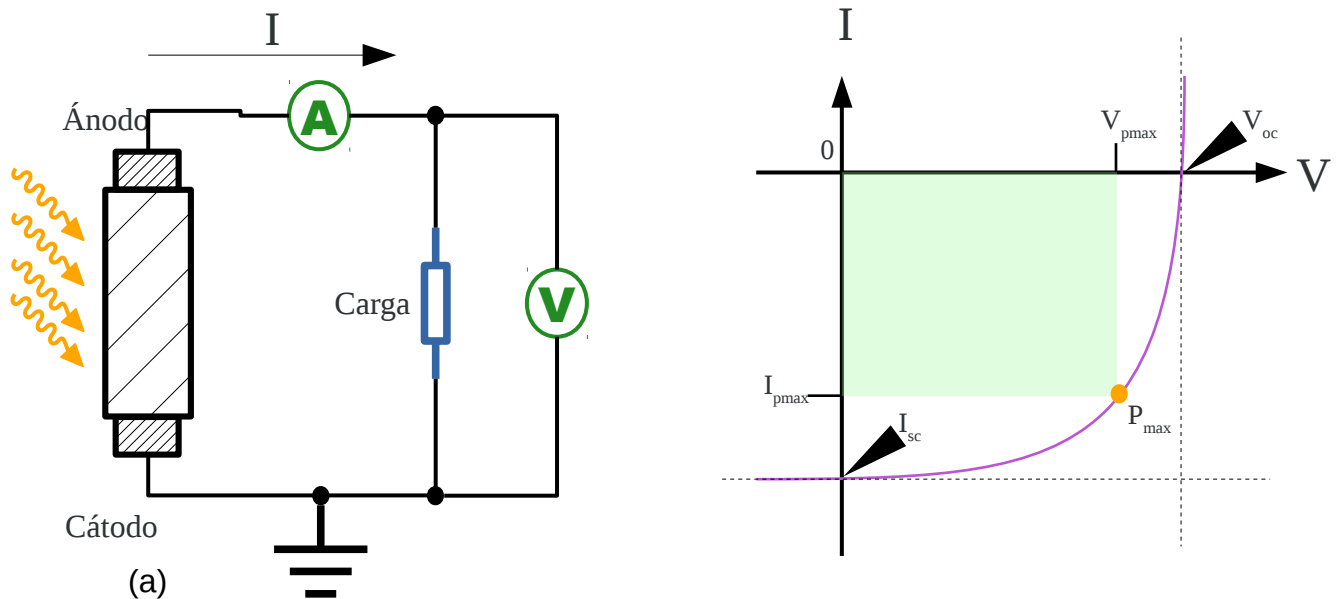


Figura 14: Esquema de una configuración experimental para caracterización I-V.

En presencia de defectos donadores y aceptores, así como centros de carga debido a impurezas y defectos capturando una fracción de los portadores inyectados, la conductividad se modifica drásticamente. Por esta razón, la curva I-V característica es fuertemente dependiente de la concentración y la distribución energética de centros de carga dentro del espécimen.

2.4.2.4 Eficiencia externa de una celda solar

Si queremos saber la eficiencia de una celda solar debemos de saber la cantidad de energía llega a la superficie de la celda solar y la cantidad de energía eléctrica entregada. En el capítulo 2.4.2.1 obtuvimos la constante solar $\sigma = 1361 \text{ W/m}^2$. Si la superficie de la celda solar mide 1m^2 y la potencia eléctrica obtenida de la celda solar es de 50 W , entonces la eficiencia será:

$$\eta = \frac{P_{entregada}}{P_{incidente}} = \frac{P_{entregada}}{\sigma * A} = \frac{13.61 \text{ W}}{1361 \text{ W/m}^2 * 1 \text{ m}^2} = 0.1 = 10\%$$

2.4.3 Generaciones de celdas solares

En Octubre de 1960, William Shockley y Hans J. Queisser caracterizan matemáticamente las limitaciones de las celdas solares de unión p-n y describen el límite máximo de eficiencia de este tipo de celdas bajo diferentes condiciones [18]. Este límite ha sido nombrado como

Límite Shockley-Queisser o *Detail Balance Limit* (en inglés) o *Límite de Eficiencia Shockley-Queisser* o simplemente *Límite SQ*.

El *límite SQ* predice un límite máximo de 30% de eficiencia para celdas solares de union p-n.

Una manera de mejorar el rendimiento es fabricando celdas con múltiples capas con diferentes bandas para poder superar el límite de 30% [23]. Es este último tipo de celdas solares las que reciben el nombre de Celdas Solares de Tercera Generación [24].

Las películas que contienen óxido de silicio con diferentes niveles de oxidación (SiO_x) están siendo estudiadas activamente en los últimos años ya que son prometedoras candidatas para aplicaciones en dispositivos opto-electrónicos y de memoria. El uso de nanocristales de silicio puede resultar en dispositivos con mejor estabilidad comparado con otros dispositivos de este tipo [25].

Los resultados previos obtenidos en el Laboratorio de Semiconductores, Microelectrónica y Nanotecnología, mostraron que el recocido térmico de películas de SiO_x ($x = 1.15$ or 1.3 , $\text{SiO}_x \sim 15$ nm) a 1000 °C en un ambiente de gas N_2 causa una separación de fases formando nanocristales de silicio en una matriz amorfa de SiO_2 . Las muestras recocidas exhiben nanocristales con un diámetro que depende de la composición inicial y esta en el rango de 3 a 6 nm.

En diversos laboratorios del mundo muchas investigaciones **están dirigidas a la optimización de las propiedades de películas dieléctricas delgadas** que contienen nanocristales con respecto a sus aplicaciones en dispositivos electrónicos y optoelectrónicos.

Cuando se toma en cuenta la eficiencia, costos e impacto ambiental de la fabricación y operación de celdas solares, se pueden distinguir tres diferentes generaciones Ver XX.

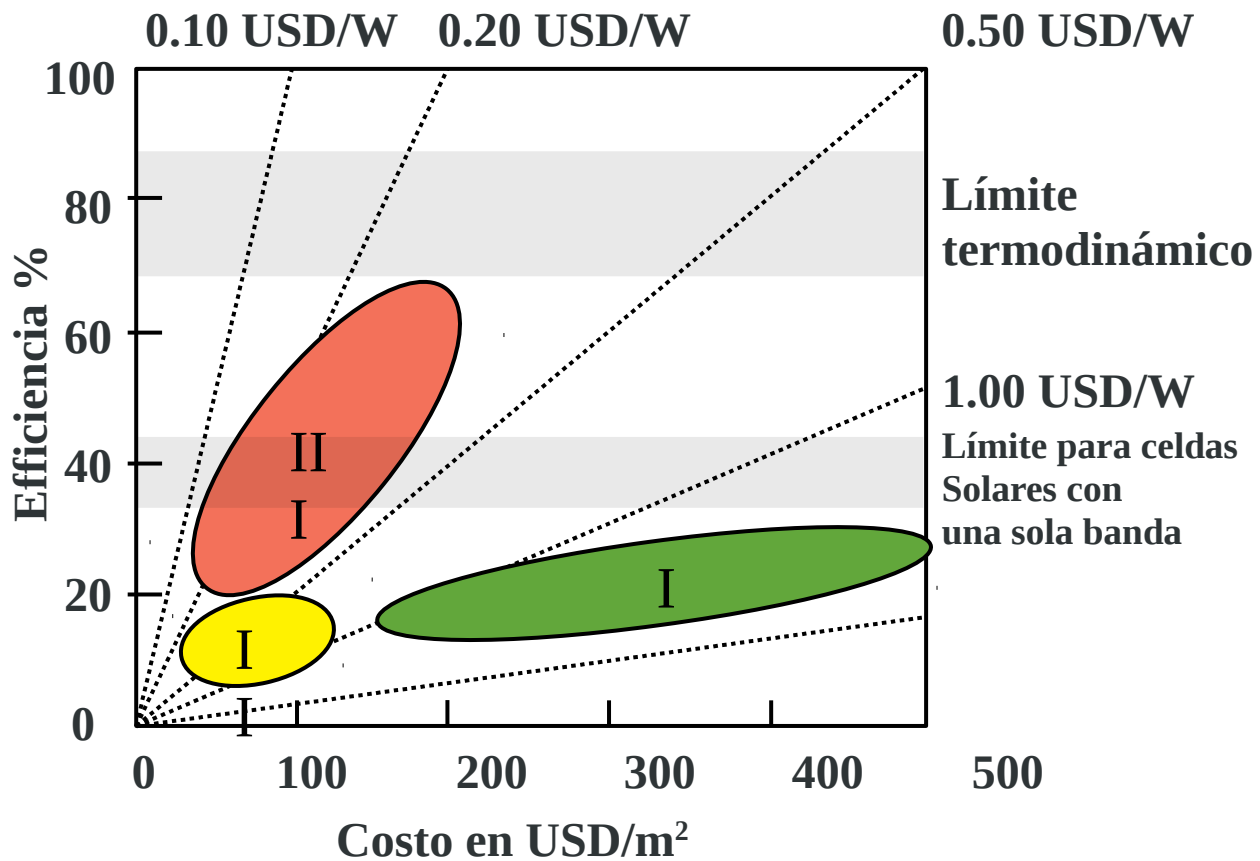


Figura 15: Eficiencia y proyecciones de costos para primera (I), segunda (II) y tercera (III) generación de tecnologías fotovoltaicas. Adaptado de [24] p.43

Límite de shockley-queisser de entre 31% y 41% depende de si usan concentrador [24].

Cerca del 50% de pérdida de potencia se debe a que una celda solar convencional sólo puede absorber fotones con energía menor a la banda de energía y los restantes se absorben como energía térmica.

2.4.3.1 Primera generación

2.4.3.2 Segunda generación

Se caracterizan por:

- Uso de métodos de deposición de películas delgadas

- Basadas en Silicio
- Usan materiales no tóxicos y que no están limitados en disponibilidad.

2.4.3.3 Tercera generación

La tercera generación de celdas solares comparte importantes características de la segunda generación:

- Usan la misma tecnología de deposición de películas delgadas sobre Silicio de la segunda generación
- Se busca la compatibilidad en su fabricación con la implementación a gran escala de tecnología fotovoltaica actual.
- Se busca reducir el costo de \$1 USD por Watt a \$ 0.50 USD/W o \$ 0.20/W o incluso menor.
- Incremento significativo en eficiencia (más allá de 30%) manteniendo el costo económico y ambiental de las técnicas de deposición ya conocidas.
- Superan el límite de Shockley-Queiser apilando celdas con diferentes bandgaps.

Diferentes enfoques para crear celdas solares de tercera generación

- Usando diferentes niveles de energía
 - Tándem o multicolor
 - Tándem con semiconductores III-V
 - Sistemas con concentradores de luz solar
- Tándems con películas delgadas
 - Tándems con silicio amorfo (a-Si)
 - Tándems con nano estructuras de Silicio
- Nivel intermedio: impurezas y banda intermedia
- Excitación de múltiples portadores
- Modulación de espectro: Conversión arriba/abajo
- Celdas solares con portadores de carga calientes
- Alternativos
 - Antenas cuánticas

- Termofotónica/Termofotovoltaica (TPV)
- Circuladores

La metodología combinada de usar múltiples umbrales de energía y procesos de bajo costo con materiales que son abundantes y no tóxicos es la de las celdas de tercera generación y su objetivo es bajar el costo por watt de las celdas solares.

Muchos de esos dispositivos usan la flexibilidad única que otorgan las nanoestructuras de pozos y puntos cuánticos para optimizar la absorción, generación y separación de portadores. La técnica de balanceo detallada para calcular los límites de las eficiencias ilustran la similitud entre los diferentes conceptos de tercera generación a pesar de sus aproximaciones tan diferentes ya que dependen de la cantidad de niveles de energía involucrados.

Sin embargo, en la práctica la eficiencia real y la facilidad de optimización depende de cada uno de los fenómenos físicos aprovechados en cada dispositivo.

La eficiencia, robustez espectral, el costo y facilidad de manufactura son importantes para una tecnología robusta que pueda ayudar a incrementar el nivel de implementación de la tecnología fotovoltaica. Aún no existe ningún dispositivo que pueda hacer eso.

Las celdas solares en tandem son los mejores dispositivos desarrollados hasta ahora y aún pueden ser mejoradas aun mas, ya sea mediante mejor eficiencia en sistemas con concentradores solares, o con reducción de costos y eficiencia en diseños con películas delgadas; en cualquiera de los casos el objetivo es bajar el costo de las celdas solares por watt.

Como desventajas de las celdas solares en tandem tenemos poca robustez espectral. Para solucionarlo ya se esta trabajando con dispositivos de nivel intermedio y conversión up/down pero aún están en una etapa muy temprana, pero prometen incrementar la eficiencia y además tener mucho mejor robustez espectral, especialmente para materiales de películas delgadas.

Los conceptos avanzados de generación de múltiples portadores y de portadores calientes aún estan lejos de ser realidad y aún hay algunas preguntas teóricas por contestar. Pero de implementarse, esta nueva tecnología podría bajar el costo por watt de manera dramática al mismo tiempo que tienen robustez espectral ya que el concepto es compatible con dispositivos de películas delgadas relativamente simples.

Los circuilladores, antenas cuánticas y termofotónica aún son esotéricos y hasta imprácticos si es que se demuestra que pudieran funcionar de manera teórica.

También existe la posibilidad de combinar uno o varios enfoques, como por ejemplo, usar un UC y DC en la misma celda, o que se use un UC con una celda tandem.

Otra opción es usar un dispositivo de nivel intermedio o que genere portadores múltiples podría usarse como DC en lugar de producir los portadores en exceso de manera directa. El uso del análisis detallado de balance nos podría ayudar a mostrar las equivalencias y complementariedades entre los diferentes enfoques. Finalmente, siempre existe la posibilidad de que emerjan otros enfoque que aun no han sido concebidos por que el entendimiento del tópico aún continua mejorando.

Capítulo 3 Simulación de Celdas Solares con Silvaco

3.1 Acerca de Silvaco

[Silvaco](#) es una compañía estadounidense con sede en Santa Clara, California. Silvaco se especializa en software EDA (*Electronic Design Automation*) y TCAD (*Technology Computer Aided Design*). TCAD es una rama de EDA especializada en modelar la fabricación de semiconductores y la operación de dispositivos.

Silvaco, además de ser el nombre de la compañía, también tiene el nombre de un grupo de aplicaciones de software que permiten simular dispositivos semiconductores a nivel de micrómetro. Silvaco TCAD es un conglomerado de simuladores y herramientas del cual usaremos los siguientes módulos:

- **Deckbuild** [26]. Es el entorno interactivo gráfico para desarrollar simulación de procesos y dispositivos. Contiene una gran variedad de formularios para generar código para los diferentes simuladores, extractores y optimizadores de TCAD. Además tiene herramientas para conducir diseños de experimentos.
- **Athena** [27]. Simulador de procesos de fabricación de semiconductores, con cuatro módulos principales.
 - **Athena**. Sirve para definir y manipular estructuras. Además puede simular procesos básicos de deposición y grabado (*etching*).
 - **SSuprem4**. Diseño, análisis y optimización de estructuras de semiconductores. Puede simular implantación de iones, difusión y oxidación.
 - **Elite**: Simulador 2D de propósito general para deposición de materiales, etching, reflow, muy usados en la fabricación de circuitos integrados.
 - **Optolith**: Simulador de procesos de litografía.
- **Atlas** [28] calcula las características eléctricas asociadas a estructuras físicas con determinada polarización mediante la aproximación su comportamiento en una malla en 2 o 3 dimensiones. Tal aproximación se calcula aplicando un conjunto de ecuaciones diferenciales derivadas de las leyes de Maxwell; mediante éste método se puede simular el transporte de portadores a través de cierta estructura de semiconductor.

- **TonyPlot** [29] es una herramienta para trazar gráficos a partir de los archivos de datos generados por los simuladores como Atlas y Athena.
- **DevEdit** [30] es un editor gráfico de estructuras que nos ayuda para generar la malla usada para la simulación de dispositivos semiconductores.

En la Figura 16 se muestra un diagrama jerárquico de los diferentes módulos que componen Atlas y Athena.

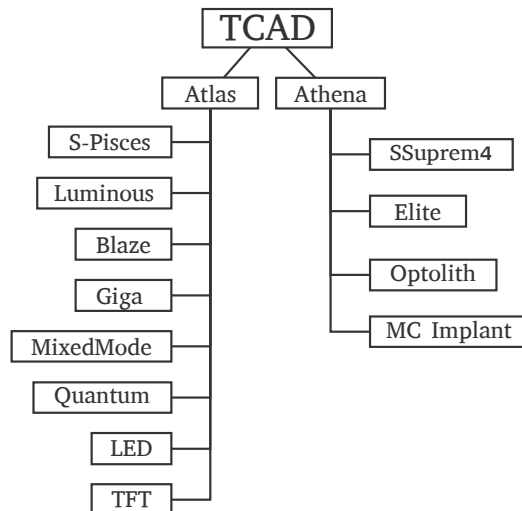


Figura 16: Módulos que componen el TCAD de Silvaco

3.2 Conceptos básicos de simulación para celdas solares

Una de las características más interesantes de componentes de la suite de Silvaco TCAD tales como Athena o Atlas es que son simuladores basados en física y tienen la capacidad de *predecir* las estructuras resultantes de una serie de procesos mediante la solución de sistemas de ecuaciones que describen la física y la química de la fabricación y el funcionamiento de dispositivos semiconductores. Este proceso es diferente al modelado empírico que obtiene fórmulas analíticas cuyos resultados se aproximan a datos ya medidos de la manera más sencilla posible mediante interpolación y aproximación; pero la desventaja de los modelos empíricos es que no nos ofrecen un entendimiento más detallado del proceso en estudio, además del costo inherente de las pruebas (material, instalaciones, instrumentos, etc.). En contraste, la simulación basada en física nos permite obtener información que es difícil o imposible de medir de manera física y de manera más rápida; además, como se ha dicho, tiene capacidades predictivas por estar basada en la física y no en fórmulas analíticas. La desventaja de la simulación basada en física es que es necesario incorporar toda la información física y química a un simulador que debe de implementar una serie de algoritmos numéricos para resolver las ecuaciones asociadas. En este caso, Silvaco ya ha

implementado una gran cantidad de algoritmos y modelos y solo es necesario proveer la información física y química pertinentes.

En herramientas como Silvaco, en general, para simular un dispositivo se requiere:

1. Definir la geometría de la estructura a simular (la malla),
2. Definir secuencia de procesos a simular (implantación, difusión, revelado, etc.),
3. Escoger los modelos físicos a usar en la simulación. Silvaco TCAD ofrece múltiples modelos para un mismo proceso. Por ejemplo, para obtener resultados fidedignos para procesos como implantación, difusión, RTA (Rapid Thermal Annealing), oxidación y epitaxia es necesario saber seleccionar el modelo adecuado que toma en cuenta el daño físico ocasionado al sustrato. En general, Silvaco usa el modelo más genérico que funciona la mayor parte de las veces y solo es necesario cambiarlo cuando los resultados no son los esperados o se cumplen condiciones especiales.

3.2.1 Malla de cálculo

Las ecuaciones básicas de semiconductores forman un sistema de ecuaciones diferenciales parciales. En general, este tipo de sistemas no pueden ser resueltos de manera explícita y en cambio se resuelven usando aproximaciones numéricas que consisten de tres tareas esencialmente ([31] p. 149):

1. **Particionado:** El dominio del sistema (la geometría del dispositivo), ha de ser particionado en un número finito de subdominios; la solución se encuentre de manera aproximada y solamente con la precisión requerida.
2. **Generar sistema de ecuaciones.** El proceso de simulación consiste en llegar a una aproximación de las ecuaciones diferenciales en cada uno de los subdominios usando ecuaciones algebraicas que solamente incluyan valores de las variables continuas dependientes en puntos discretos del dominio; dichas variables se usarán junto con el conocimiento de la estructura de las funciones escogidas que nos darán una aproximación de las variable dependientes dentro de cada uno de los subdominios. Por lo general esto resulta en la generación de un sistema de ecuaciones algebraicas bastante grande (y, en general, no lineales) en la que los valores desconocidos se componen de aproximaciones de las variables continuas dependientes en puntos discretos.
3. **Solucionar el sistema de ecuaciones.** La última tarea es solucionar este sistema de ecuaciones. Vale la pena hacer notar que con este procedimiento es *imposible* obtener una solución exacta *al problema formulado analíticamente*, sino que en cambio en el

mejor de los casos se va a obtener una solución exacta *para las ecuaciones no lineales que conforman el problema discreto*. Esto último representa una buena aproximación a la solución analítica del problema y depende *directamente* de qué tan finas son las particiones de la simulación de los subdominios y qué tan aptas son las funciones de aproximación para las variables dependientes dentro de los subdominios.

Algunos métodos usados para esta tarea son (a) método de diferencias finitas, (b) el método de caja finita y (c) el método de elemento finito.

La Figura 17 es un ejemplo de una malla generada con Athena para una celda solar.

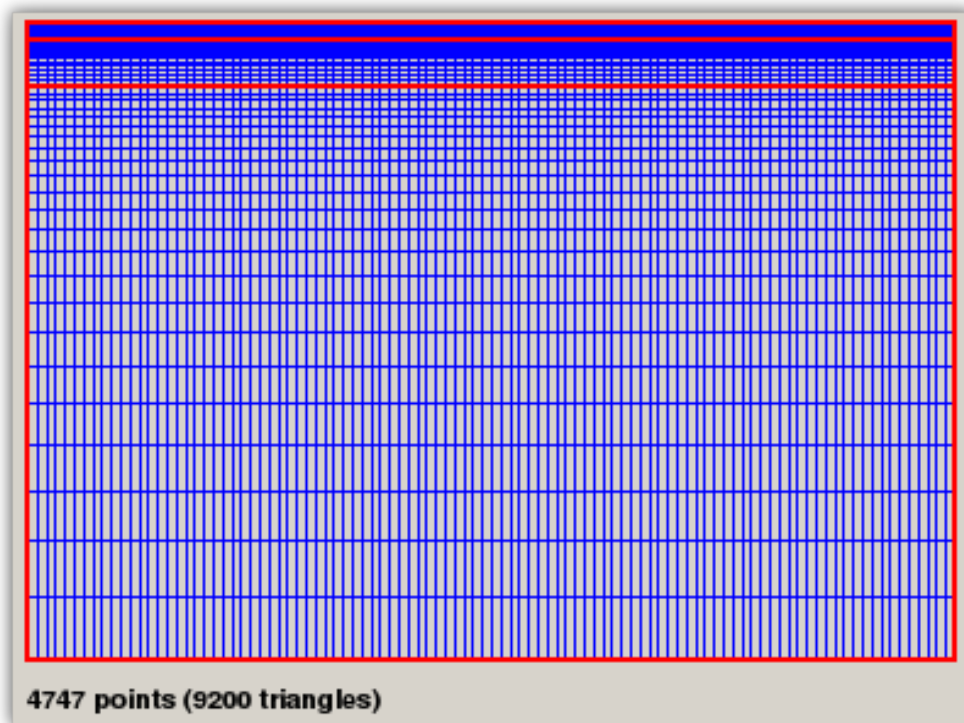


Figura 17: Malla de simulación

En Silvaco, el número de operaciones aritméticas necesarias para simular un proceso usando el método de análisis de elemento finito se estima como $(N_p)^\alpha$ donde N_p es el número de nodos y α es del orden de 1.5 a 2.0 ([27] p.29).

En resumen, la especificación correcta de la malla de cálculo es crítica en el proceso de simulación. Se deben de tomar en cuenta los siguiente:

- El número de puntos de la malla controla el número de puntos de discretización de las ecuaciones de semiconductores; esto impacta la exactitud de la solución y el tiempo invertido en resolver el sistema de ecuaciones resultantes.

- Para obtener una solución numérica adecuada, se recomienda definir una malla más fina en las regiones donde haya mas rápida variación de los parámetros del dispositivo semiconductor, por ejemplo: el dopaje en la zona de agotamiento de una unión p-n, en regiones donde se hará implantación de iones o en lugares donde la iluminación óptica cambiará activamente la concentración de componentes fotoactivos.
- Puede resultar difícil dimensionar la malla adecuada para la simulación del dispositivo la primera vez.
 - Usar muy pocos puntos en la malla puede causar problemas de convergencia o exactitud.
 - Usar más puntos en la malla de los que son necesarios (para lograr la exactitud buscada) puede aumentar significativamente el tiempo empleado para realizar la simulación. Es por lo anterior que para mantener el tiempo de simulación dentro de límites razonables es necesario evitar que el número de nodos se vuelva demasiado grande. El número máximo de nodos soportados por Silvaco en una simulación es de 20000. Como podemos ver en la Figura 17, la cantidad de nodos requeridos para la simulación de celdas solares es mucho menor que el límite máximo.

3.2.2 Materiales

Atlas contiene una base de datos con diferentes parámetros y propiedades correspondientes a cada material. En Atlas todos los materiales están estrictamente clasificados en tres clases:

- Semiconductores
- Aislantes (los materiales que no estén en la base de datos de Atlas se simulan como si fueran aislantes).
- Conductores: todos los conductores deben estar definidos como electrodos y todas las regiones de electrodos se simulan como si fueran metales.

Si el material especificado no se encuentra en las tablas se asumirá que es un aislante.

3.2.3 Simulación de dispositivos ópticos

El módulo **Luminous** de Atlas permite simular la respuesta electrónica a señales ópticas para una gran gama de dispositivos detectores de luz tales como foto diodos, transistores ópticos, celdas solares y CCD's. Luminous usa cuatro modelos distintos para simular la propagación de luz dentro de dichos dispositivos.

- **Ray tracing.** Se usa para resolver geometrías 2D y 3D no planares ignorando los efectos de la coherencia óptica y difracción.
- **Transfer Matrix Method (TTM).** Simulación de una dimensión que incluye los efectos de la interferencias. Este método es útil para simular dispositivos como celdas solares de películas delgadas, que involucran una gran área de exposición a la luz.
- **Beam Propagation method (BPM).** Método genérico en dos dimensiones que incluye los efectos de la difracción de la luz con la condición de requerir mucha más potencia computacional que los anteriores.
- **Finite difference time domain (FDTD).** Éste es el método más general. Simula en 2D y 3D. Toma en cuenta los efectos de difracción y coherencia óptica resolviendo directamente las ecuaciones de Maxwell. Este es el método que más exige recursos computacionales.

Además de poder seleccionar el modelo de simulación de la propagación se pueden configurar varias fuentes de iluminación. Cada fuente de iluminación es configurable independientemente y la potencia espectral es configurable de tal manera que puede ser monocromático o en caso contrario se puede establecer un espectro estándar como AM0 o AM1.5 o uno definido por el usuario.

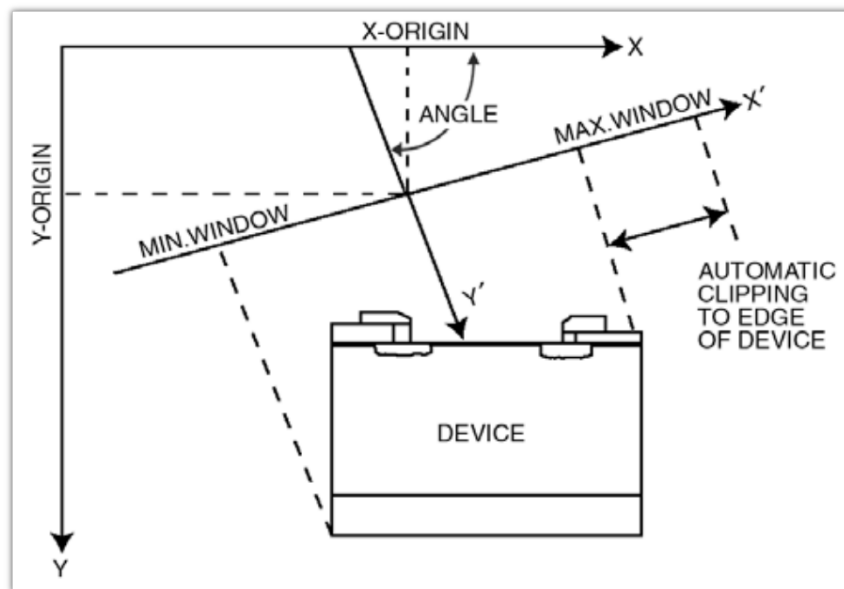


Figura 18: Sistema de coordenadas de una fuente de iluminación en Silvaco Atlas.

La posición y orientación de las fuentes de iluminación también son configurables mediante el punto de origen por encima de la superficie del dispositivo (x , y , z) y el ángulo de incidencia, como se muestra en la Figura 18.

Por último, también es posible realizar análisis espectrales paso por paso; por ejemplo, es posible realizar un barrido de longitud de onda comenzando por 0.3 μm (ultravioleta) hasta llegar a 1 μm (infrarojo), en incrementos de 0.025 μm .

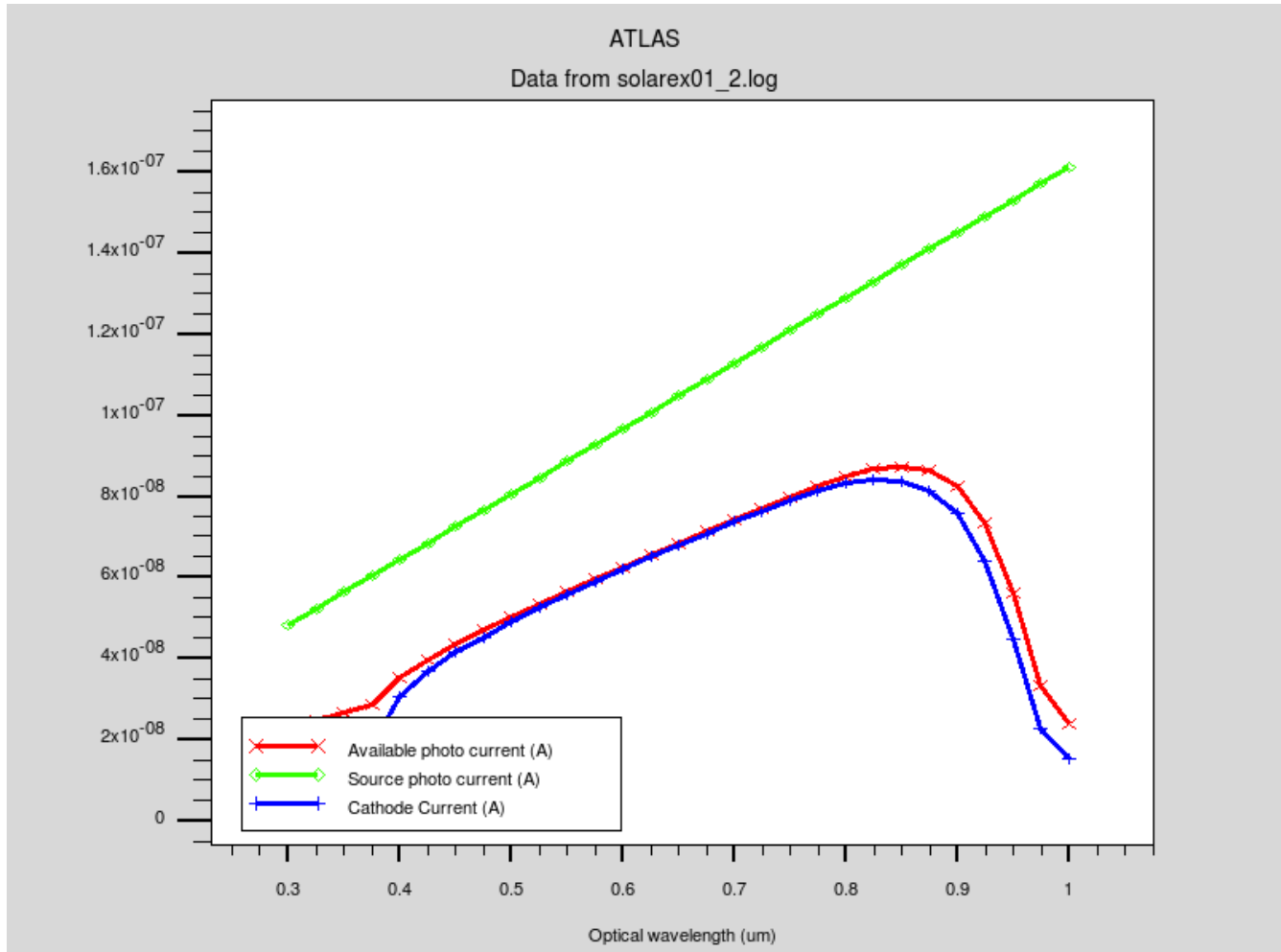


Figura 19: Respuesta espectral de la celda solar en un rango de longitud de onda de 0.3 μm y 1 μm

3.3 Proceso general de simulación de celdas solares con Silvaco

A continuación listamos la serie de procesos involucrados en la simulación de una celda solar (una representación grafica de estos pasos se muestra en la figura Figura 20).

1. Construir celda con Athena.

- 1.1. **Definición de malla de 10x50 μm** para poder controlar el nivel de detalle de la simulación (Figura 17).

- 1.2. **Definición del sustrato** como *Silicio* cristalino con orientación $\langle 100 \rangle$ tipo P y dopaje con *Boro* a 10^{14} cm^{-3} .
- 1.3. **Deposición de capa protectora** de SiO_2 de $0.05 \mu\text{m}$ sobre el sustrato para prepararlo para el proceso de difusión. En la Figura 20(a) se muestra el dispositivo. El eje x indica la profundidad del dispositivo mientras que el eje y es la concentración de impurezas en el material. El sustrato de silicio tiene una concentración de impurezas de 10^{14} cm^{-3} . La región amarilla es el sustrato, mientras que la azul es el SiO_2 .
- 1.4. **Creación de una región de tipo N** dentro del sustrato mediante el proceso de implantación de iones de fósforo para convertir una región de semiconductor tipo P a N.
 - a) *Predisposición* mediante implantación de iones de fósforo con una dosis de 10^5 cm^{-2} y energía de aceleración de 30 keV .

Aunque el **Fósforo** pasa por la capa de SiO_2 , el pico de concentración de Fósforo se da por debajo de la capa, justo donde comienza el sustrato. Una vez dentro del sustrato la concentración de Fósforo cae de 10^{20} cm^{-3} en $x = 0 \mu\text{m}$ hasta 10^5 cm^{-3} a una profundidad de $0.5 \mu\text{m}$. Ver resultados en Figura 20 (b).
 - b) *Drive-in* para que el Fósforo penetre más en el sustrato; 10 minutos a 900°C . Resultados en Figura 20 (c).
- 1.5. **Formación de contacto para el cátodo**
 - a) *Perforación de una ventana* en la capa de SiO_2 (profundidad de $0.05 \mu\text{m}$ a partir de $y=0$) desde $x = 8 \mu\text{m}$ hasta $x = 10 \mu\text{m}$ ($2 \mu\text{m}$). Los resultados de este comando en la estructura de la celda se muestran en la Figura 20 (d).
 - b) *Deposición* de una capa de aluminio con un grosor de $0.1 \mu\text{m}$.
 - c) *Eliminación de la capa* de aluminio desde $x = 0 \mu\text{m}$ hasta $x=8 \mu\text{m}$
 - d) *Duplicación de la estructura*. El trabajo que se ha hecho hasta ahora ha sido solo para la mitad del dispositivo, Athena permite duplicar la estructura a manera de espejo. Con esto la estructura queda con ancho de $20 \mu\text{m}$. Ver figura 20-e.
 - e) *Se etiqueta el contacto* de aluminio recién creado con el nombre de cátodo.
- 1.6. **Formación de contacto para el ánodo**. Sólo es necesario etiquetar el reverso del sustrato como ánodo
- 1.7. Exportar estructura para usarla en los siguientes pasos

2. Encontrar V_{oc} y I_{sc}

2.1. **Arranca Atlas**

2.2. **Carga la malla** creada en el paso 1.7

2.3. **Configurar propiedades ópticas** de los materiales:

- a) El Aluminio es opaco, por eso el coeficiente de extinción se establece a un valor muy alto, por ejemplo 1000
- b) El tiempo de vida de recombinación SRH (Shockley-Read-Hall) de portadores de carga para el Silicio se estableció en $T_{no}=10^{-6}$ seg. para electrones y $T_{po}=10^{-6}$ s para huecos.⁴

2.4. **Configurar rayo de luz** (espectro AM1.5)

2.5. **Calcular solución inicial en equilibrio** (sin luz, todos los nodos con voltaje igual a cero, temperatura 300 K)

2.6. **Calcular la solución al sistema con el rayo de luz encendido.**

- a) *Extraer la corriente en corto circuito I_{sc}* (Cuando el voltaje entre cátodo y ánodo es cero)
- b) *Extraer el voltaje de circuito abierto V_{oc}* (Cuando la corriente en cualquiera de los contactos es cero)

3. Extracción de la curva IV

3.1. **Repite los pasos 2.1 a 2.6**

3.2. **Cálculo de la curva IV.** La Curva IV se realiza polarizando el ánodo desde $-0.1V$ hasta V_{oc} ⁵ (en incrementos de $0.01V$) y midiendo la corriente entregada por la celda.

3.3. **Extraer los resultados de la curva IV** para posterior uso

4. Cálculo de figuras de mérito

4.1. **Calcular P_{max}** a partir de la curva IV

4.2. **Calcular V_{Pmax}** (El voltaje cuando $P=IV=P_{max}$)

4.3. **Calcular I_{Pmax}** (La corriente cuando $P=IV=P_{max}$)

4 Ver [28], ecuación 3-348 en la página 217

5 En realidad la simulación se hace hasta $V_{oc} + 0.2 V$

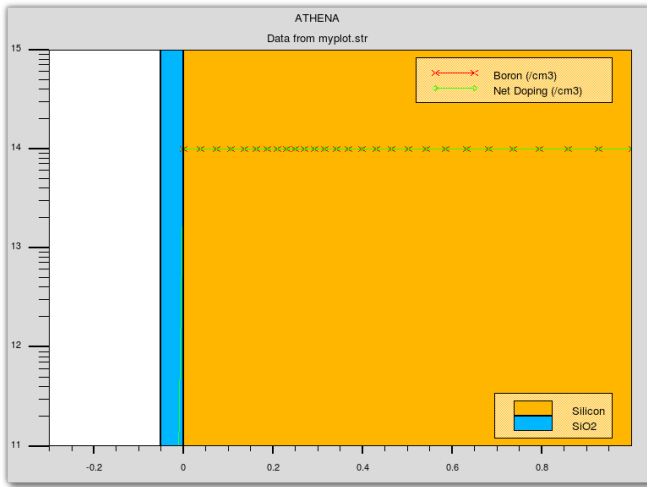
- 4.4. **Calcular Fill Factor** usando la curva IV extraída en el paso 3.3. El Fill Factor se calcula con la siguiente fórmula

$$FF = \left(\frac{P_{max}}{I_{sc} * V_{oc}} \right)$$

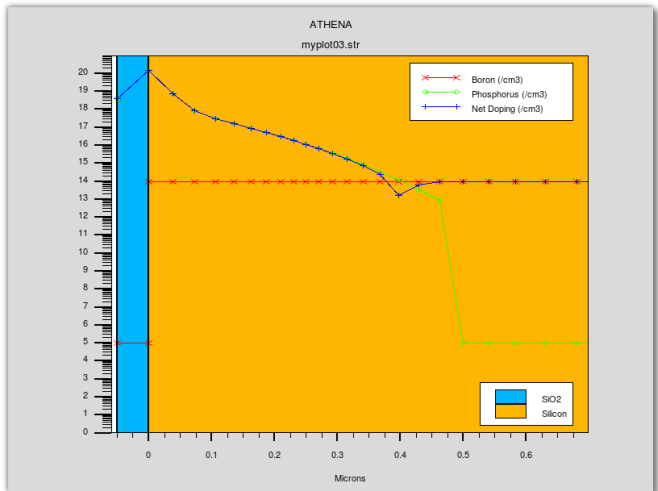
- 4.5. **Extraer la intensidad de potencia lumínica máxima** (P_{light})
- 4.6. **Calcular la eficiencia de la celda solar** mediante la siguiente fórmula:

$$\eta = \left(\frac{P_{max}}{P_{light} * A_{cell}} \right)$$

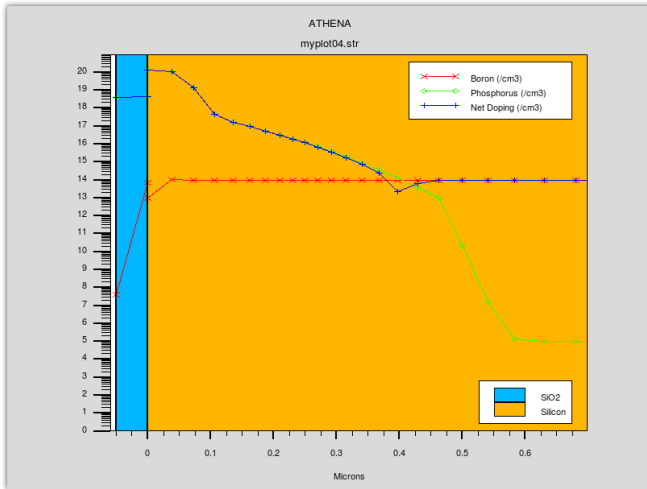
donde A_{cell} es el área efectiva de la celda solar y equivale a $16 \mu\text{m}^2$ ó $16 \times 10^{-8} \text{ cm}^2$.



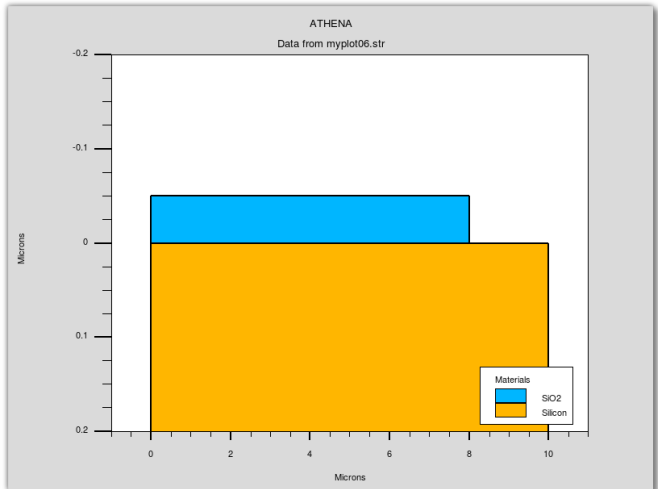
(a) Capa de SiO₂ (azul) sobre el sustrato de Siliio tipo P (amarillo)



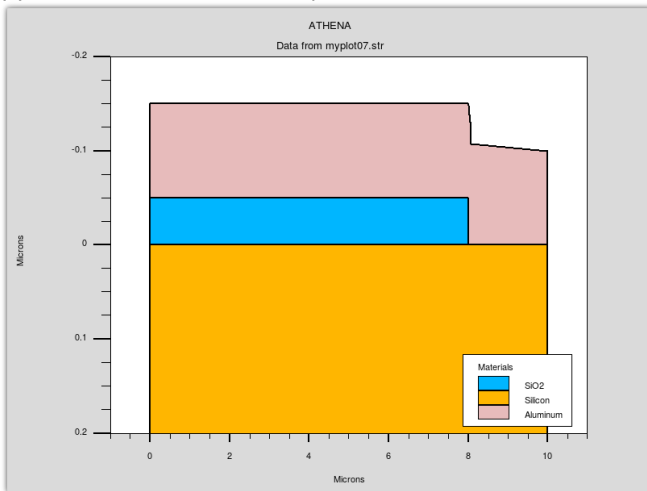
(b) Perfiles de concentración de después de predisposición



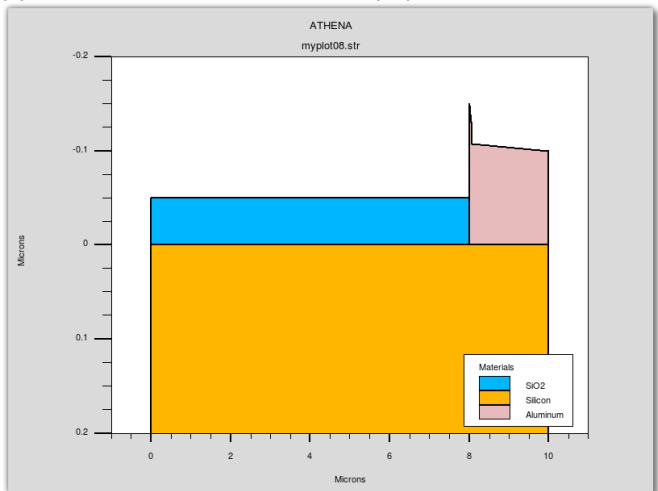
(c) Perfiles de concentración después de drive-in



(d) Perforación de una ventana en la capa protectora de SiO₂



(f) Deposición de una capa de Aluminio



(g) Remoción de aluminio mediante ventana para crear contact

Figura 20: Proceso de construcción de celda solar con Athena

Una vez calculadas las figuras de mérito es posible variar los diferentes parámetros de construcción de la celda y comparar los resultados directamente.

3.3.1.1 Otras características

Otras figuras de mérito y mediciones que pueden ser extraídas son:

- Absorción de luz dentro de todas las regiones de semiconductor (*Available Photo Current*).
- Respuesta espectral del dispositivo a la luz con diferentes longitudes de onda. Por ejemplo, ver Figura 19.
- Curva de eficiencia cuántica interior (Internal Quantum Efficiency).
- Curva de eficiencia cuántica exterior (External Quantum Efficiency)
- Curva de absorción vs longitud de onda.

Capítulo 4 Resultados de simulación

4.1 Control de profundidad de unión

Este es un experimento creado para estudiar los parámetros que controlan la profundidad de unión en un dispositivo p-n fabricado mediante difusión.

La unión metalúrgica se encuentra donde la concentración de la impureza implantada es igual a la concentración de las impurezas del sustrato.

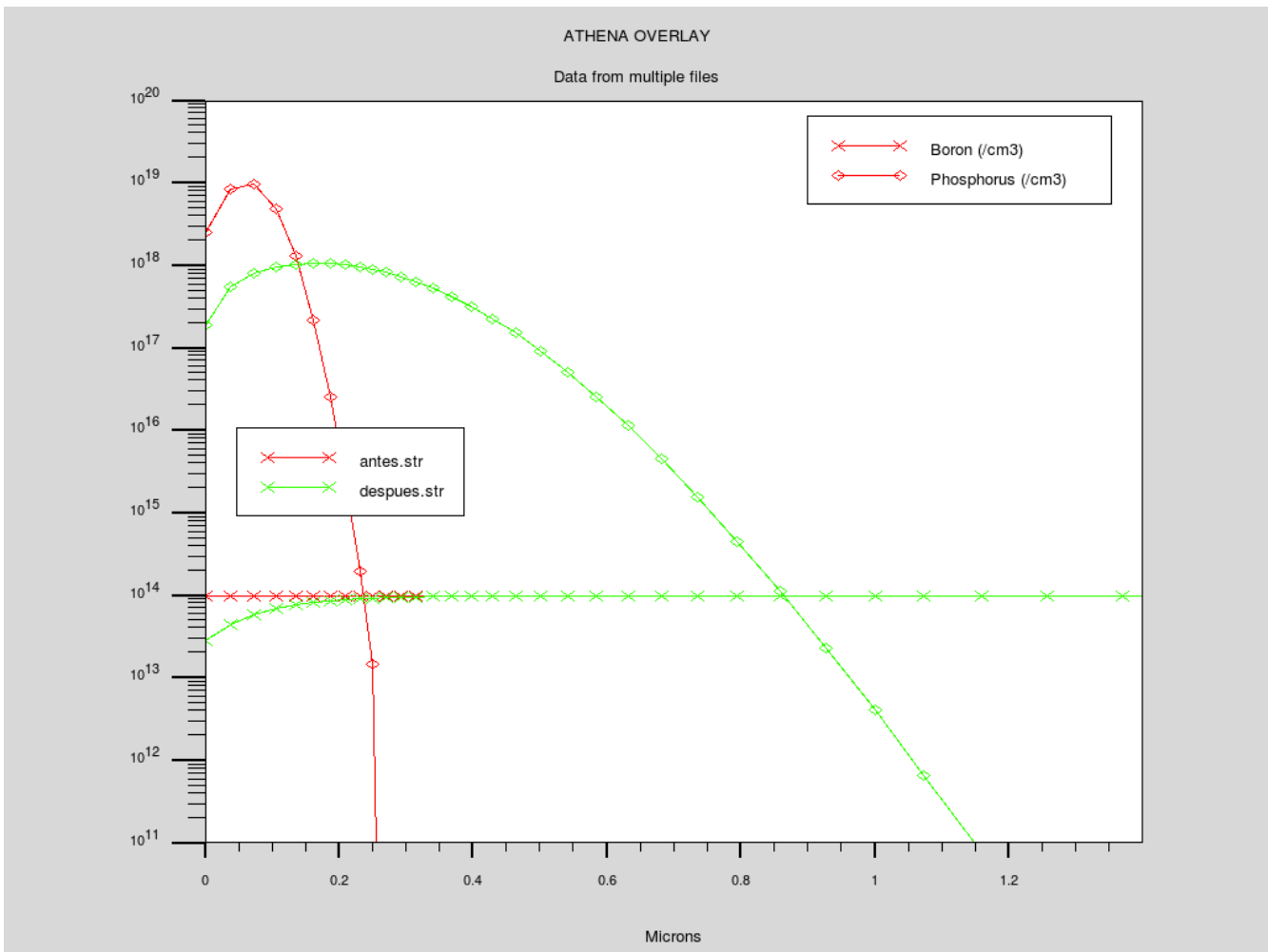


Figura 21: Gráfica de concentración de impurezas antes (rojo) y después (verde) del paso de drive-in

En la Figura 21 podemos ver que la unión después del paso de *drive-in* es más profunda (alrededor de $0.86 \mu\text{m}$). Y de acuerdo con la definición de la unión metalúrgica, las dos uniones ocurren en diferentes profundidades pero a la misma concentración (10^{14} cm^{-3}).

Como una muestra, podemos ver que el punto mínimo del campo eléctrico ocurre a la misma profundidad que la unión metalúrgica, justo donde empieza la zona de agotamiento.

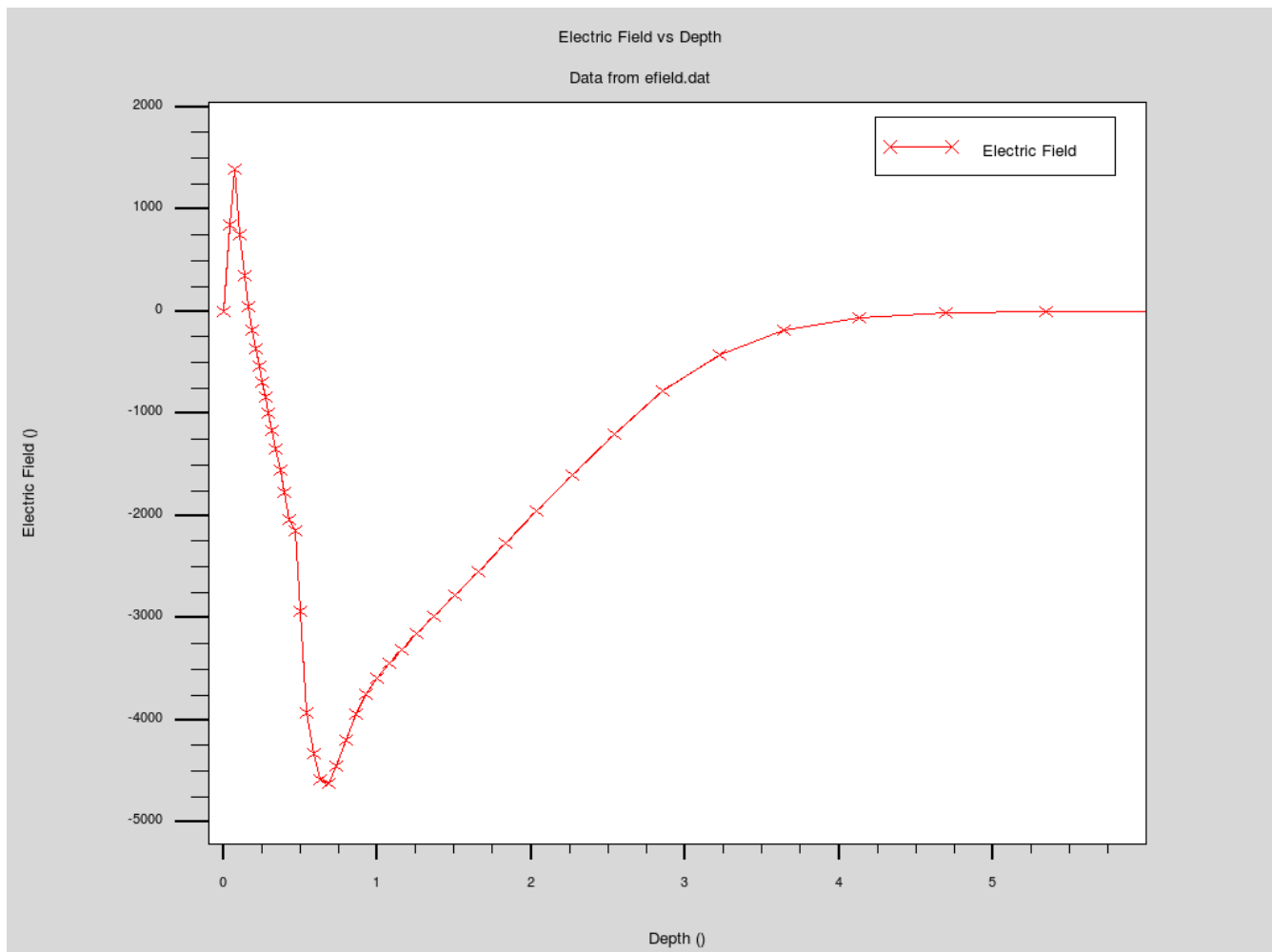


Figura 22: Gráfica de campo eléctrico versus profundidad en el sustrato.

En el campo eléctrico se puede notar el cambio en la zona de agotamiento, donde esta la unión.

4.2 La relación entre la profundidad de unión y la concentración de dopantes en el sustrato

Consideremos una estructura como la de la Figura 23. Es un sustrato de Silicio cristalino de tipo **P** con orientación **<100>**, ancho de 10 μm y alto de 3 μm dopada con Boro.

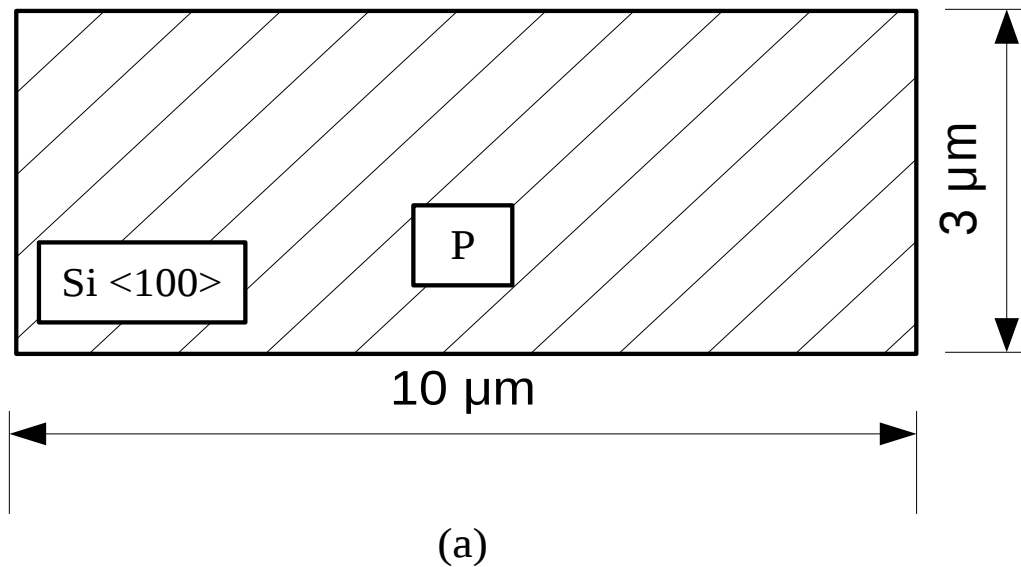


Figura 23: Sustrato de tipo p para prueba de profundidad de la unión

Para entender la relación entre la profundidad de unión y la concentración de impurezas someteremos dos estructuras similares al proceso de implantación y *drive-in*. La única diferencia entre esas estructuras será la concentración de Boro en el sustrato: la primera estructura tendrá una concentración de 10^{14} cm^{-3} mientras que la segunda tendrá una concentración de 10^{12} cm^{-3} . Seguido de esto crearemos una región **n** en la superficie mediante un proceso de implantación de iones de fósforo ($0.9 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, **50 keV**, 7° de inclinación, 30° de rotación, modelo: Gauss) y seguido de un proceso de *drive-in* (1100 °C por 16 minutos). Además, extraeremos la profundidad de unión antes y después del *drive-in*.

La comparación de los perfiles de implantación se puede observar en la Figura 24.

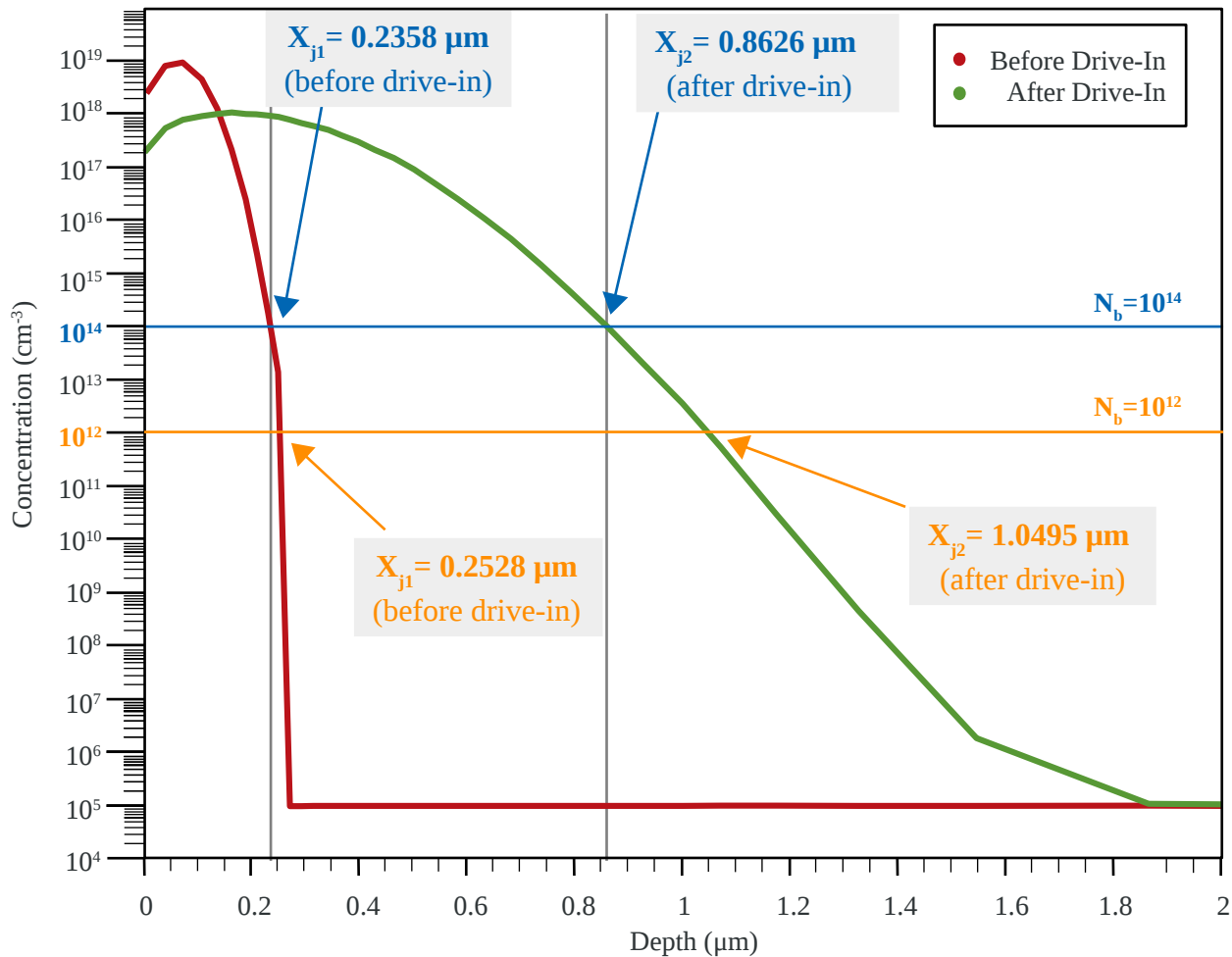


Figura 24: Perfiles de implantación antes y después del drive-in cuando la concentración del sustrato es 10^{12} cm^{-3} y 10^{14} cm^{-3} .

Los resultados obtenidos son los siguientes:

- Antes del *drive-in*:
 - Profundidad de unión con 10^{12} cm^{-3} : **0.2528 μm**
 - Profundidad de unión con 10^{14} cm^{-3} : **0.2358 μm**
- Después del *drive-in*:
 - Profundidad de unión con 10^{12} cm^{-3} : **1.0495 μm**
 - Profundidad de unión con 10^{14} cm^{-3} : **0.8626 μm**

Es importante hacer notar que en la figura 24 solo vemos dos curvas, cuando deberían ser cuatro, pero la primera curva del primer experimento ($N_b=10^{12}$) es idéntica a la primera curva del segundo experimento ($N_b=10^{14}$). Lo mismo ocurre con la segunda curva.

Si el perfil de implantación queda prácticamente igual, entonces el único factor restante que define la profundidad de la unión es la concentración del sustrato.

4.3 Estudio de modelos de implantación

Uno de los primeros pasos de la fabricación de una celda solar con unión **p-n** es introducir impurezas en el sustrato. Existen dos métodos principales: Difusión e Implantación.

En Silvaco TCAD, el módulo Athena contiene los algoritmos para simular el proceso de implantación mediante el comando **IMPLANT**. Athena tiene cuatro modelos diferentes para simular el proceso de implantación, a saber:

- Perfil Gaussiano (GAUSS)
- Pearson IV (PEARSON)
- Pearson IV + lateral components (FULL.LAT)
- Montecarlo or BCA (Binary Collision Approximation) (MONTECARLO, BCA)

El objetivo de este estudio fue el poder apreciar el modelo de implantación con perfil Gaussiano y contrastarlo con los demás modelos. Para ello se hicieron cuatro simulaciones variando únicamente el modelo de implantación (**Fósforo** como impureza con una dosis de **10^{15} cm^{-3}** con energía de **50keV** sobre un sustrato de Silicio cristalino tipo **p**. La inclinación y la rotación fueron **7°** y **30°** respectivamente). Los resultados se pueden apreciar en la Figura 25.

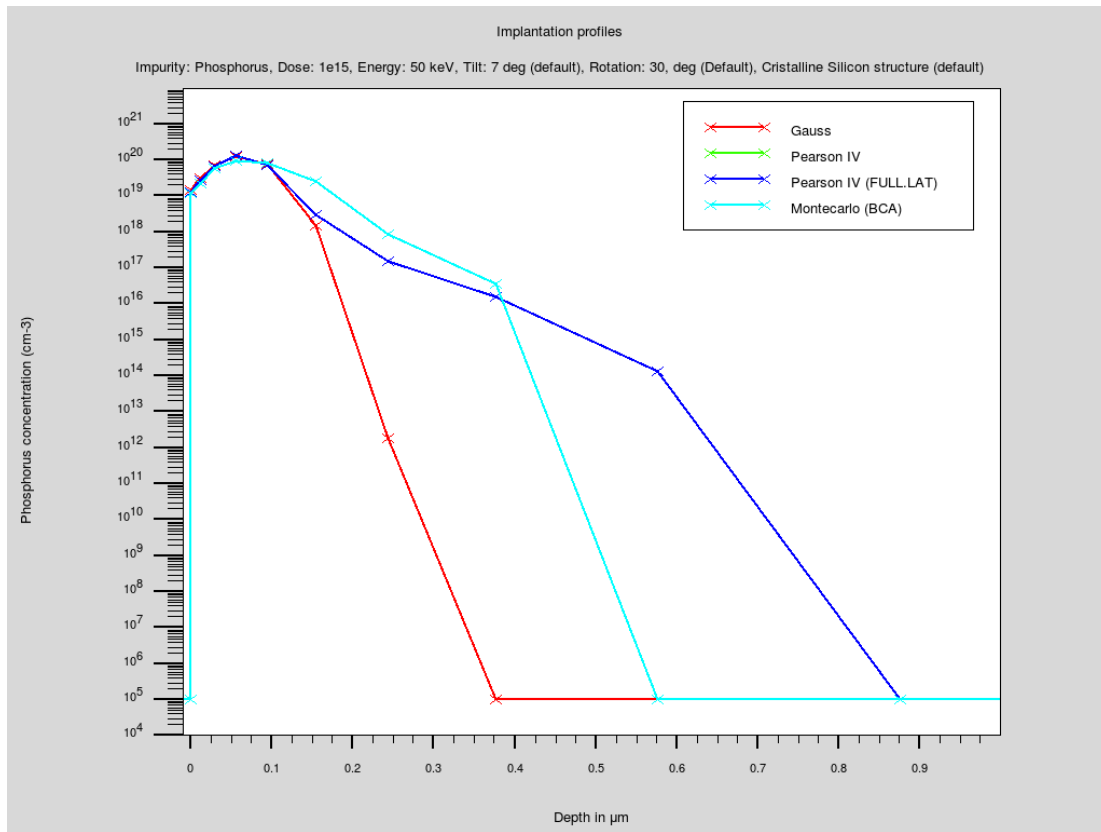


Figura 25: Los cuatro perfiles del proceso de implantación disponibles en Athena

4.4 Estudio de parámetros de implantación tipo Gauss

El modelo de implantación Gauss es uno de los modelos más simples para entender el proceso de implantación; es por eso que se diseñó un experimento para estudiar el efecto de algunos de los parámetros que controlan el perfil de implantación: dosis, energía de implantación, ángulo de incidencia y ángulo de rotación.

El experimento consiste en un sustrato de Silicio cristalino tipo P dopado con Boro a una concentración de 10^{14}cm^{-3} con una estructura similar a la de la Figura 23 sobre el que se hace el proceso de implantación de iones de fósforo con cada uno de los diferentes valores de los parámetros para luego exportar los resultados que se mostrarán a continuación.

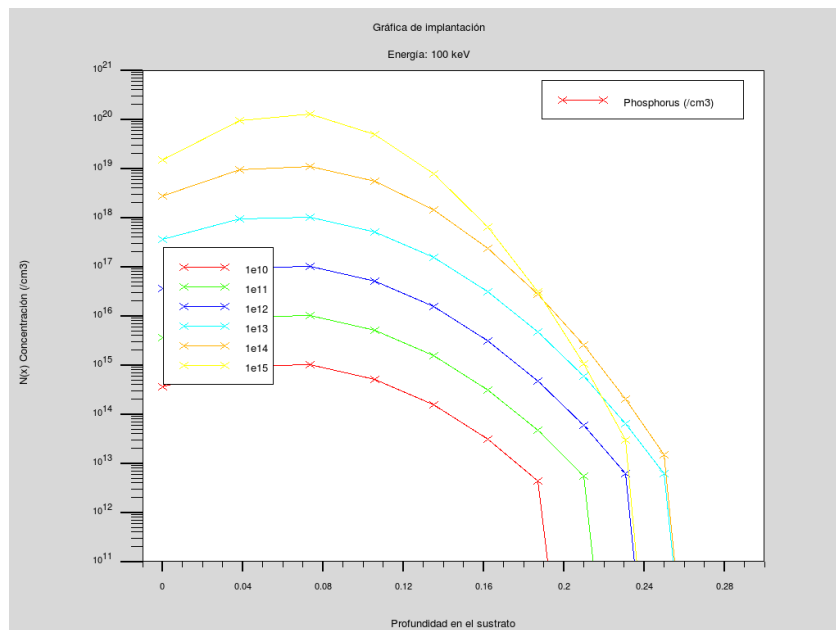
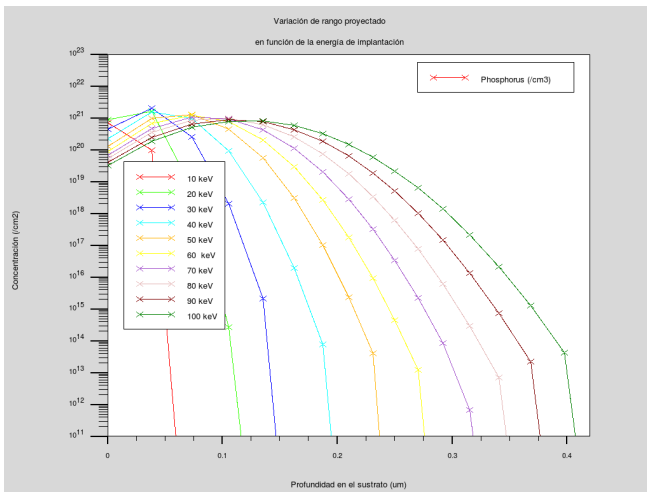


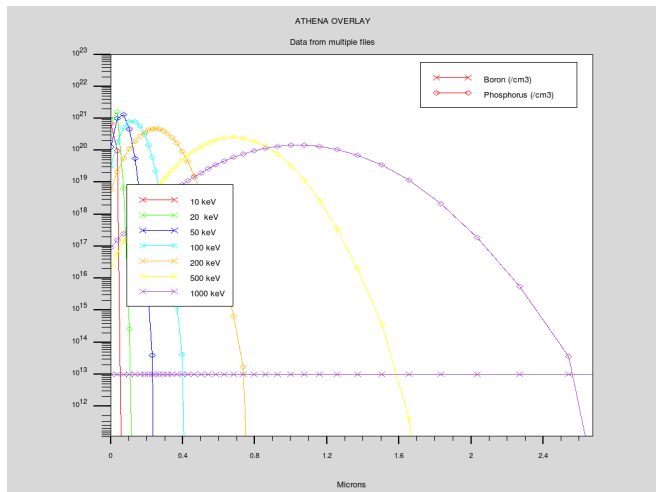
Figura 26: Variación de perfil de implantación en función del ángulo de incidencia

En la Figura 26 se puede observar la variación del perfil de implantación y especialmente del rango proyectado en función de la dosis. El punto máximo de de concentración ocurre en 0.08 um en todos los casos. El rango proyectado aumenta con la dosis, pero solo hasta concentraciones de 10^{14} cm^{-3} donde el perfil comienza a retroceder.

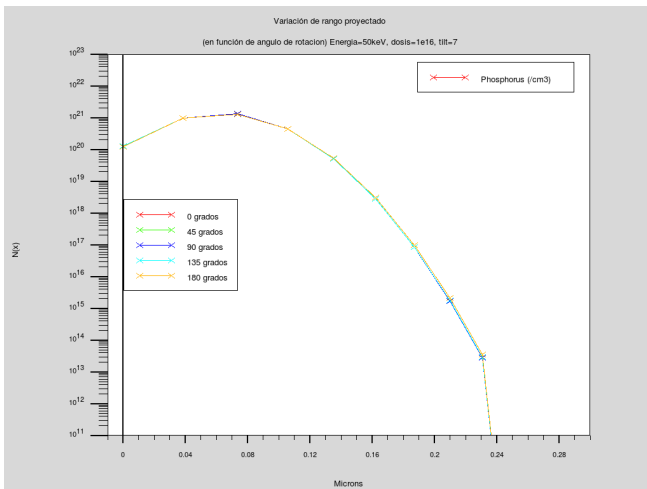
En contraste, la figura muestra la variación del rango proyectado en 10, 20, 50, 100, 200, 500 y 1000 keV.



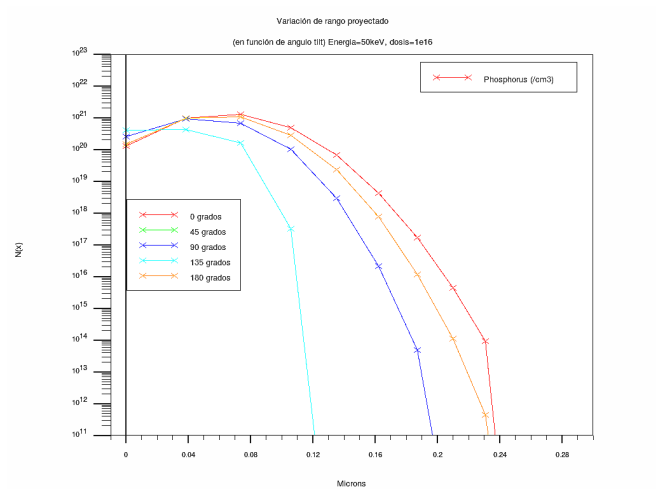
(b) Energía de implantación, rango 10 a 100



(c) Energía de implantación, rango de 10 a 1000



(d) Ángulo de rotación



(e) Ángulo de incidencia

Figura 27: Varios

Cuando variamos la rotación el cambio es poco.

Por ultimo la gráfica de variación del perfil de implantación en función del ángulo de incidencia.

4.5 Estudio del proceso de drive-in

El proceso de *drive-in* generalmente se usa como paso secundario después de un proceso de difusión o de implantación.

Las condiciones para este experimento son las siguientes:

- Substrato Silicio cristalino tipo P dopado con Boro @ 10^{14} cm^{-3} , orientación <100>
- Dimensiones: Alto: $3\mu\text{m}$, ancho $10\mu\text{m}$, grueso $1\mu\text{m}$.
- Parámetros de implantación
 - Dosis: Fósforo 10^{15} cm^{-2}
 - Energía: 50 keV
 - Ángulo de inclinación: 7 grados.
 - Ángulo de rotación: 30 grados.
- Drive-in: 1050 C por 15 minutos.
- Substrato: tipo P.

En la Figura 28 (a) podemos ver el perfil de concentración de Fósforo antes y después del paso de drive-in. En la figura 28 (b) podemos ver un acercamiento de los perfiles de implantación en escala de 0 a $1\mu\text{m}$.

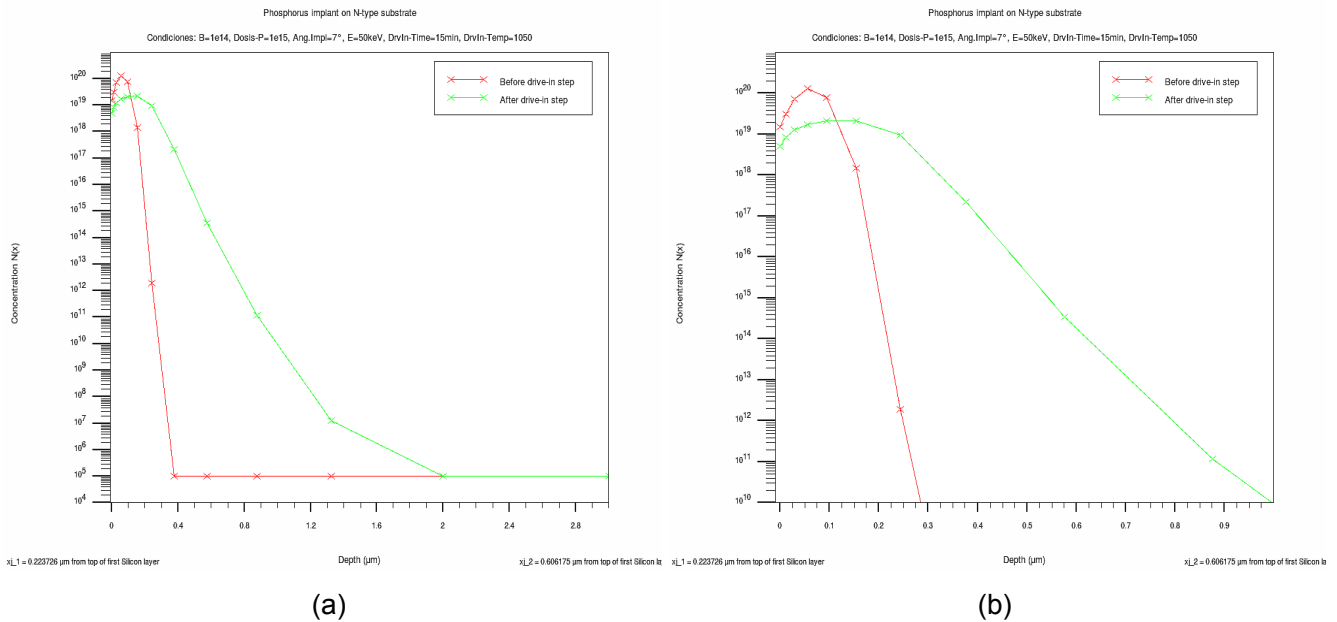


Figura 28: Perfiles de implantación antes y después de drive-in

4.6 Efectos de una capa de SiO₂ en el proceso de implantación.

Como parte del proceso, antes de una implantación o difusión se hace crecer una fina capa de SiO₂ encima del sustrato. El propósito de esta capa es dispersar los iones (en el caso de la implantación) y proteger la estructura del sustrato.

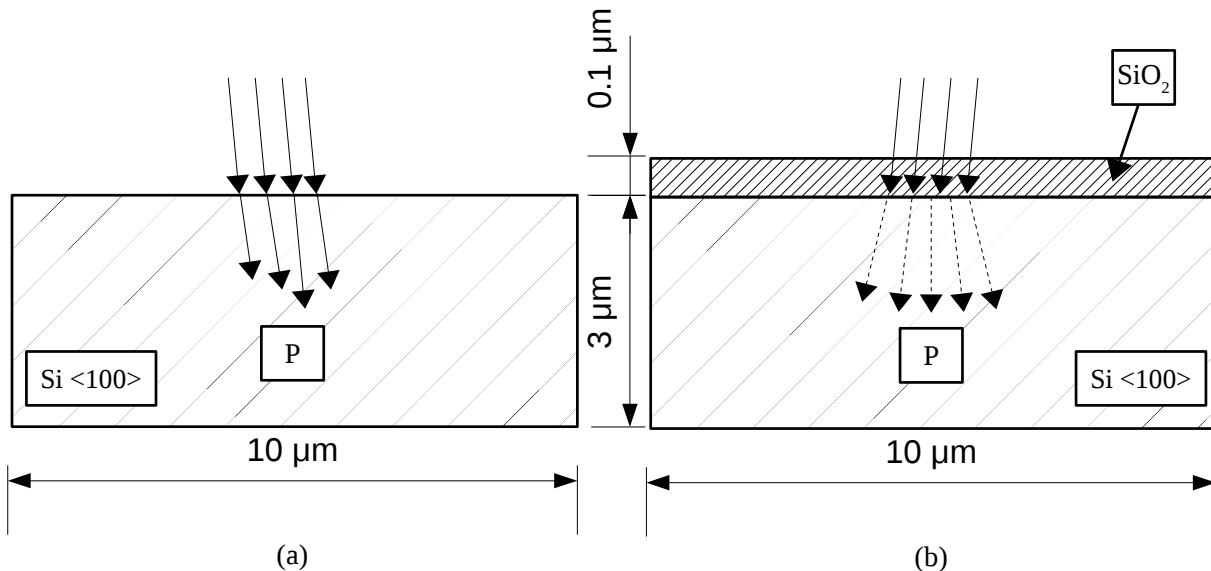


Figura 29: Estructuras para probar los efectos de una capa fina protectora de SiO₂

En el experimento compararemos los perfiles de implantación de la estructura de la figura Figura 29- (a) con la Figura 29-(b).

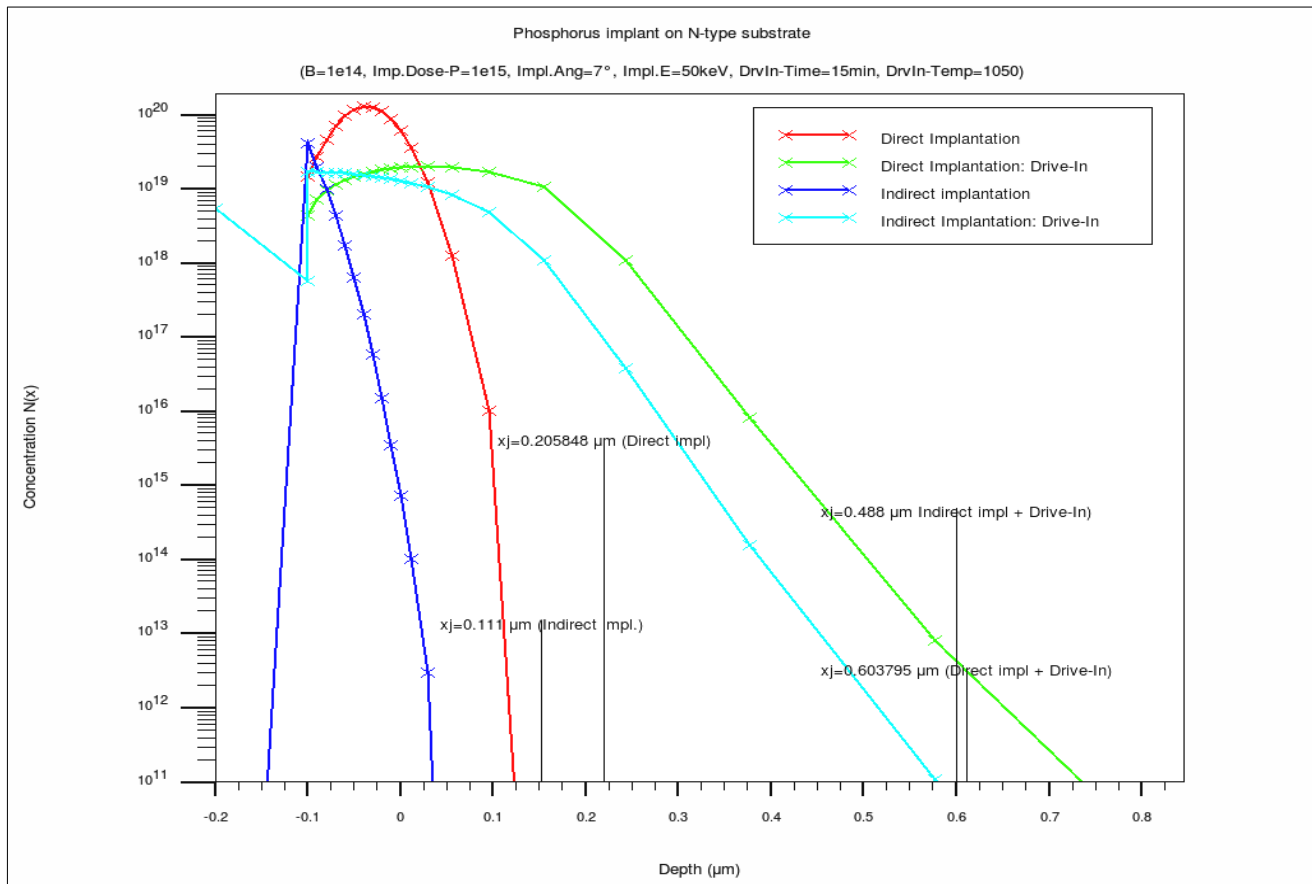


Figura 30: Comparación de perfiles de implantación

Son 4 combinaciones:

- Implantación directa (rojo, $x_j = 0.111 \mu\text{m}$)
- Implantación directa con Drive-In (verde, $x_j = 0.603 \mu\text{m}$)
- Implantación indirecta (azul, $x_j = 0.205 \mu\text{m}$)
- implantación indirecta sin Drive-In (Cian = $0.488 \mu\text{m}$)

4.7 Efectos del tiempo y la temperatura en un proceso de drive-in

El objetivo de este experimento es poder ver cómo la temperatura y el tiempo impacta el perfil de distribución de impurezas en del proceso drive-in. Los parámetros y condiciones son:

- Substrato tipo P, orientación $\langle 100 \rangle$ con concentración de impurezas de Boro de 10^{14} cm^{-3} .

- Las dimensiones de la estructura son las mismas que la de la Figura 29(a).
- Implantación
- Ion: Fósforo
- Dosis: 1015 cm⁻².
- Energía: 50 keV
- Ángulo de incidencia: 7 grados (default)
- Ángulo de rotación: 30 grados (Default)

En la primera prueba variamos el tiempo en los siguientes puntos: 1, 5, 10, 15, 25, 30, 35, 40 y 45 minutos. Es posible usar tiempos más largos, pero 45 minutos ya es demasiado tiempo para esperar solamente para el proceso Drive-In. En la figura XX podemos ver los resultados del experimento.

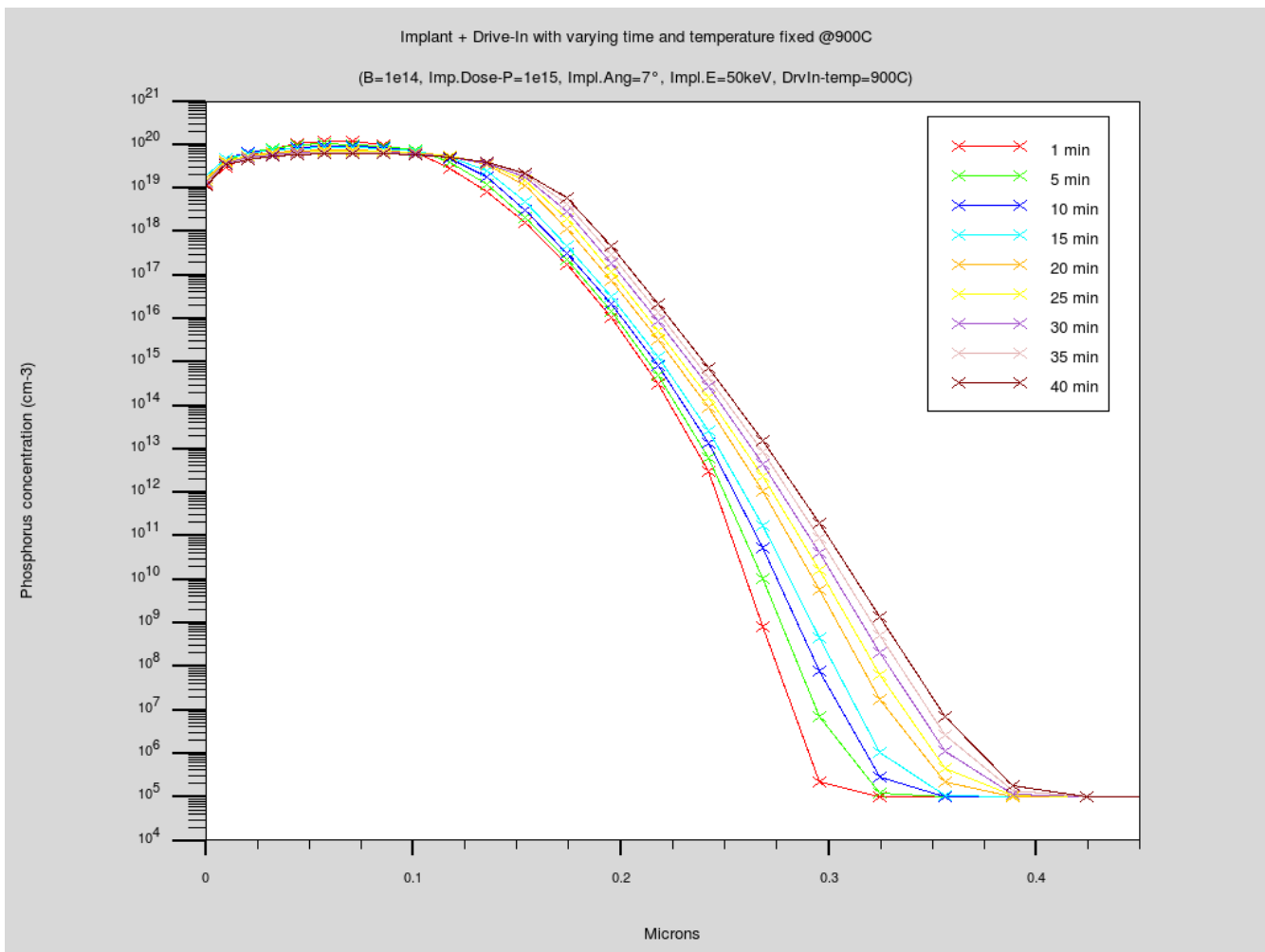


Figura 31: Experimento con diferentes tiempos de drive-in

Como podemos ver en la Figura 31, la profundidad de unión se encontrará entre 0.2 y 0.3 μm tomando en cuenta la concentración del sustrato 10^{14} cm^{-3} B. Como podemos ver la diferencia de penetración entre 1 minuto y 40 minutos son de alrededor de 0.05 μm , como veremos a continuación el efecto de la temperatura brinda mejores resultados.

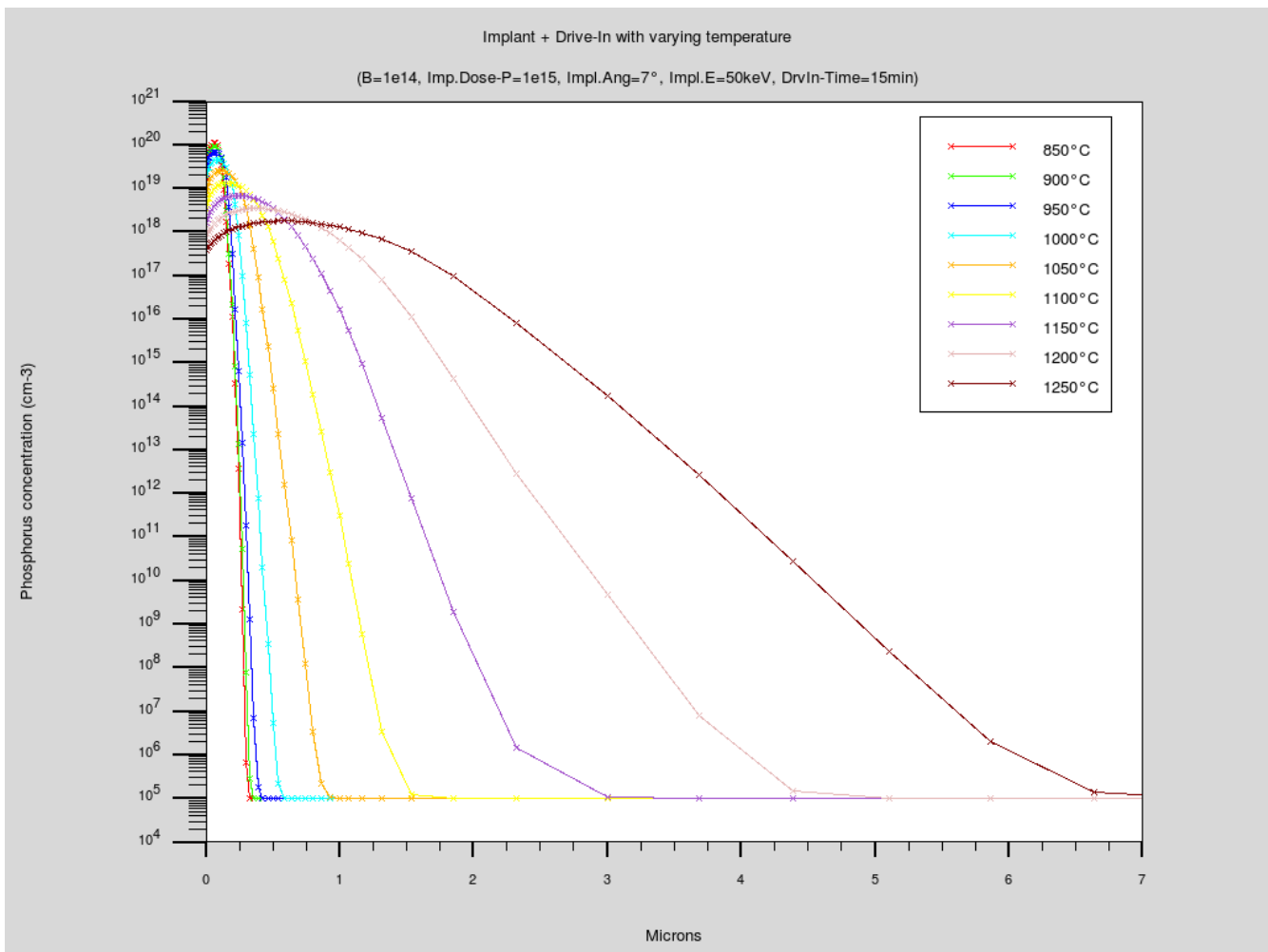


Figura 32: Resultados de variación de temperatura en drive-in

A continuación analizaremos los resultados del experimento de variación de temperatura.

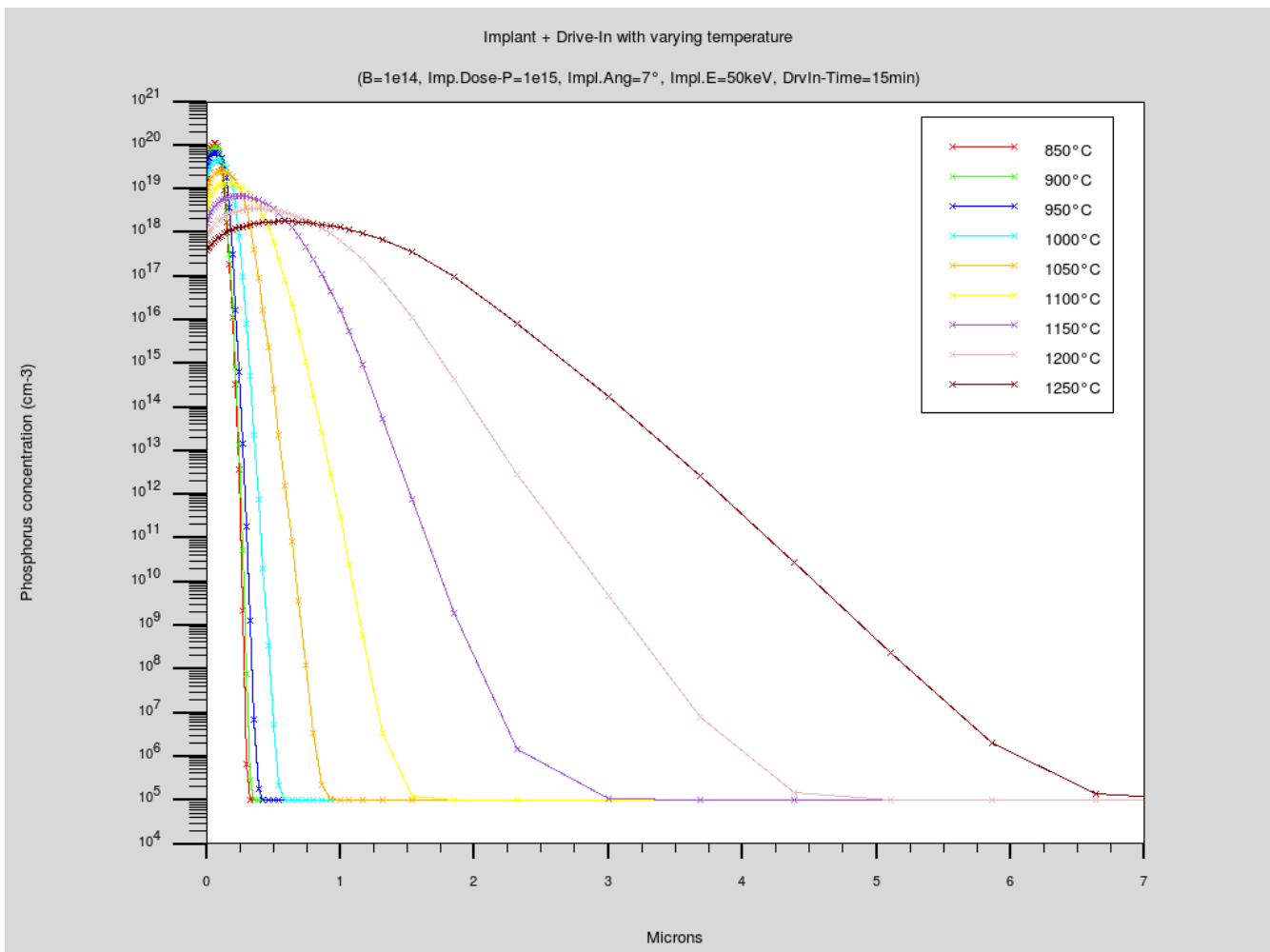


Figura 33: Implante y Drive-In

Como podemos ver en la Figura 33 el rango de variación de los perfiles de implantación es mucho mayor que el de tiempo, alrededor de 3 μm . Sin embargo, la variación del pico de concentración es bastante. Alrededor de 3 órdenes de magnitud, como se puede apreciar en detalle en la Figura 34.

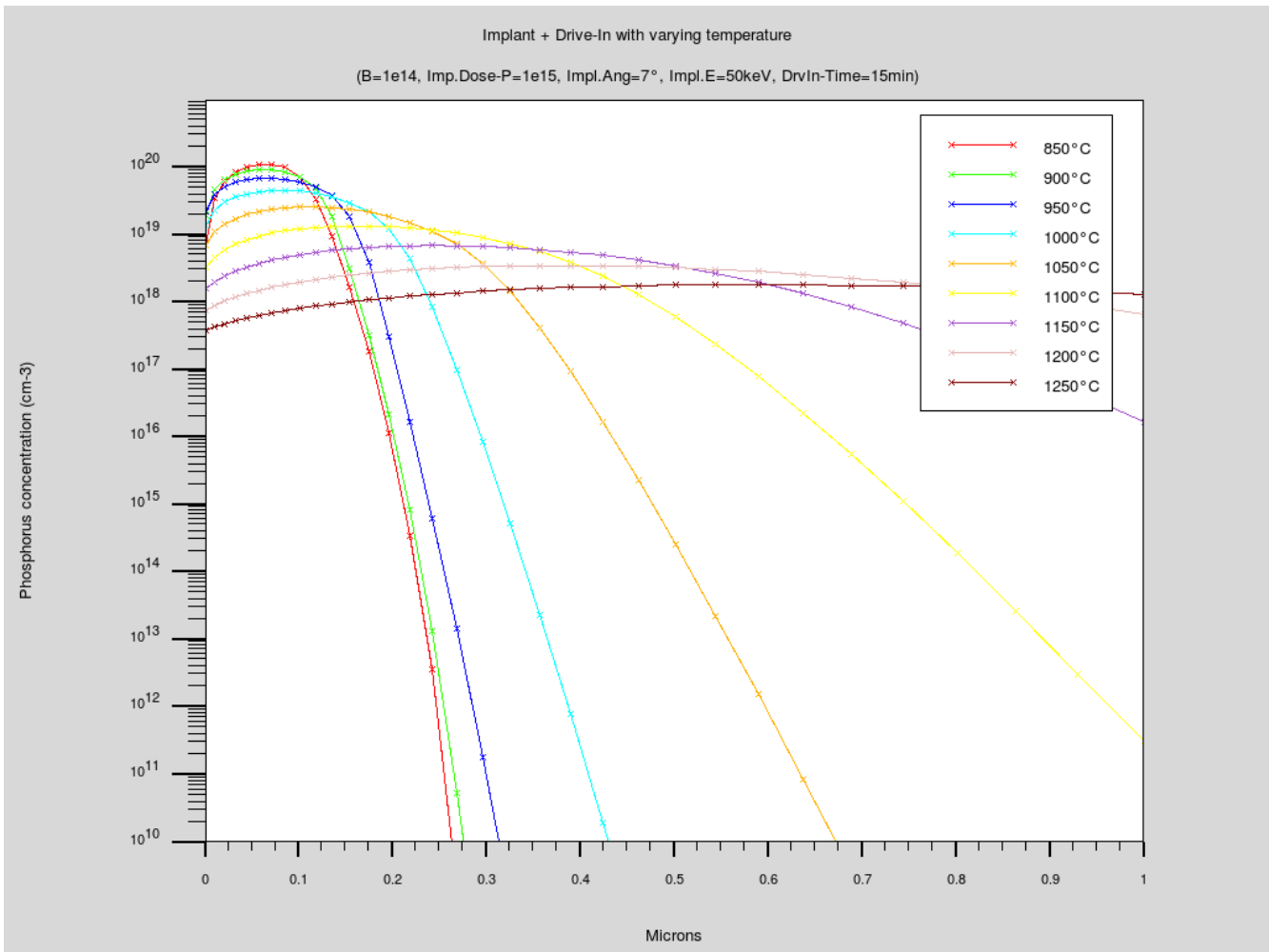


Figura 34: Vista detalle de los perfiles de implantación con variación en la temperatura.

A partir de esto podemos concluir que la profundidad y distribución del perfil de implantación es más susceptible al cambio con la variación de la temperatura que con el tiempo de recocido.

4.8 Estudio más detallado de la unión P-N

La unión p-n es uno de los dispositivos microelectrónicos más importante en la microelectrónica, muchos otros tipos de dispositivos se derivan de este; es por esta razón que vale la pena otorgar un poco más de atención al funcionamiento de la unión por que hay muchos fenómenos que ocurren ahí mismo.

El experimento consiste de lo siguiente:

1. Crear el dispositivo con Athena

2. Simular el funcionamiento de la celda y extraer una estructura en dos condiciones en oscuridad:
 1. Corriente en cortocircuito
 2. Voltaje en circuito abierto
3. Simular el funcionamiento de la celda en condiciones de iluminación usando 20 valores diferentes de polarización entre 0v y el voltaje de circuito abierto. En cada paso se exporta la estructura; el objetivo es extraer gráficas del funcionamiento interno de la celda en cada una de esas situaciones.
4. Obtener la curva IV de la celda en cuatro condiciones de iluminación: Oscuridad (0%), 25%, 50%, 75% y 100% de la potencia del haz de luz.
5. Procesar gráficas en condiciones de oscuridad e Iluminación (en I_{sc} y V_{oc})
6. Procesar gráfica de curvas IV
7. Generar animaciones de las mediciones.

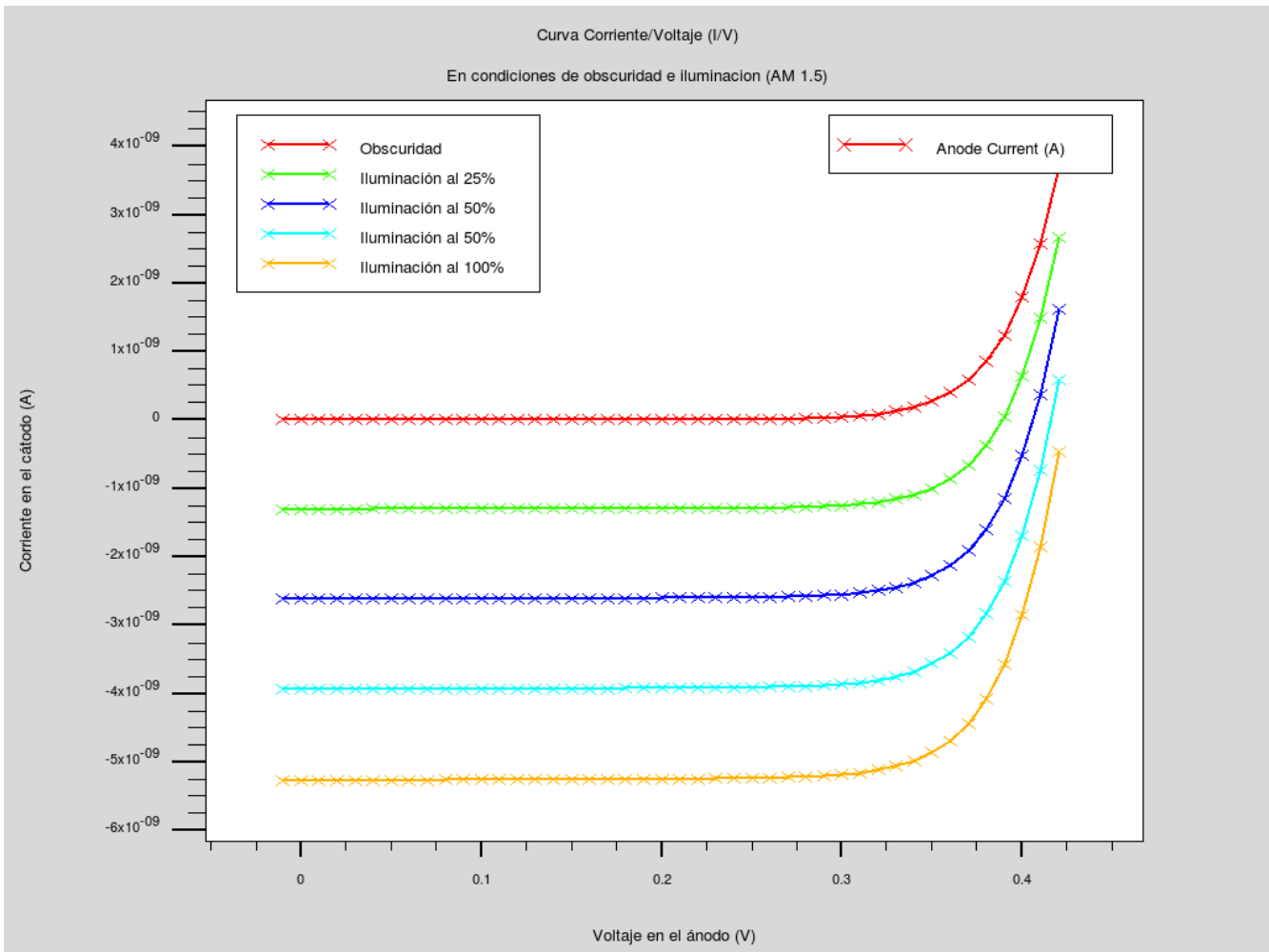


Figura 35: Celda solar en cinco diferentes condiciones de iluminación

4.9 Unión p-n de 1 μm por implantación de iones

Para los siguientes experimentos es necesario controlar la profundidad de la unión. El objetivo de este experimento es obtener una unión de 1 μm usando el proceso de implantación de iones. El método de investigación para este experimento es a prueba y error. Las condiciones son:

- Sustrato de Silicio cristalino con orientación <100>; e impurezas de Boro con concentración de 10^{13} cm^{-3} .
- Dimensiones: Altura 3 μm, ancho 10 μm, grosor 1μm.
- Implantación:

- Impurezas de Boro aceleradas con energía de 50 KeV con dosis de 10^{15} cm^{-2} .
- Modelo de implantación Gauss.
- Inclinación: 7 grados
- rotación: 30 grados
- Drive-in: 1050°C por 15 min

A continuación podemos ver los resultados de 8 pruebas para conseguir la unión de 1 μm .

	Profundidad de unión (μm)	Notas
1	0.648996	
2	0.729242	Incrementar el tiempo de drive-n de 15 a 20 min
3	0.733491	Bajar la rotación de 7 a 3 grados
4	1.90898	Rotación a 7 grados. Incrementa la temperatura a 100 C
5	1.19281	Baja la temperatura en 50 C
6	1.11248	Baja el tiempo 3 minutos.
7	1.03338	Baja el tiempo 3 minutos.
8	1.0007	Baja el tiempo 1 minuto.

Tabla 2: Historial de resultados para unión de 1 μm

Los parámetros finales son:

- Sustrato de Silicio cristalino con orientación <100>; e impurezas de Boro con concentración de 10^{13} cm^{-3} .
- Dimensiones: Altura 3 μm , ancho 10 μm , grosor 1 μm .
- Implantación:
 - Impurezas de Boro aceleradas con energía de 50 KeV y dosis de 10^{15} cm^{-2} .
 - Modelo de implantación Gauss.
 - Inclinación: 7 grados
 - rotación: 30 grados
- **Drive-in: 1100°C por 13 min**

4.10 Detalles de la zona de agotamiento de la unión p-n

En este experimento buscamos mejorar el entendimiento de algunas de las propiedades de la zona de agotamiento de la unión p-n. Para esto haremos uso del dispositivo creado en el capítulo 4.9 y la usaremos con Atlas para que simule la unión en condiciones de equilibrio para después graficar la estructura con Tonyplot.

El primer resultado se encuentra en la Figura 36:

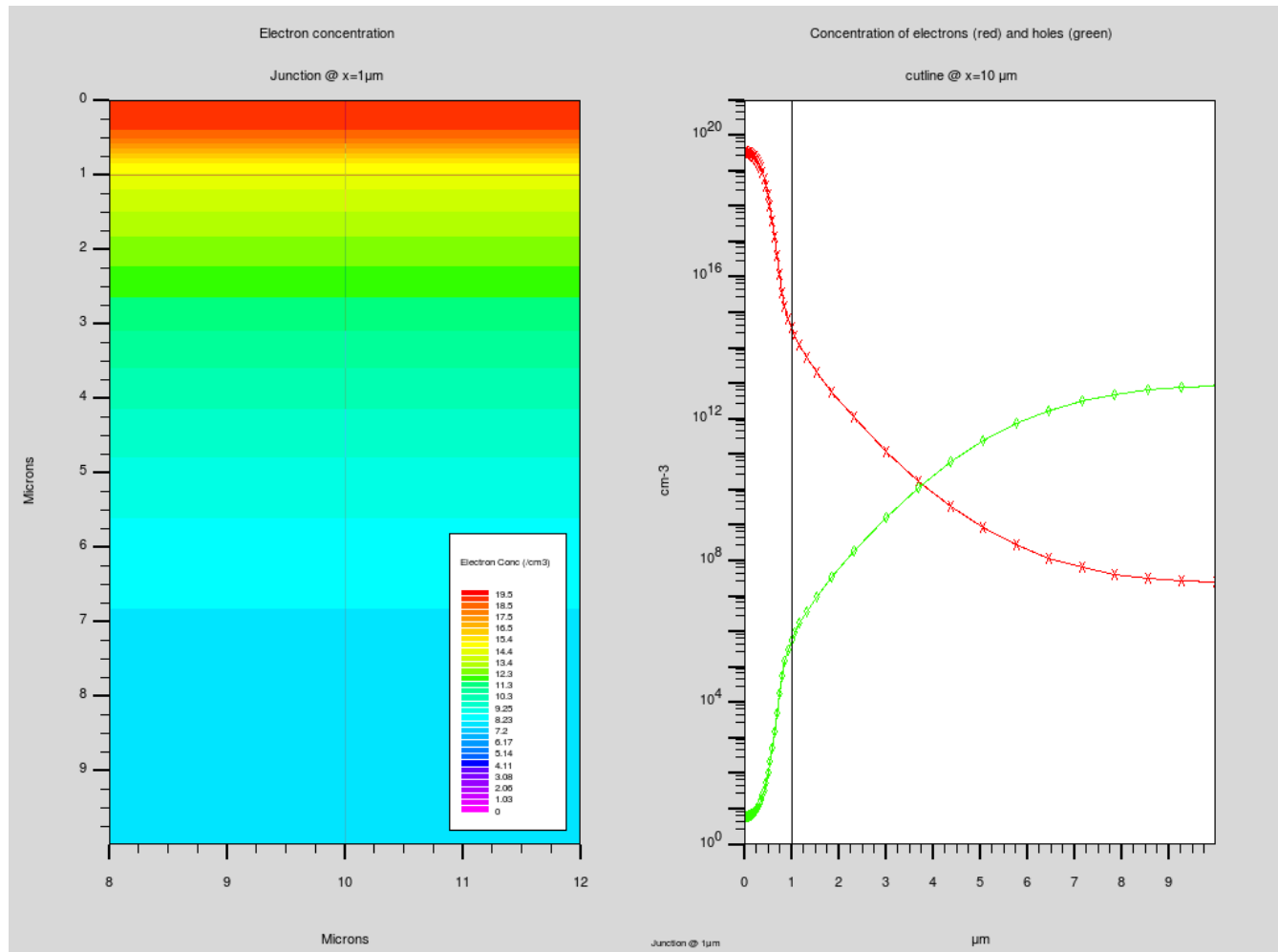


Figura 36: Gradiente en 2D donde se puede observar la distribución de electrones (Izquierda). Gráfica de concentración de electrones y huecos en los primeros 10 micrómetros del dispositivo (Derecha)

El campo eléctrico se puede ver en la Figura 37.

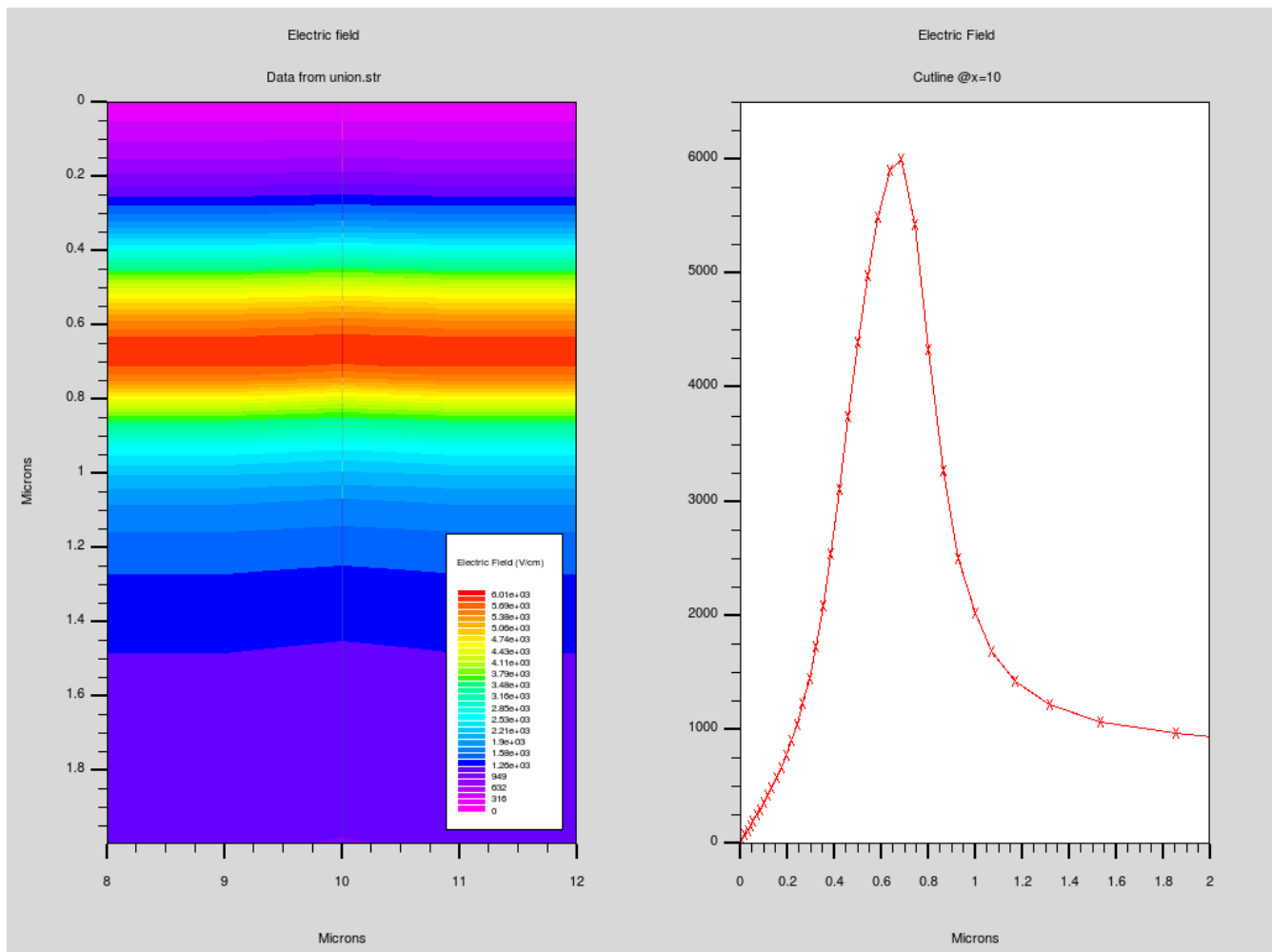


Figura 37: Campo eléctrico en la unión. Gradiente y gráfica con cutline.

4.11 Unión P-N abrupta

Esta es una unión p-n abrupta, fabricada mediante deposición con la sintaxis de Atlas; aunque también puede ser fabricada con Athena.

La estructura es muy sencilla por que consta de dos capas. La primer capa es de 10 x 1 μm de ancho, mientras que la segunda capa queda abajo de la primera y mide 10 x 10 μm . Ver la Figura 38.

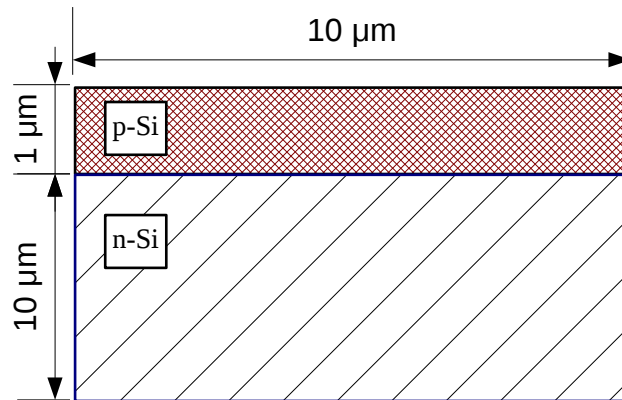
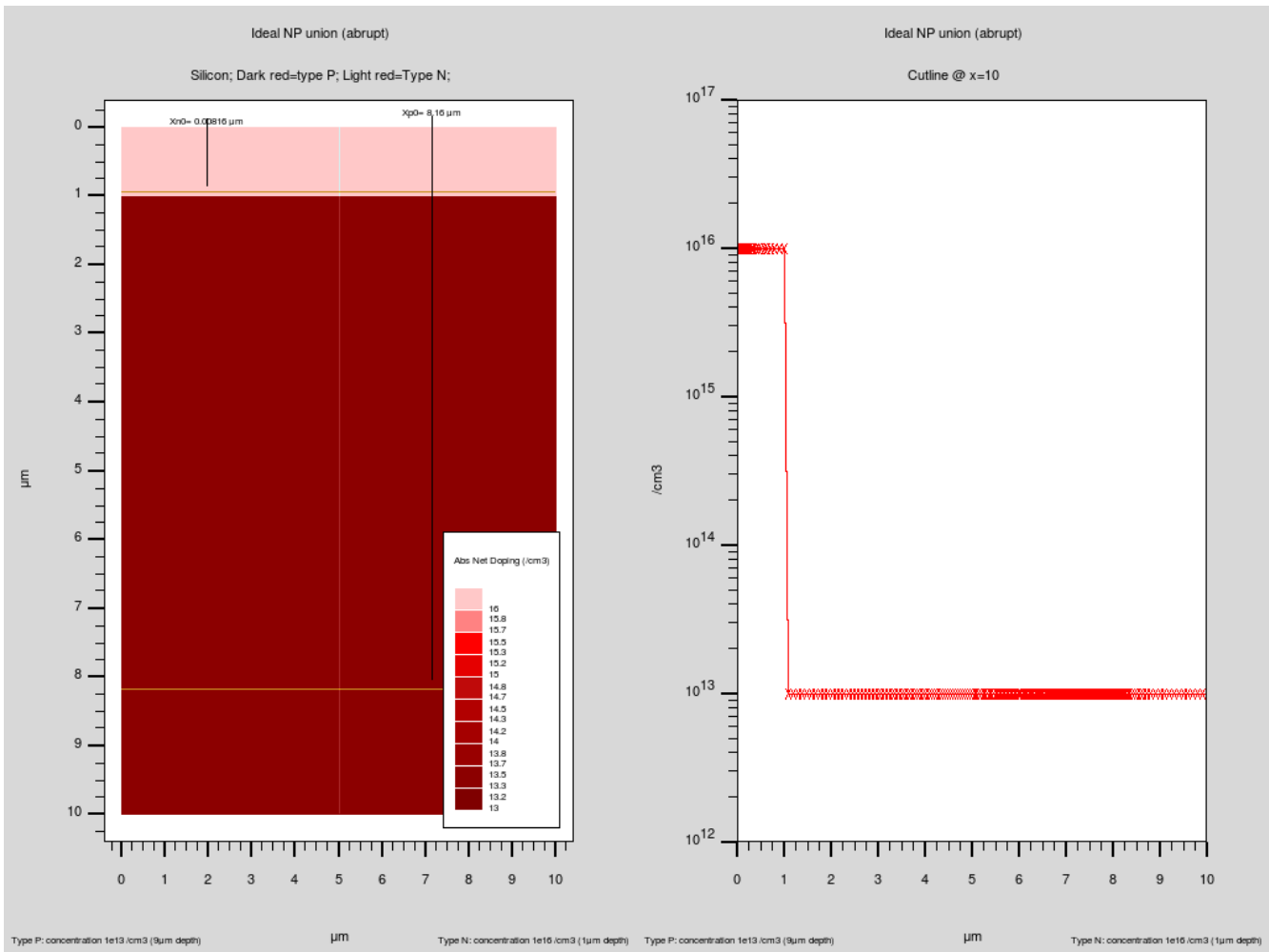


Figura 38: Estructura de unión p-n abrupta. Las medidas no están a escala.

La concentración de aceptores en la capa p-Si es de 10^{16} cm^{-3} mientras que la concentración de donantes en la capa n-Si es de $1e^{13} \text{ cm}^{-3}$. Una vez que Atlas termina de calcular las condiciones iniciales y de equilibrio extraemos la estructura del dispositivo para poder hacer las visualizaciones con Tonyplot.



(a)

(b)

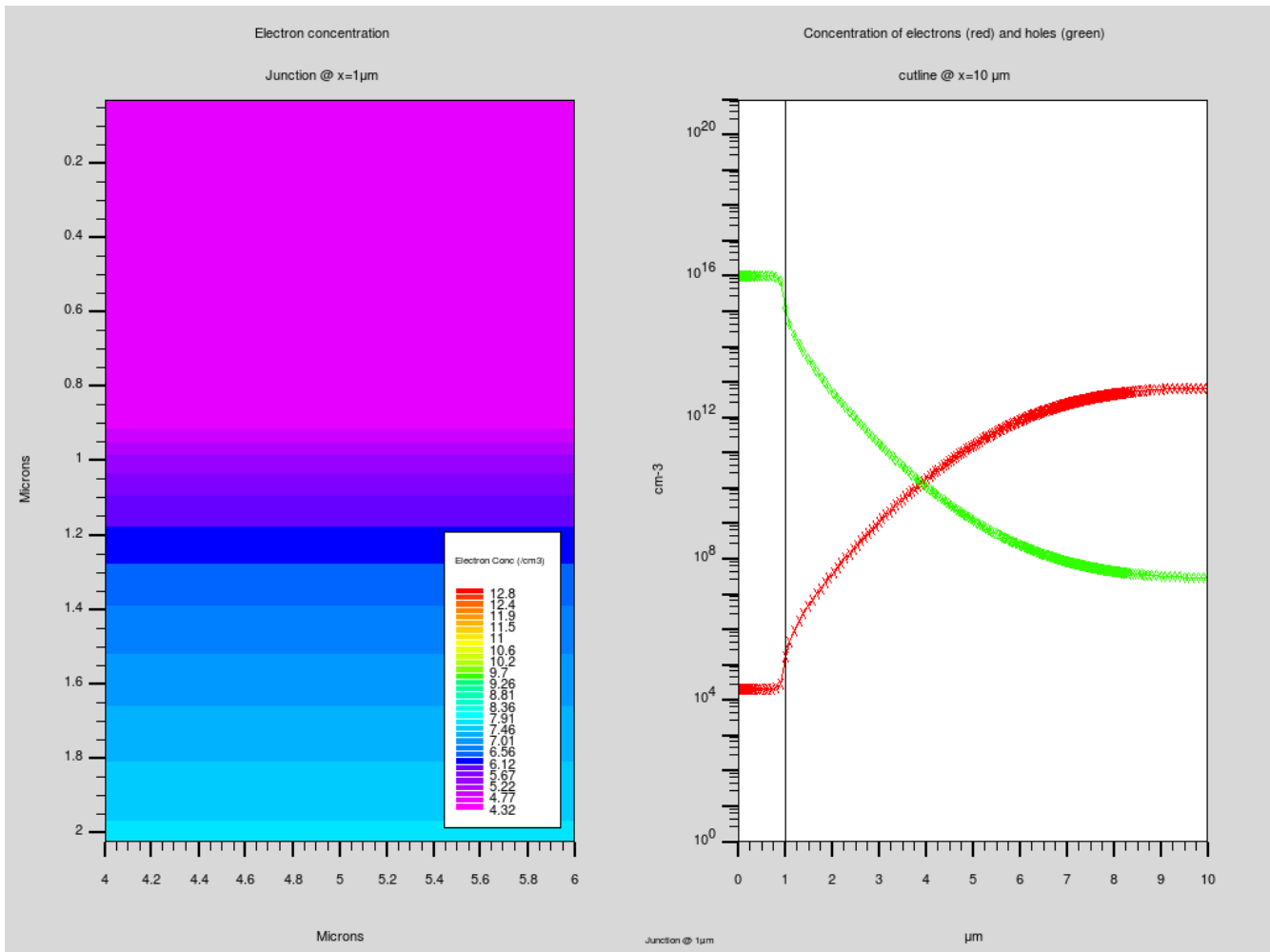
Figura 39: Gráfica de dopaje absoluto

En la Figura 39-a se puede distinguir las dos regiones del dispositivo graficado en base al dopaje absoluto. La zona en color rojo claro es la capa de silicio tipo P con concentración de 10^{16} cm^{-3} y la de color rojo oscuro es la de tipo N con concentración de 10^{13} cm^{-3} .

En la Figura 39-b Podemos ver una gráfica de la concentración absoluta vista desde un corte de línea en $x=10$. Se nota el cambio abrupto de concentración justo a $x= 1 \mu\text{m}$.

Otra cosa importante de la Figura 39-a es que hay dos líneas horizontales marcando el inicio y el final de la zona de agotamiento. Los resultados que arroja TonyPlot son de $x_{n0}=0.00816 \mu\text{m}$ hacia arriba de la unión mientras que $x_{p0}= 8.16 \mu\text{m}$. Estos resultados son coherentes con los cálculos??

<< Poner calculos de la zona de agotamiento aca >>



(a)

(b)

Figura 40: (a) Gráfica 2D que muestra la concentración de electrones. (b) Grafica de corte de línea con huecos y electrones en la unión

4.12 Efectos del dopaje en una celda solar con sustrato tipo P

Para poder entender el efecto del dopaje crearemos una celda solar de Silicio cristalino; la parte del sustrato sera la del tipo P, mientras que la capa superior sera también de silicio pero de tipo N. La profundidad de unión sera de 1 μm , fabricado con Athena mediante deposición.

El experimento consiste en variar las concentraciones en ambas regiones en siete puntos en el rango de 10^{13} cm^{-3} a 10^{19} cm^{-3} . En total serán 49 combinaciones. Las siguientes figuras de mérito se calcularán en cada uno de los experimentos:

- Voc (Voltaje de circuito abierto)

- Isc (Corriente en corto circuito)
- FF (Fill factor)
- Pmax (Potencia máxima)
- La curva IV.

A continuación veremos los resultados.

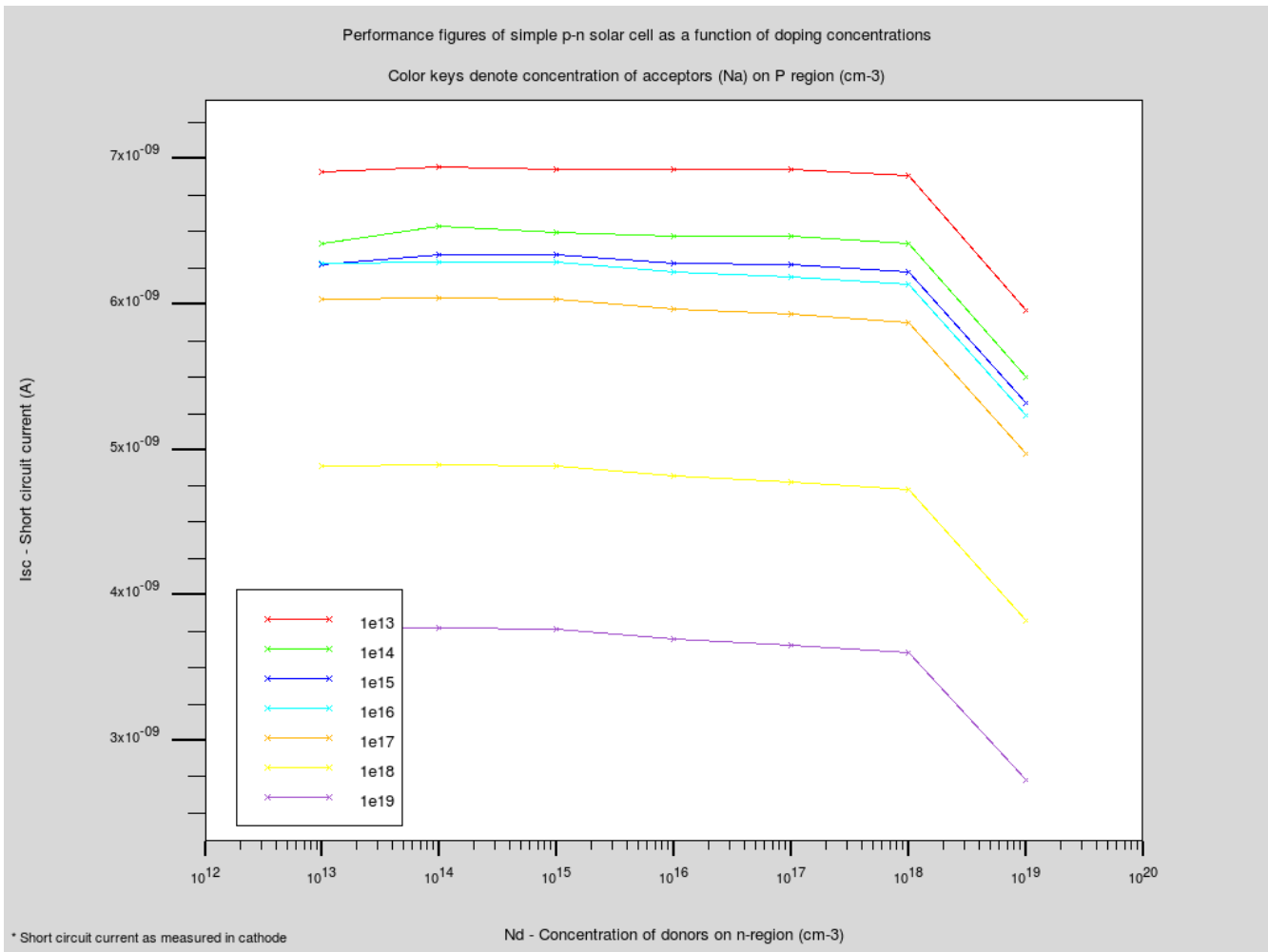


Figura 41: Corriente en corto circuito en función de las diferentes combinaciones de dopaje entre sustrato tipo P y capa superior tipo N

En la Figura 43 podemos ver la corriente de corto circuito en función de las combinaciones de dopaje en las dos capas de la celda solar.

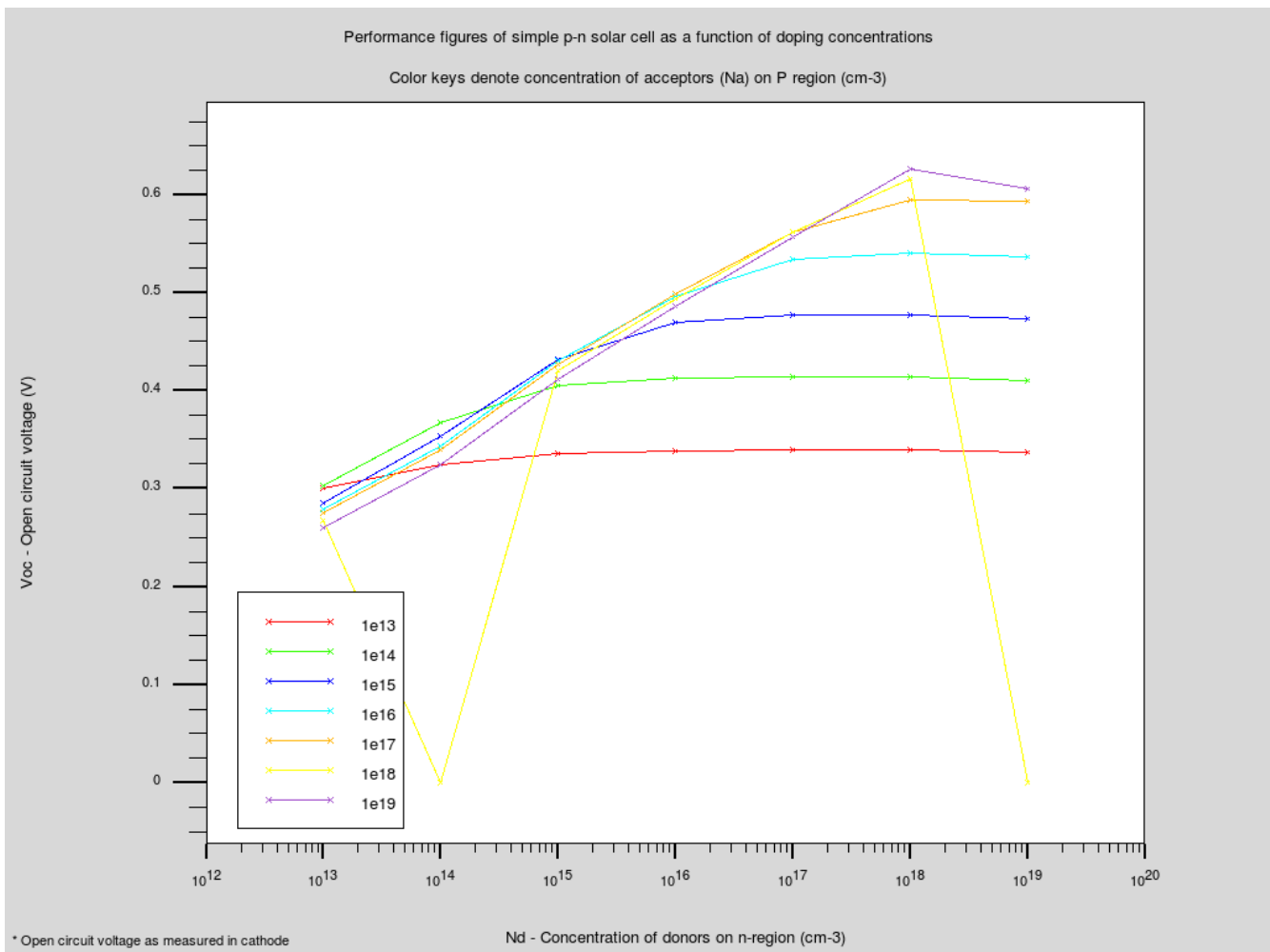


Figura 42: Comportamiento del voltaje a circuito abierto con respecto a las diferentes combinaciones de dopaje

Las 5 mejores resultados con respecto a eficiencia???

las corridas que fallaron por problemas de convergencia:

- P_1e+17, N_10¹³
- P_1e+18/N_1e+14
- P_1e+19/N_1e+18
- P_1e+19/N_1e+19

Nota: tambien tengo graficas de campo electrico

4.13 Comparación entre uniones con sustrato P y N

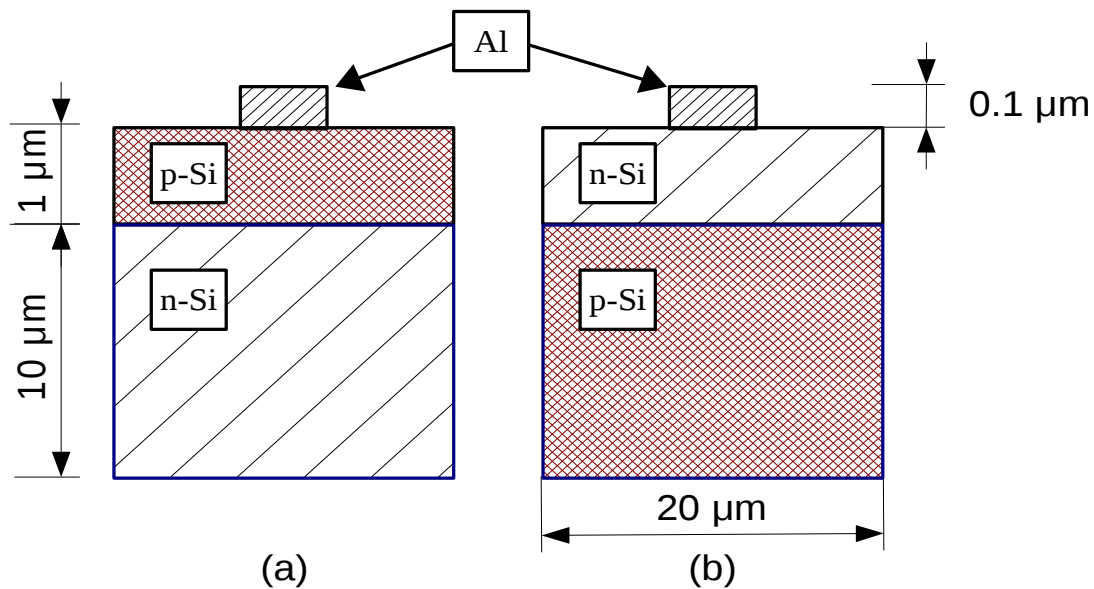
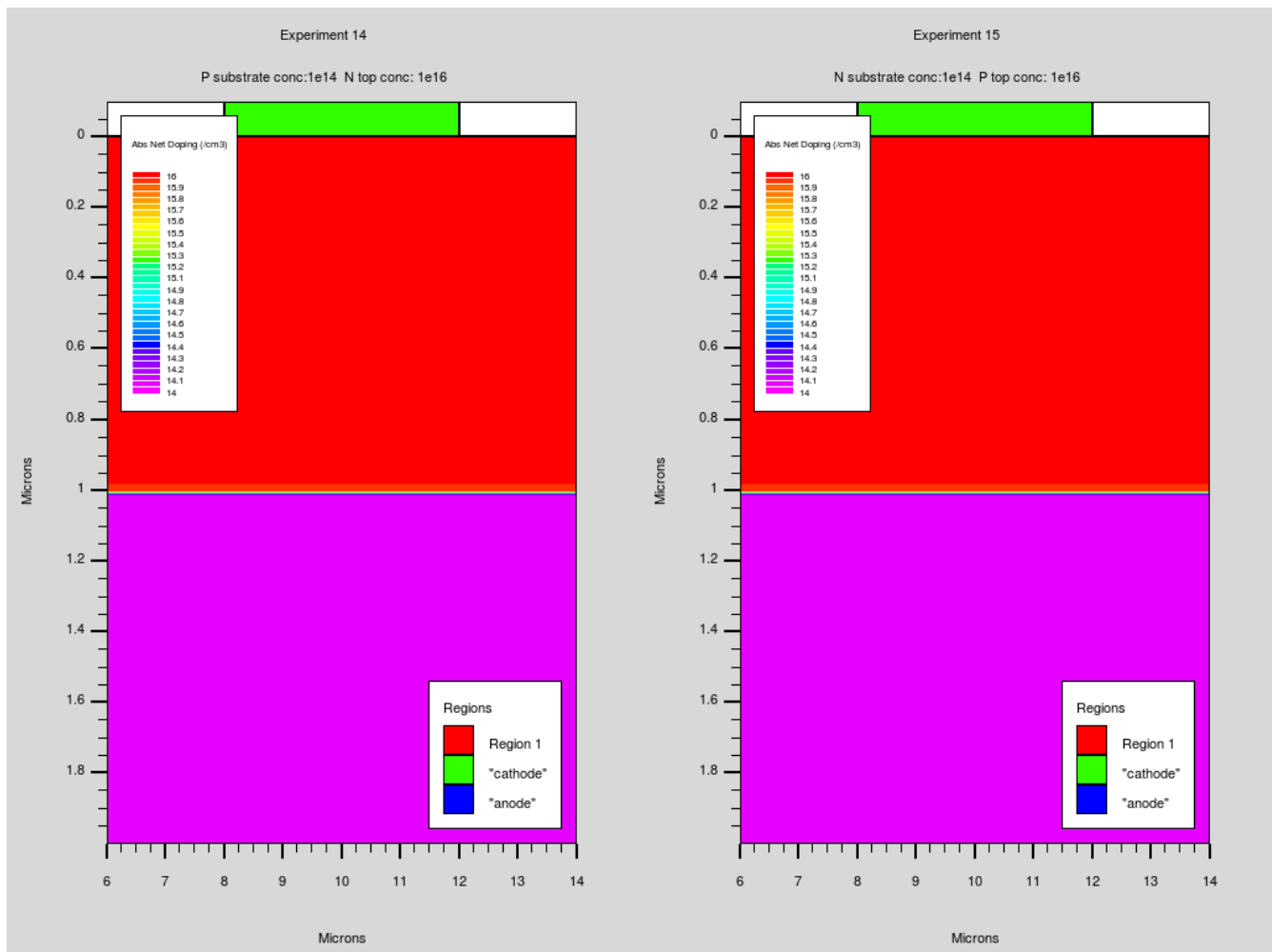


Figura 43: Esquema de celda solar solar usada en las pruebas

El experimento compara el funcionamiento de dos celdas, una con sustrato tipo N y otra con sustrato tipo P. La profundidad de unión en ambas celdas sera de 1 µm. En la Figura 43 podemos ver las dimensiones de ambas celdas. En ambas celdas la concentración de dopantes es de 10^{14} cm^{-3} para el sustrato y 10^{16} cm^{-3} en la capa superior.

4.13.1 Dopaje y portadores libres

Comenzamos la comparación con el dopaje. En la Figura 44 vemos una grafica en 2D para el dopaje absoluto, no hay distinción entre el tipo de dopaje, sino en la concentración. En este sentido ambas celdas son iguales: El sustrato tiene una concentración de impurezas de 10^{14} cm^{-3} mientras que la concentración de impurezas de la capa superior es de 10^{16} cm^{-3} .

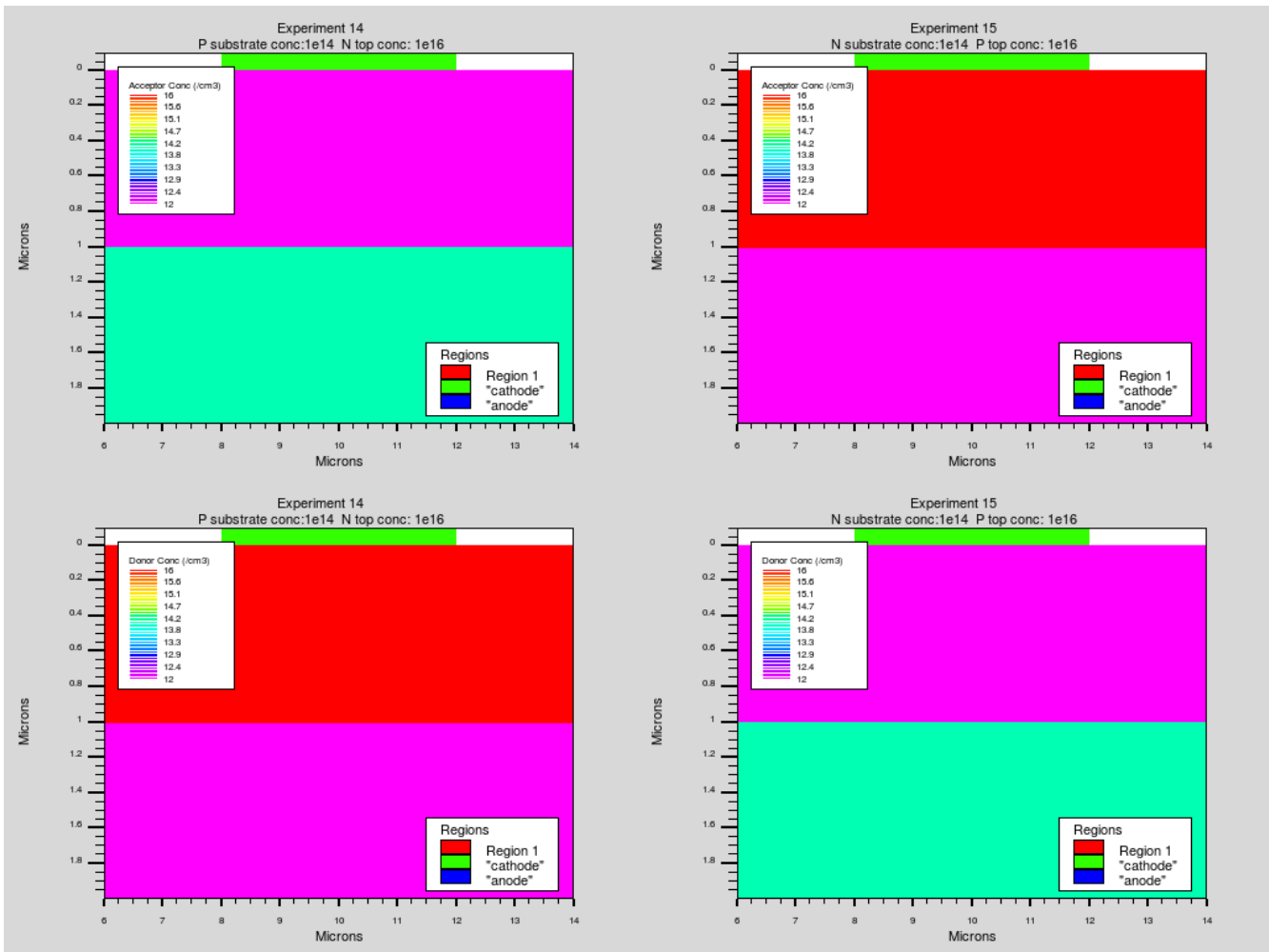


(a) Substrato tipo P

(b) Sustrato tipo N

Figura 44: Dopaje neto absoluto

A continuación la concentración de portadores libres en la Figura 45. Con esto podemos estar seguros de que el tipo de dopaje y concentraciones de impurezas sean las correctas.



(a) Sustrato tipo P

(b) sustrato tipo N

Figura 45: Concentración de portadores libres.

4.13.2 Parámetros eléctricos

Las figuras de mérito más importantes son la curva de corriente-voltaje, potencia, potencia máxima y Fill Factor. En la figura 48 vemos la curva IV junto con los demás parámetros eléctricos. La figura 49 contiene los parámetros eléctricos para la celda solar de sustrato tipo N.

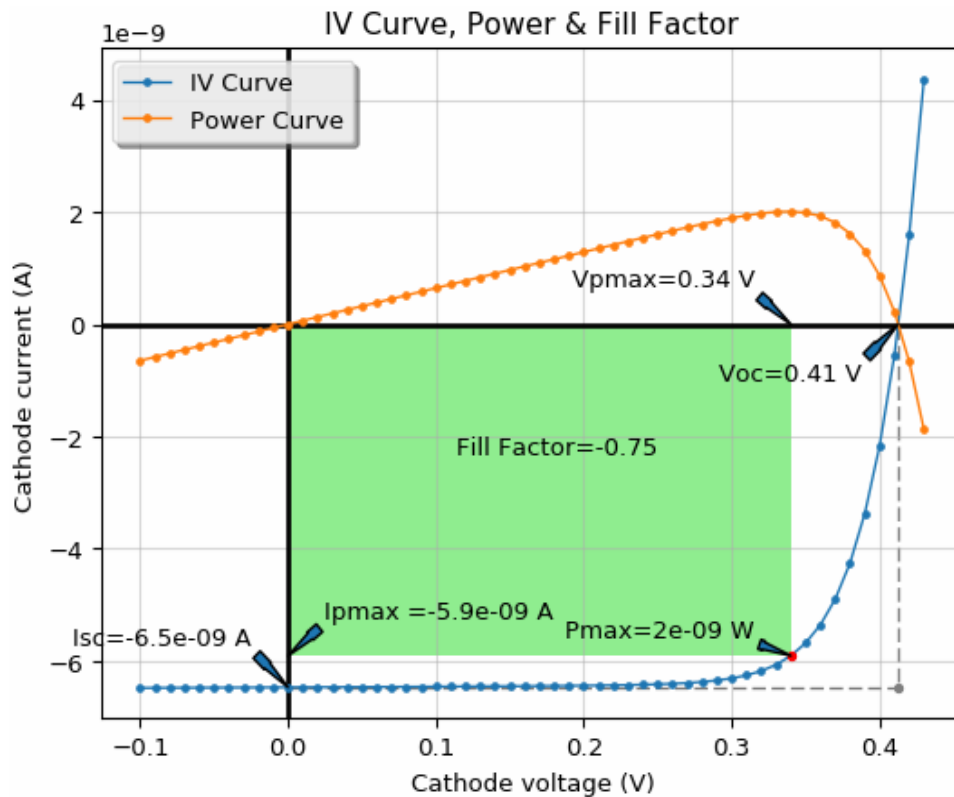


Figura 46: Curva IV para sustrato tipo P

4.14 Efectos de la profundidad de unión con sustrato N

¿Cómo cambia la eficiencia de una celda solar con unión abrupta a los cambios de la profundidad de unión?

Para contestar esta pregunta simularemos varias celdas solares con sustrato N y variaremos la profundidad de unión entre $0.5 \mu\text{m}$ y $5.0 \mu\text{m}$ en incrementos de $0.5 \mu\text{m}$. La concentración de impurezas en el sustrato será de 10^{14} cm^{-3} mientras que la capa superior será de 10^{16} cm^{-3} . En total son 10 simulaciones.

4.14.1 Resultados

Gráfica de Voltaje y corriente en función de la profundidad de la unión.

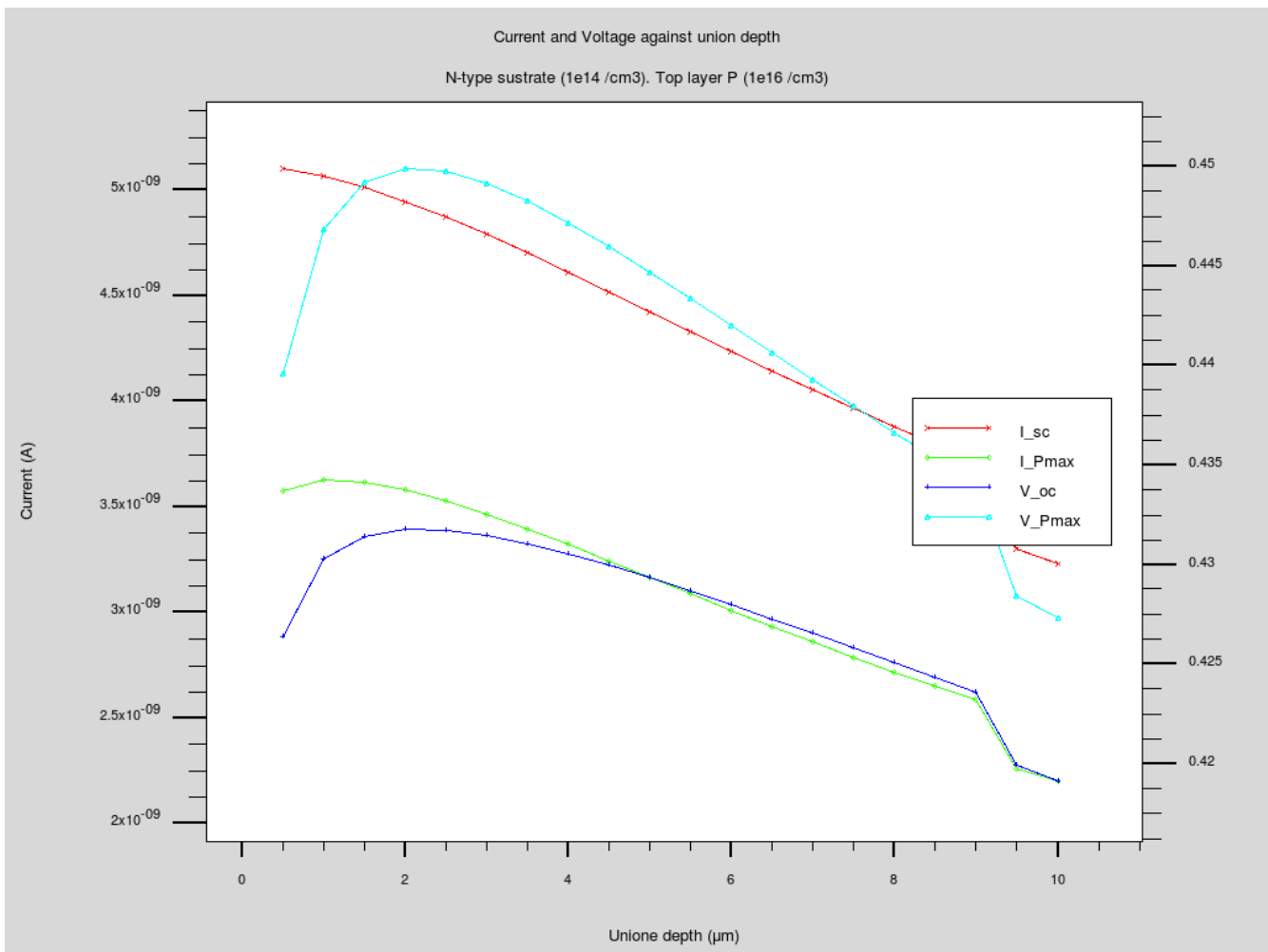


Figura 47: Voltaje y corriente vs profundidad de unión

A continuación encontramos la manera que cambia la eficiencia y el Fill Factor.

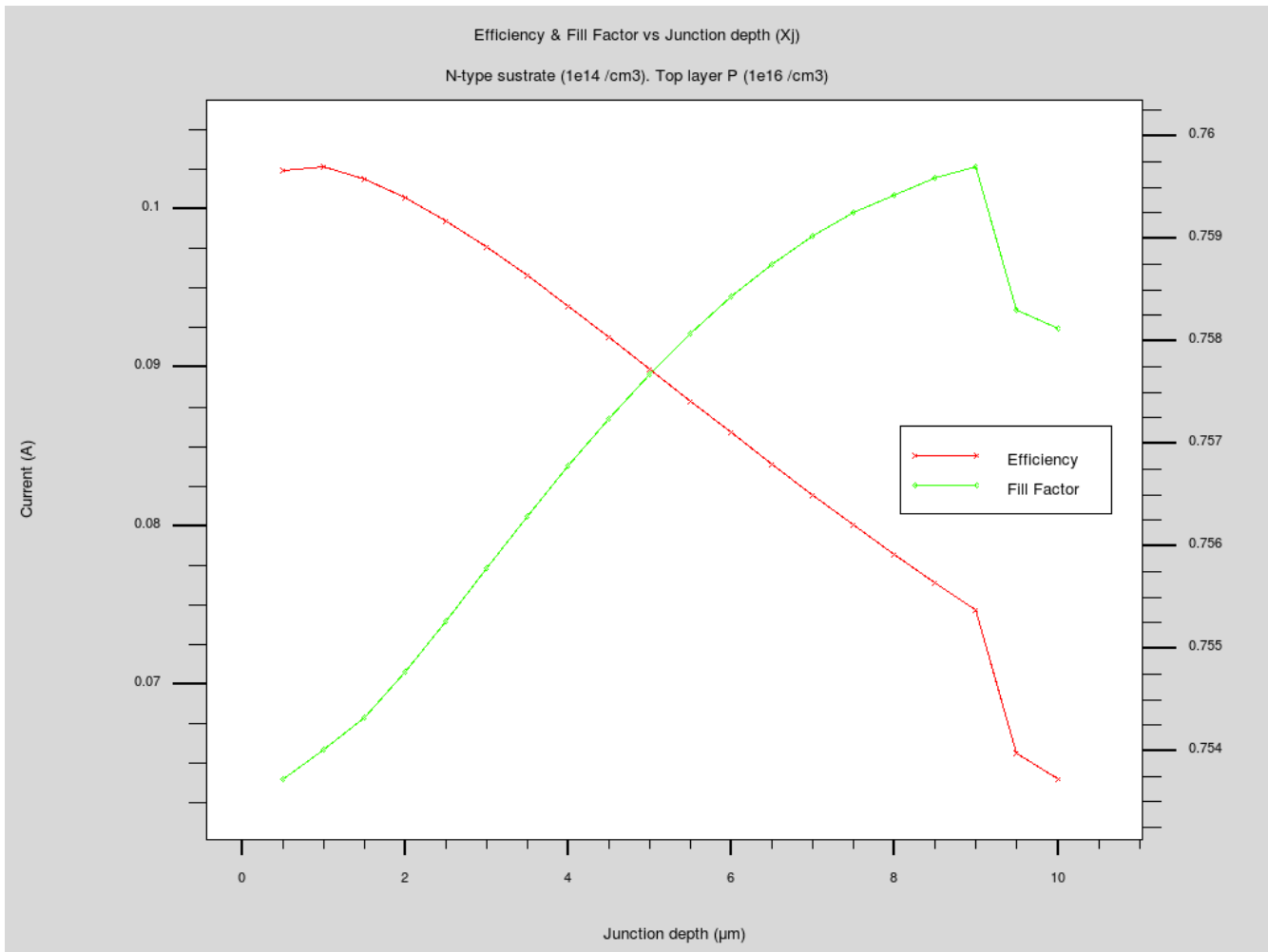


Figura 48: Fill Factor y eficiencia en función de profundidad de unión

Por último podemos ver las curvas de corriente/voltaje de los diferentes experimentos.

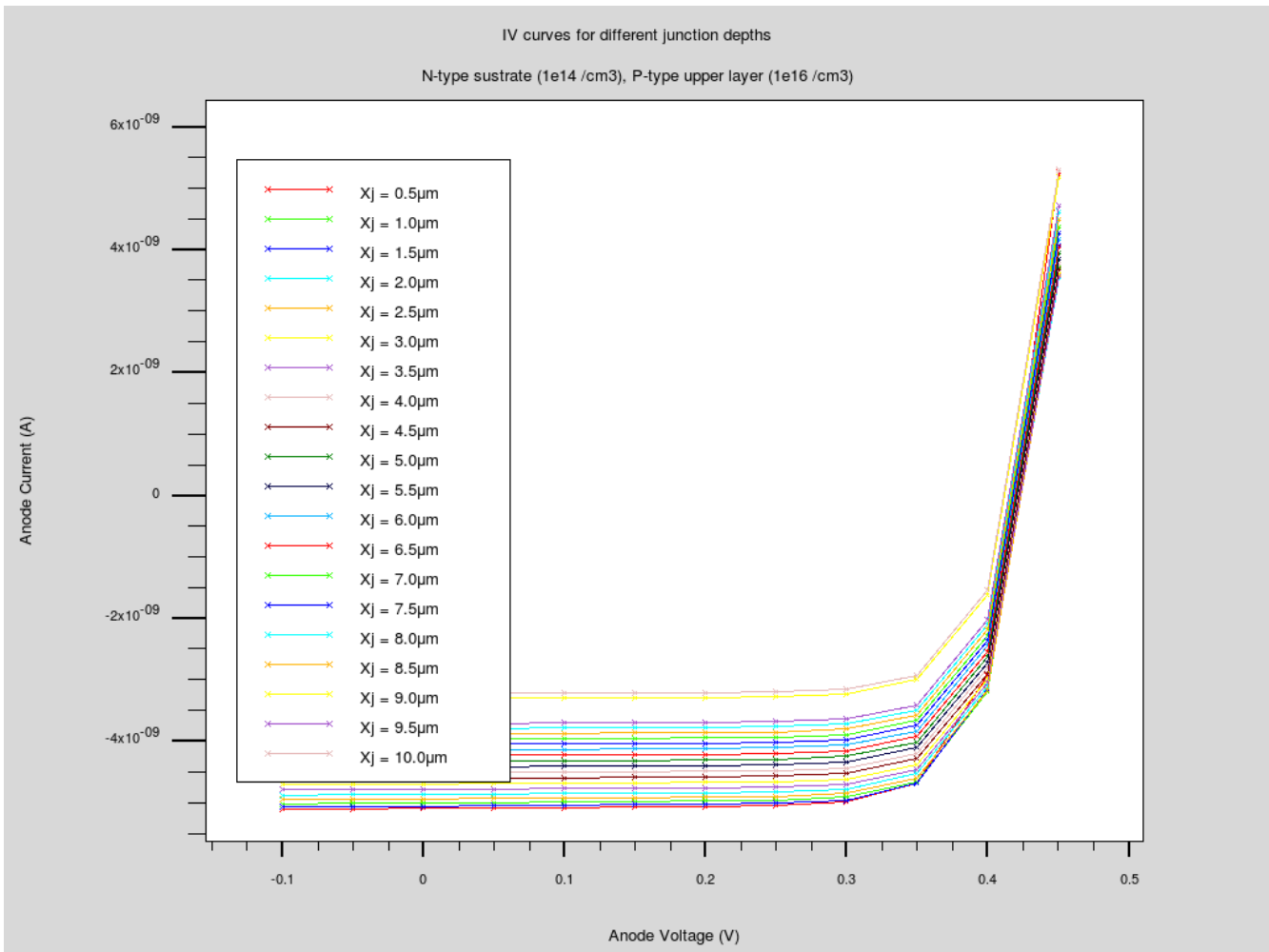


Figura 49: Curvas IV de las 10 celdas solares.

4.15 Efectos de la profundidad de unión con sustrato P

¿Cómo cambia la eficacia de una celda solar con unión abrupta y sustrato P con diferentes profundidades de unión.

Para contestar esta pregunta simularemos varias celdas solares con sustrato P y variaremos la profundidad de unión entre 0.5 μm y 5.0 μm en incrementos de 0.5μm. La concentración de impurezas en el sustrato será de 10^{14} cm^{-3} mientras que la capa superior será de 10^{16} cm^{-3} . En total son 10 simulaciones.

4.15.1 Resultados

Gráfica de Voltaje y corriente en función de la profundidad de la unión.

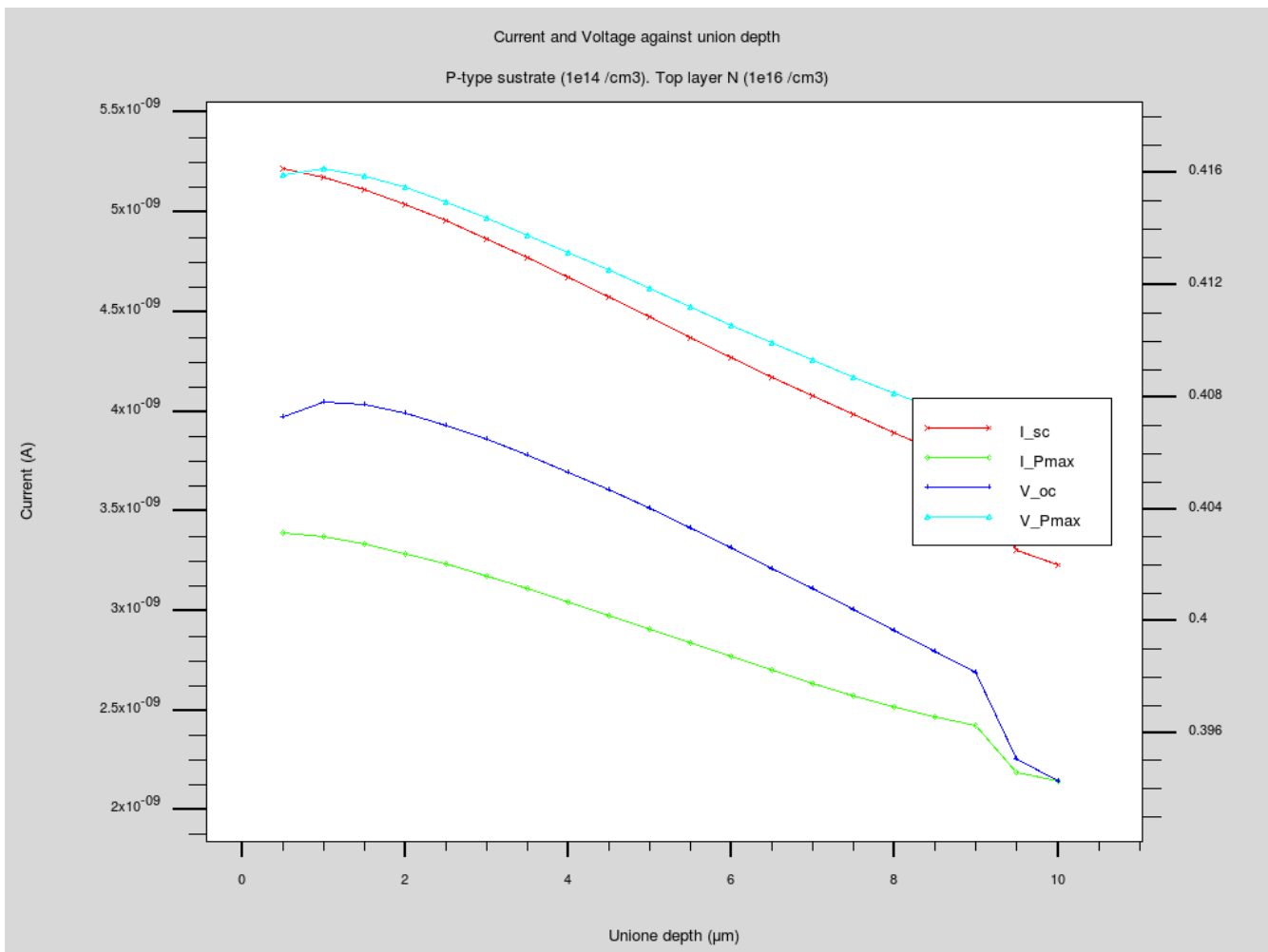


Figura 50: Voltaje y corriente vs profundidad de union

A continuación encontramos la manera que cambia la eficiencia y el Fill Factor.

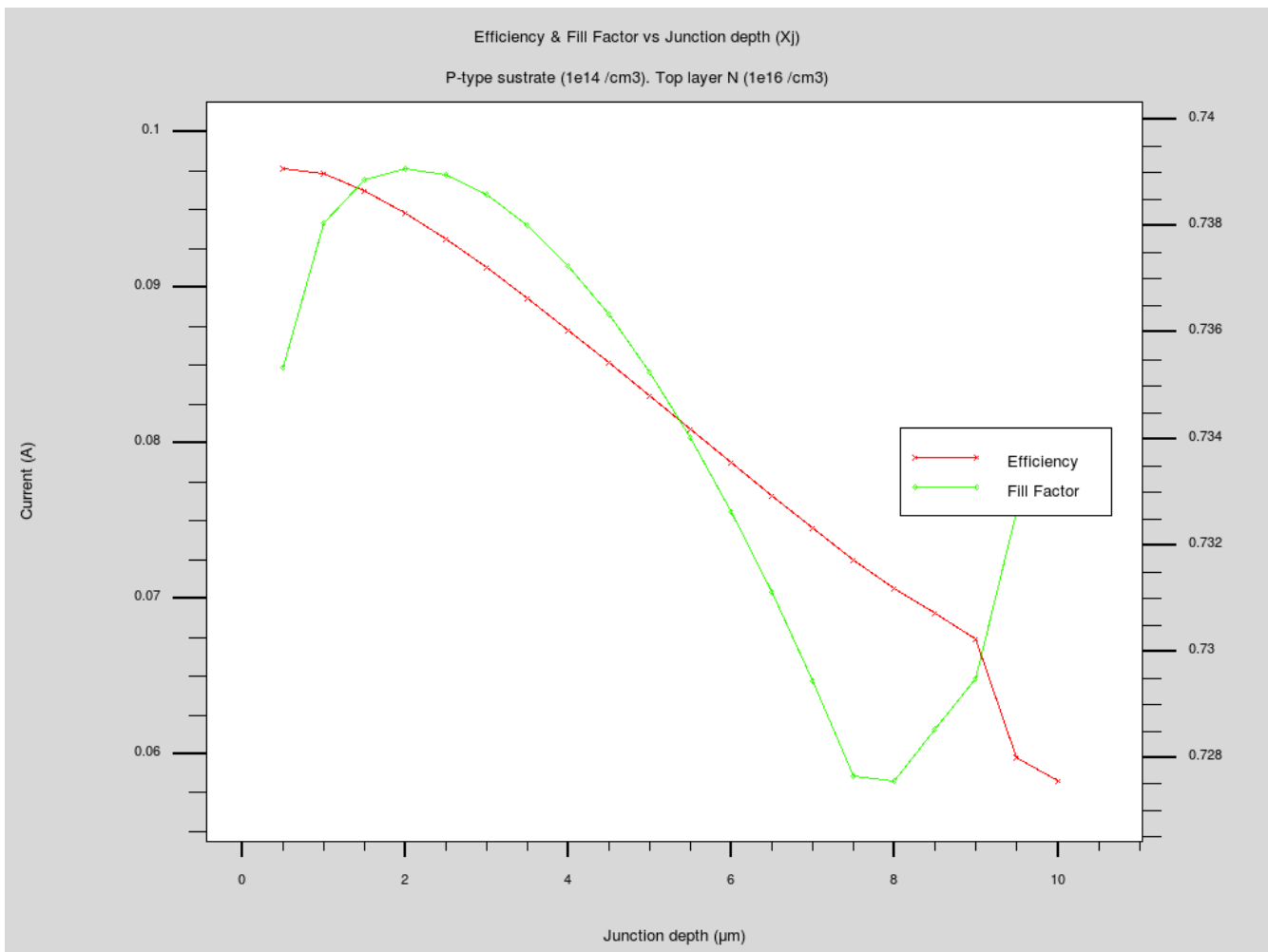


Figura 51: Fill Factor y eficiencia en función de profundidad de unión

Por último podemos ver las curvas de corriente/voltaje de los diferentes experimentos.

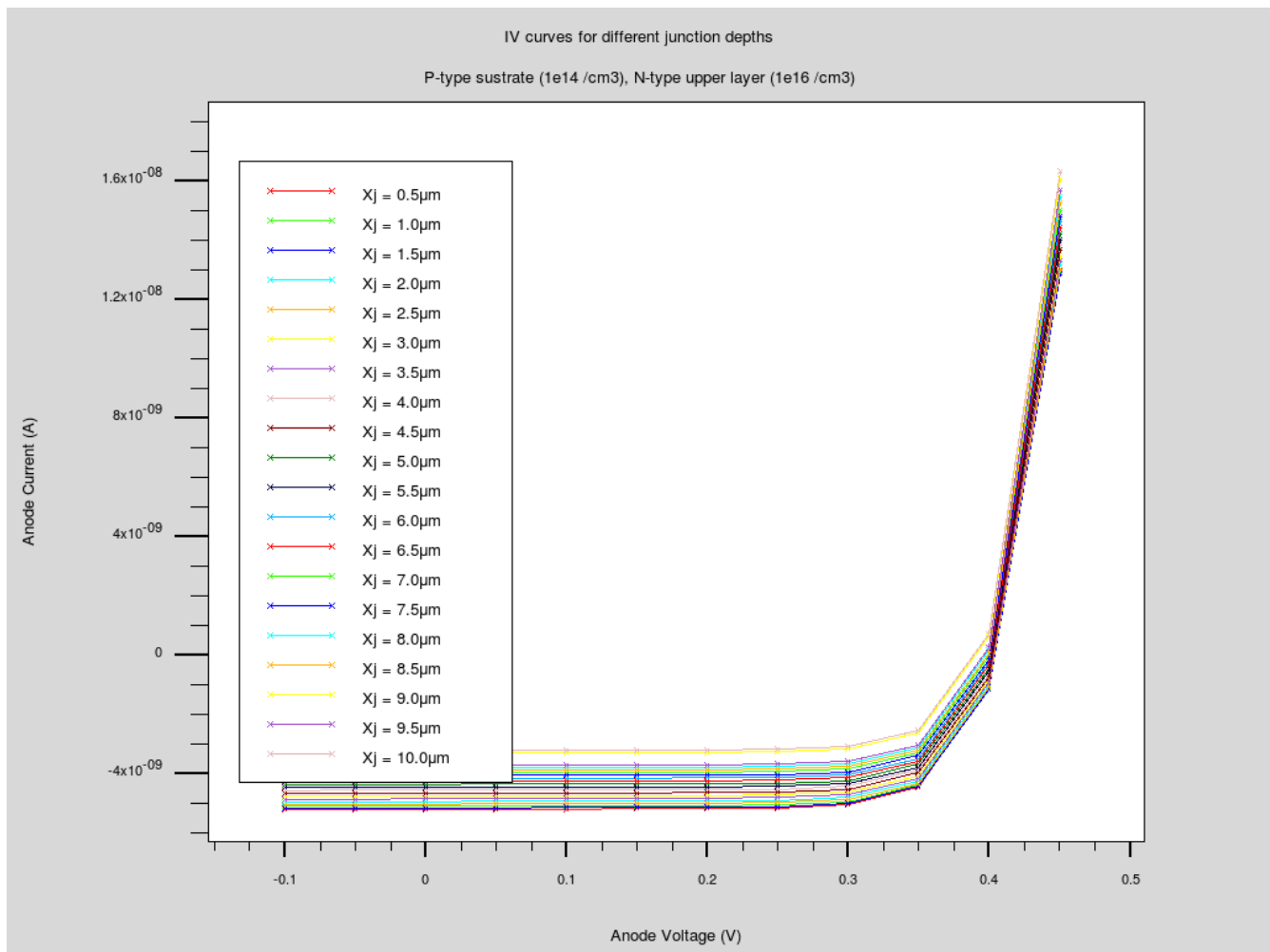


Figura 52: Curvas IV de las 10 celdas solares.

4.16 Variaciones simultáneas de sustrato, dopaje y profundidad de unión.

Estudio de los efectos en la eficiencia debido a cambios combinados de tipo de sustrato, dopaje y profundidad de unión.

En los experimentos previos se estudió un solo parámetro a la vez. En esta nueva serie de experimentos buscaremos la celda solar con el mayor rendimiento en función del tipo de sustrato, dopaje y profundidad de unión. Para reducir el número de simulaciones solo consideraremos los siguientes puntos:

- Sustrato: N,P
- Dopaje en el sustrato(cm^{-3}): 10^{14} , 10^{15}

- Dopaje en capa superior (cm⁻³): 10¹⁶, 10¹⁷, 10¹⁸
- Profundidad de unión (um): 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 3.5

Aunque son 84 simulaciones no son todas las combinaciones posibles. Solo corremos las simulaciones de nuestro interés y excluimos simulaciones que contengan la misma concentración en ambas capas o que el dopaje en el sustrato es mayor al de la capa superficial.

4.16.1 Resultados

Hay varias maneras de visualizar los resultados. En el Anexo XX se encuentran las tablas con todos los resultados.

La mejor iteración fue:

- Sustrato tipo N con concentración 10¹⁵ cm⁻³ (Fósforo)
- Capa superior tipo P con concentración de 10¹⁸ cm⁻³ (Boro)
- Profundidad de la unión (X_j): 0.50 um
- Eficiencia: 11.88 %

La movilidad de huecos es menor que la de los electrones, por eso tiene sentido

4.17 Reducción del tiempo de simulación

Cuando simulamos celdas solares debemos definir una fuente de iluminación usando la sentencia BEAM. Adicionalmente, Atlas ofrece dos perfiles de iluminación estándar: **AM0** y **AM1.5**. Cualquiera de ellos esta compuesto de un conjunto de 2004 pares de valores; el primero indica la longitud de onda y el segundo valor indica la potencia. Cada vez que Atlas ejecuta una simulación usa las 2004 muestras en cada punto de la malla haciendo que el tiempo requerido para ejecutar la simulación se incremente.

En general, cuando simulamos celdas solares no es necesario trabajar con el todas las muestras del espectro **AM0** o **AM1.5**; en Atlas, la sentencia BEAM contiene el parámetro `wave1.num` que nos permite usar solo una submuestra del espectro completo; esto es útil para la mayor parte de las simulaciones.

Si usamos el espectro AM1.5 ¿Cuántas muestras bastan para correr las simulaciones sin riesgo de perder demasiada exactitud?

Para responder a esta pregunta se hizo un breve experimento donde indicamos a Atlas que vamos a hacer una simulación con un haz de luz con el espectro **AM1.5** y variamos el

parámetro `wave1.num` en una escala de 6 puntos. Los resultados se pueden ver a continuación⁶.

Número de muestras (<code>wave1.num</code>)	Error en eficiencia	Error en Fill Factor	Error en potencia integrada
10	-0.25%	-2.54%	-2.29%
25	0.46%	0.01%	-0.46%
50	0.33%	0.16%	-0.16%
100	0.12%	0.10%	-0.02%
1000	0.00%	0.00%	0.00%
2000	0.00%	0.00%	0.00%

Tabla 3: Porcentaje de error y número de muestras

En base a los resultados anteriores podemos ver que con 25 muestras se obtiene un margen menor a 0.5% en el cálculo de la eficiencia y potencia integrada y mucho menor aun para el cálculo del Fill Factor.

⁶ Por desgracia no medí el tiempo de ejecución, pero las simulaciones tomaron mucho menos para ejecutarse

Capítulo 5 Conclusiones

5.1 Conclusiones

- El uso de software de simulaciones numéricas como el TCAD de Silvaco resulta ser una gran herramienta de aprendizaje e investigación, que no esta limitada solamente a las celdas solares.
- En nuestros experimentos comprobamos la complejidad de intentar predecir los perfiles resultantes de procesos como el de implantación de iones y drive-in.
- Es por estas dificultades que se diseñó una celda solar con unión abrupta y se estudiaron sus procesos de funcionamiento a detalle en condiciones ideales.
- Después de considerar todos los experimentos numéricos realizados con celdas solares, concluimos que:
 - El tipo de sustrato afecta el rendimiento de la celda solar por la diferencia en las movilidades de los huecos y electrones.
 - Se estudió el efecto de la profundidad de la unión en celdas solares tipo n-p y p-n.
 - En celdas con sustratos tipo n , el incremento en la profundidad de unión mejora a las figuras de desempeño, pero solo hasta 2 μm , donde empiezan a afectarlas negativamente.
 - En celdas con sustratos tipo p la profundidad de unión afecta positivamente las figuras de desempeño pero solo hasta profundidades de 1 μm , donde a partir de comienza a afectarlas negativamente.

Referencias

- [1] The International Energy Agency (IEA), «World Energy Outlook 2017», 2017
- [2] IEA Publications, «Mexico Energy Output», 2016
- [3] Ben G. Streetman, Sanjay Kumar Banerjee, «Solid State Electronic Devices, 6th Ed.», 2009
- [4] Ben G. Streetman, Sanjay Kumar Banerjee, «Solid State Electronic Devices, 6th Ed.», 2009
- [5] S. M. Sze, «Semiconductor Devices, Physics and technologies, 2nd Edition», 2002
- [6] Panayiotis Michalopoulos, «A novel approach for the development and optimization of state-of-the-art photovoltaic devices using Silvaco», 2001
- [7] Raymond A. Serway, Clement J. Moses, Curt A. Moyer, «Modern Physics - Third Edition», 2005
- [8] Augustin McEvoy, Tom Markvart, Luis Castañer, «Solar Cells - Materials, Manufacture and Operation», 2013
- [9] Koichi Kakimoto, «Springer Handbook of Crystal Growth», 2010
- [10] D Franke, T Rettelbach, C Häßler, W Koch, A Müller, «Solar Energy Materials & Solar Cells 72 (2002) 83–92 Silicon ingot casting: process development by numerical simulations», 2002
- [11] Richard C. Jaeger, «Introduction to Microelectronic Fabrication», 2002
- [12] W. G. Adams, F. R. S. y Mr. R. E. Day, «The actions of light on Selenium», 1877
- [13] C. E. Fritts , «On a new form of selenium cell, and some electrical discoveries made by its use», 1883
- [14] Albert Einstein, «Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt», 1905
- [15] M. Riordan y L. Hoddeson, «The origins of the pn junction», 1997.
- [16] D. M. Chapin, C. S. Fuller, G. L. Pearson, «A New Silicon p-n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electrical Power», 1954
- [17] National inventor's Hall of Fame, «Daryl Chapin - Inductee Detail»,

-
- [18] William Shockley, Hans J. Queisser, «Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells», 1961
- [19] Martin A. Green, «The Path to 25% Silicon Solar Cell Efficiency: History of Silicon Cell Evolution», 2009
- [20] National Center for Photovoltaics, «Research Cell Efficiency Records», 2018
- [21] Egorova, T., Schmutz, W., Rozanov, E., Shapiro, A. O., Usoskin, I., Beer, J., ... y Peter, T., «Revised historical solar irradiance forcing», 2017
- [22] Kurt Taretto, «Celdas Solares. Teoría, ensayo y diseño», 2015
- [23] Ian Marius Peters, Sarah Sofia, Jonathan Mailoa, Tonio Buonassisi, «Tandem Solar Cell Cost Relations», 2016
- [24] Coniveer G., «Third-generation photovoltaics», 2007
- [25] Gavin Conibeer, Martin Green, et al., «Silicon nanostructures for third generation photovoltaic solar cells», 2011
- [26] Silvaco, Inc., «DeckBuild User's Manual», 2015
- [27] Silvaco, Inc., «Atlas User's Manual», 2015
- [28] Silvaco, Inc., «Atlas User's Manual (Device Simulation Software)», 2015
- [29] Silvaco, Inc., «TonyPlot User's Manual», 2016
- [30] Silvaco, Inc., «DevEdit User's Manual», 2013
- [31] Siegfried Selberherr, «Analysis and Simulation of Semiconductor Devices», 1984