



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

INSTITUTO DE INGENIERÍA

MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS E INGENIERÍA

***"Estudio Teórico del Enfriamiento Óptico de
Fotodetectores de Unión np de Silicio con
Película Delgada de Ge en la Zona
de Depleción"***

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS

PRESENTA:

MIGUEL ÁNGEL MARTÍN CABAÑAS

DIRECTOR DE TESIS

DR. CARLOS VILLA ANGULO

MEXICALI B.C.

JUNIO 2019

DEDICATORIA

Dedico este trabajo doctoral a mi esposa Iris Rodriguez Uriarte, mi inspiración.

A mis hijos, Ozkar, Regina y Sofia, mi más importante tesoro.

Y en forma muy especial a mi amada madre doña Flor, mariposa que voló, pero que invadió con su espíritu mi corazón y seguirá siendo parte de mi para la eternidad.

AGRADECIMIENTOS

Mi agradecimiento a la Universidad Autónoma de Baja California por la oportunidad que me dio para poder continuar en este proceso de formación profesional y académico.... que nunca termina.

Agradezco al Dr. Carlos Villa Angulo darme la oportunidad de estudiar y por todo el soporte académico incondicional que me brindó durante todo este tiempo, mi reconocimiento a su intelectualidad, liderazgo, promoción del sentido lector y por su amistad forjada en estos cuatro años.... más los venideros.

Agradezco el apoyo del Conacyt para la realización del doctorado.

Y principalmente, agradezco a mi esposa Iris Rodríguez Uriarte, por su paciencia, apoyo incondicional, fuerza vital e inspiración, ella es un ejemplo de superación constante y esfuerzo diario...gracias a ti Iris, porque soy parte de tu equipo de vida, esencial para llevar una vida plena, y por darle dirección al barco que me hizo llevar buen puerto este doctorado.

ACRÓNIMOS Y ABREVIATURAS

CU	Celda Unitaria
ITO	Indium Tin Oxide
E_g	Banda Prohibida de energía
BC	Banda de conducción
BV	Banda de valencia
η	Eficiencia eléctrica
FF	Factor de llenado
J_{sc}	Densidad de corriente a corto circuito
V_{oc}	Voltaje de corto circuito
V_{max}	Voltaje máximo
I_{max}	Corriente máxima
W	Potencia
P_{max}	Potencia máxima
P_L	Fotoluminiscencia
KMS	Kubo-Martin-Schwinger
α	Coeficiente de absorción
ΔT	Diferencial de temperatura
T_s	Temperatura exterior al medio
T_r	Temperatura ambiente
λ	Longitud de onda
h	Constante de Planck
μ	Movilidad electrónica en el semiconductor
ρ	Resistividad del medio
q	Carga eléctrica
V_{pb}	Voltaje de Potencia en la union
G_L	Tasa de exitones
E	Campo Eléctrico

Q	Disipación del campo eléctrico
k	Momento del electrón
P	Momento del fotón
m_0	masa constante
m_n	masa del electrón
m_p	masa del hueco
P_{net}	Potencia neta
P_{ie}	Potencia de emisión
P_{abs}	Potencia de absorción
C	Velocidad de la luz
$\text{\AA}$	Angstroms
m	metro
cm	centímetro
mm	milímetro
μm	micrómetro
nm	nanómetro

RESUMEN

Las características de desempeño de los fotodetectores están siendo rebasadas por las necesidades reales de la industria en términos de su aplicación y fabricación. Características como eficiencia y potencia son claves para la competencia en el mercado, así como también para el desarrollo de nuevas aplicaciones empresa. Esta tesis propone conocer la estructura básica de un fotodetector o celda unitaria del tipo unión Si-np (Silicio np) y sus características eléctricas y ópticas, esto con el fin de obtener resultados de su desempeño en el espectro de la luz solar. Así mismo, se presenta una opción de mejora en sus características con la inclusión de un pozo cuántico de Ge (Germanio) de 5 nm de espesor que es colocado en el medio de la región de agotamiento de la capa activa de la unión. Por sus características de confinamiento de cargas, el pozo aporta electrones a la corriente de difusión que contribuyen al incremento de la densidad de corriente final de la celda, incrementando la eficiencia de conversión electrónica en aproximadamente 80%.

Por otro lado, está documentado que la inserción de pozos cuánticos finitos en sólidos contribuye al proceso de enfriamiento óptico, promoviendo la disipación de calor a través de la generación de frecuencias anti-stoke por procesos de inversión de población y desprendimiento de energía a través de emisión fotónica. Por esta razón, se estudió la interacción del pozo con el sistema a fin de verificar la generación de fotoluminiscencia y así calcular el valor de la diferencial de calor. Para ello, se calculó el coeficiente de absorción del pozo y se determinó la potencia neta de emisión utilizando las ecuaciones de no equilibrio de van Roosbroeck-Shockley en donde se pudo conocer el pico máximo de emisión y su respuesta a diferentes longitudes de onda en donde el Ge tiene características de emisión deseables para el sistema. De esta forma, se determinó la fotoluminiscencia del sistema integral N-Si/p-Si/Ge/p-Si. Posteriormente se realizó el Cálculo de la potencia neta de emisión en el rango de longitudes de onda establecido para poderla comparar con la potencia neta de absorción, obteniendo valores negativos en la potencia neta que reflejan un enfriamiento real de aproximadamente de

30 °K en su pico máximo de emisión. En esta tesis solo se realizar un estudio teórico utilizando las técnicas de análisis existentes con el fin de conocer las posibles respuestas del sistema propuesto en términos de su desempeño eléctrico con o sin pozo cuántico y su capacidad de generar enfriamiento óptico, no se realiza ninguna aplicación experimental.

En el capítulo uno se propone una introducción general de la tesis, en donde se presentan los mecanismos generales de conducción y procesos de conductividad que justifican el sistema óptico propuesto, describiendo las bandas de conducción, conceptos de transiciones electrónicas, definición de bandas prohibidas, entre otros. Así también se muestran algunos resultados obtenidos experimentalmente respecto a la degradación de la eficiencia electrónica en celdas solares respecto al incremento de la temperatura interna lo cual es el concepto principal de la tesis propuesta.

El capítulo dos presentan en detalle las técnicas de análisis matemáticos y los conceptos que fueron utilizados para el análisis del diseño de las celdas sin pozo y con pozo. Se incluyen, las características corriente-voltaje (I-V) en diodos de unión en estado de equilibrio y su modificación cuando son estas uniones son estimuladas ópticamente, el análisis multicapa en la técnica de la matriz de transferencia óptica de primer grado y la deducción de los coeficientes de Fresnel, la deducción de las ecuaciones para obtener los niveles discretos de energía en los pozos cuánticos a través de las intersecciones entre los eigenvalores pares e impares y las gráficas de circunferencia energética dependientes del espesor del pozo. Así también se muestra el Cálculo del dopaje de cada una de las capas de la unión y las técnicas y ecuaciones que se utilizaron para obtenerlo, en donde la capa n se reportó con un dopaje de $n = 8.3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ y la capa p se encuentra dopada con $p = 7.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

En el capítulo tres se propone el diseño de la celda unitaria N-Si/p-Si. Se explican las capas componentes, se calculan las dimensiones de la zona de depleción en función los dopajes, se obtienen sus características eléctricas de unión np en estado de equilibrio térmico (sin excitación óptica) y en estado de excitación por incidencia óptica, se proponen las dimensiones físicas finales a partir de los criterios de dimensión comercial y de factibilidad en la fabricación. Con esto, se realiza su análisis multicapa cuando el sólido es impactado por el campo óptico, calculando el campo eléctrico, la disipación del

campo y la generación de excitones GL en el sólido. Finalmente, se concluye con la evaluación de su desempeño, obteniendo sus parámetros eléctricos como fuente de energía eléctrica, tales como eficiencia, voltaje máximo, corriente máxima y factor de llenado.

En el capítulo cuatro se realiza el mismo estudio que en el capítulo tres, sin embargo, ahora se incluye el pozo cuántico de Ge en la zona de depleción de la capa activa. El diseño de la celda unitaria ahora queda como N-Si/p-Si/Ge/p-Si. Los Cálculos en esta sección incluyen la obtención de los niveles discretos de energía del pozo en función del ancho, el Cálculo de la banda prohibida efectiva incluyendo los primeros niveles energéticos del pozo y su análisis multicapa para el campo eléctrico, la disipación del campo eléctrico y la generación de excitones GL en el sólido como consecuencia de la inclusión del pozo. Finalmente se concluye con la caracterización paramétrica de la celda.

En el capítulo cinco se presenta el estudio sobre el enfriamiento óptico del sistema propuesto en donde se explican las ecuaciones utilizadas para el CÁLCULO de la potencia neta de emisión, el perfil de absorción fotónica, la fotoluminiscencia espectral y el diferencial de temperatura teórico que se genera en el sistema a partir del impacto del campo óptico en él.

Finalmente se incluye una sección de conclusiones y trabajo futuro junto con los anexos complementarios.

ABSTRACT

Photodetectors performance is being exceeded by the real needs of the industry in terms of their performance and fabrication capabilities. Characteristics such as efficiency and power are key for competition in the market, as well as for the development of new business applications. This thesis proposes to know the basic structure of a photodetector or unit cell of the unión type Si-np (Silicon np) and its electrical and optical properties in order to get results of its performance in the spectrum of sunlight. Likewise, an option of improvement in its characteristics related to efficiency improvement is presented with the inclusion of a quantum well of Ge (Germanium) of 5 nm of thickness, located in the middle of the depletion region of the active layer of the unión. Due to its characteristics of charge confinement, the quantum well electrons contribute to improve the diffusion current increasing the final current density capability of the solar cell, improving the electronic conversion efficiency by approximately 80%.

In the other hand, it is documented that the insertion of finite quantum wells in solids contributes to the optical cooling process, promoting the dissipation of heat through the generation of anti-stoke frequencies by processes of population inversion and energy release through photonic emission. For this reason, the interaction of the quantum well (QW) with the proposed system was studied in order to confirm the generation of photoluminescence (PL) and thus calculate the value of the heat gradient (ΔT). To do this, the QW absorption coefficient was calculated and the net emission power was determined using the van Roosbroeck-Shockley non-equilibrium equations where the maximum emission peak and its response to different wavelengths could be known where Germanium (Ge) has desirable emission characteristics for the system. In this way, the photoluminescence of the integral N-Si / p-Si / Ge / p-Si system could be determined. Subsequently, the net emission power was calculated in the range of wavelengths established and it was compared with the net power of absorption, obtaining positive and negative values, which indicates (negative values) a real optical cooling of approximately 30 °K at its peak maximum emission. In this thesis, only a theoretical study is made using the existing analysis techniques in order to know the possible system responses related

to optical cooling generation in a simple np-Si union including a single QW of Ge, no experimental application was made.

In chapter one a general introduction of the thesis is presented, where the general conduction mechanisms and conductivity processes that justify the proposed optical system are mentioned, describing concepts such as the conduction bands, electronic transitions process, Band gap, and others. At the same time, some experimental results regarding the degradation of electronic efficiency in solar cells with respect to the increase in internal temperature are also shown, which is the main topic of the proposed thesis.

Chapter two (theoretical reference) presents in detail techniques of mathematical analysis and the concepts that were used on the design of the solar cell proposed without QW. Characteristics such as, current-voltage response curve (IV) in unión diodes in state of equilibrium and their modification when these unions are optically stimulated are analyzed, the multilayer analysis in the technique of the first-degree optical transfer matrix and the deduction of the Fresnel coefficients, the deduction of the equations to obtain the discrete energy levels in the quantum wells through the intersections between the even and odd eigenvalues and the energy circumference graphs dependent on the well thickness. This also shows the calculation of the doping of each of the layers of the unión and the techniques and equations that were used to obtain it, where the layer n was reported with a doping of $n = 8.3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ and layer p is doped with $p = 7.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

In chapter three the design of the unit cell N-Si / p-Si is proposed. The component layers are explained, the dimensions of the depletion zone are calculated as a function of the doping, electrical characteristics of unión np are obtained in a state of thermal equilibrium (without optical excitation) and in the excited state by optical incidence as well, the final physical dimensions based on criteria of commercial material capabilities and feasibility in manufacturing. Thus, the multilayer analysis is performed when the solid is impacted by the optical field, calculating the electric field generated, the dissipation of the field and the generation of GL excitons in the solid. Finally, it concludes with the evaluation of its performance, obtaining its electrical parameters as a source of electrical energy, such an electrical efficiency (η), maximum power (P_{max}), maximum voltage (V_{max}), maximum current (I_{max}) and fill factor (FF).

In chapter four, the similar study was made as in chapter three, however, now Ge quantum well is included in the depletion zone of the active layer. The design of the unitary solar cell now is confirmed by the N-Si/p-Si/Ge/p-Si levels. Calculations in this section include the discrete energy levels in the QW as a function of the width, effective band gap including the first energy levels of the QW and its multilayer analysis for the electric field, the dissipation of the electric field and the generation of excitons (GL) in the solid as a consequence of the inclusion of the well. Finally, it concludes with the parametric characterization of the cell.

In chapter five, the study on the optical cooling of the proposed system (np-Si union+QW) is presented, equations used to calculate the net emission power, the photonic absorption profile, the spectral photoluminescence and the theoretical temperature differential generated in the system from the impact of the optical field on it are explained.

Finally, chapter six include a section of conclusions and future work is included along with the complementary annexes.

CONTENIDO

I. DEDICATORIA	2
II. AGRADECIMIENTOS	3
III. ACRÓNIMOS Y ABREVIATURAS.....	4
III. RESUMEN	6
IV. ABSTRACT	9
CAPITULO 1	
INTRODUCCION	16
1.1JUSTIFICACION	16
CAPITULO 2	
MARCO TEORICO	23
2.1 OBJETIVO GENERAL	23
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	23
2.3 CARACTERÍSTICAS ELEMENTALES DE LA UNIÓN NP.....	25
2.3.1 Unión np y banda prohibida Eg (Band Gap)	25
2.3.2 Campo óptico y energía fotónica.....	28
2.3.3 El diodo de Silicio (Si) y la foto generación en la unión	29
2.4 CRITERIO DE SELECCIÓN DE MATERIALES VENTANA Y MATERIAL ABSORBEDOR....	33
2.4.1 Criterio de la transmitancia del material	34
2.4.2 Criterio de la banda prohibida menor	36
2.5 CARACTERÍSTICAS FÍSICAS DE LA UNIÓN	37
2.6 GENERACIÓN DE EXITONES Y MÉTODO DE TRANSFERENCIA ÓPTICA EN SÓLIDOS .39	
2.6.1 Cálculo y análisis de la propagación del campo eléctrico con el uso de la matriz de transferencia óptica	40
2.6.1.1 Definición de los campos, índices de refracción complejos y coeficientes de reflexión y transmisión	42
2.6.1.2 Cálculo de la matriz de Interface	44
2.6.1.2.1 Impacto del campo de izquierda a derecha.....	44

2.6.1.2.2 Impacto del campo de derecha a izquierda.....	46
2.6.1.2.3 Cálculo de los coeficientes de la matriz de propagación	50
2.6.2 Análisis de la propagación del campo óptico en estructuras multicapa	53
2.6.2.1 Análisis en capas anteriores a la capa activa M_j	55
2.6.2.2 Análisis en capas posteriores a la capa activa M_j	56
2.6.2.3 Análisis en la capa activa M_j	57
2.6.3 Disipación del campo eléctrico en el medio.....	59
2.6.3.1 Vector Poynting y disipación del campo eléctrico.....	60
2.6.4 Generación de excitones G_L	63
2.7 CÁLCULO DE LOS NIVELES ENERGÉTICOS DEL POZO CUÁNTICO	64
2.7.1 Solución de la ecuación de Schrödinger para el pozo cuántico con barreras finitas	64
2.7.1.1 Solución en las regiones de potencial.....	65
2.7.1.2 Solución en las interfaces.....	67
2.7.2 Cálculo de los niveles energéticos por método grafico con $m_b=m_w$	71
2.7.3 Cálculo de los niveles energéticos por método grafico con $m_b \neq m_w$	71
2.8 INTERACCIÓN DE LA LUZ EN SEMICONDUCTORES	72
2.8.1 Semiconductores con incidencia de luz.....	75
2.8.2 Semiconductores con equilibrio térmico	77
2.8.3 Cálculo del coeficiente de absorción del pozo cuántico.....	77
2.8.3.1 Selección estricta de momento k	77
2.8.3.2 Sin Selección de momento k	79
2.8.3.3 Selección parcial de momento k	81

CAPITULO 3 DESERROLLO DE INVESTIGACION

3 PROPUESTA DE SISTEMA DE CELDA SOLAR SIN POZO CUANTICO	84
3.1 DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA PROPUESTO	84
3.2 PREPARACIÓN DE LOS MATERIALES	84
3.2.1 Cálculo del dopaje de los materiales np de la unión.....	84
3.2.2 Definición de la capa activa y capa ventana.....	85

3.3 DISEÑO DE LAS CARACTERÍSTICAS ELÉCTRICAS	87
3.3.1 <i>Discontinuidades en las bandas de conducción y de valencia</i>	87
3.3.2 <i>Dimensionamiento de la unión np</i>	88
3.4 DISEÑO DE LAS CARACTERÍSTICAS ÓPTICAS Y DE GENERACIÓN DE ENERGÍA.....	91
3.4.1 <i>Análisis del campo eléctrico (E) dentro del material</i>	91
3.4.2 <i>Disipación del campo eléctrico (Q) (Vector Poynting)</i>	93
3.4.3 <i>Generación de excitones (G_L)</i>	94
3.5 BALANCE DE CARGAS Y VOLTAJE DE POISSON CON ESTIMULACIÓN ÓPTICA.....	95
3.6 DESEMPEÑO DE LA CELDA UNITARIA PROPUESTA.....	97
3.6.1 <i>Parámetros eléctricos de desempeño</i>	97
3.6.2 <i>Dimensionamiento final</i>	100
3.6.2.1 <i>Cálculo del ancho W y Largo L de la celda unitaria</i>	100
CAPITULO 4 DESARROLLO DE INVESTIGACION	
4 PROPUESTA DE SISTEMA DE CELDA SOLAR CON INCLUSION DE POZO CUANTICO	105
4.1 DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA PROPUESTO	105
4.2 CÁLCULO DE LOS NIVELES ENERGÉTICOS DEL POZO DEPENDIENTES DEL ANCHO	106
4.3 CÁLCULO DE LOS NIVELES CUASI-FERMI	109
4.4 CÁLCULO DE LAS CONCENTRACIONES DE CARGAS $N(x)$, $P(x)$ Y n_i^2	110
4.5 POTENCIAL ELECTROSTÁTICO DE POISSON V_0 , V_{BP} Y DIMENSIONES DE LA ZONA DE DEPLECIÓN	111
4.6 SELECCIÓN DEL ANCHO DEL POZO CUÁNTICO DE GERMANIO (Ge).....	113
4.7 DEFINICIÓN Y CÁLCULO DEL COEFICIENTE DE ABSORCIÓN DEL POZO	114
4.8 GENERACIÓN DE EXITONES GL_{QW} DEL POZO CUÁNTICO DE P-Si/Ge/P-Si	117
4.8.1 Campo eléctrico E	118
4.8.2 Disipación del campo eléctrico Q	119
4.8.3 Generación de excitones del pozo GL_{QW}	119
4.9 APORTACIONES ENERGÉTICAS TOTALES.....	120
4.9.1 Valores totales de GL (unión+QW).....	120
4.9.2 Valores totales de densidad de portadores (unión+QW)	121

4.10 CARACTERIZACIÓN DEL DESEMPEÑO DEL SISTEMA CON POZO	122
4.11 DIMENSIONAMIENTO FINAL	125
4.11.1 Cálculo del ancho W y del largo L de la celda unitaria (CU)	125
CAPITULO 5 DESARROLLO DE INVESTIGACION	
5 ENFRIAMIENTO OPTICO DEL LA ESTRUCTURA	129
5.1 INTRODUCCIÓN AL ENFRIAMIENTO ÓPTICO	129
5.2 ANÁLISIS Y CÁLCULOS.....	131
5.2.1 Fotoluminiscencia espectral (PL)	131
5.2.1 Potencia neta (Pnet)	134
5.2.1 Diferencial de temperatura (ΔT)	135
CAPITULO 6	
CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO	137
REFERENCIAS	140
ANEXOS	142
ANEXO A.1	
ÍNDICES DE REFRACCIÓN COMPLEJO (n, k) DEL SILICIO DOPADO TIPO N Y TIPO P	142
ANEXO A.2	
CÁLCULO DE CARGAS $N(x)$ Y $P(x)$ Y VOLTAJE DE POISSON EN LA UNIÓN ESTIMULADA ÓPTICAMENTE	143
ANEXO A.3	
TABLA DE VALORES OBTENIDOS POR SOLUCIÓN AUTO CONSISTENTE DE LAS ECUACIONES DE CONTINUIDAD Y DE POISSON.....	145
ANEXO A.4	
TRANSICIONES DE CARGAS (SELECCIÓN DE MOMENTO).....	146
ANEXO A.5	
LONGITUD DE ONDA DE DE BROGLIE.....	150

Capítulo 1 Introducción

1.1 Justificación

La industria de la fabricación de celdas solares continua en gran desarrollo, buscando siempre encontrar las mejores condiciones de desempeño de los dispositivos que fabrica y que finalmente van a producir un bienestar en el cliente final. La eficiencia en el proceso de conversión fotoeléctrica juega un papel muy importante como base de las características de dichos dispositivos. Del nivel de eficiencia que hay en los actuales sensores ópticos y las de las nuevas generaciones de ellos, va a depender la supervivencia de las empresas fabricantes, que tendrán la tarea de generar valor agregado a sus dispositivos y al mismo tiempo competir con muchas empresas del giro.

Hablando de eficiencia en celdas solares, el concepto principal gira en torno a la posibilidad de convertir la energía fotónica que llega de la radiación solar a energía eléctrica útil, esto a través de la colección del espectro por medio de semiconductores sensibles a él. Una eficiencia de 100%, significa que, por cada fotón ingresado a la celda solar, se genera un electrón útil que podrá ser utilizado en la carga, sin embargo, esto en la realidad no puede ser posible por muchos factores que se involucran en el proceso, tales como, reflexión de campo, baja absorción de la capa activa, incrementos en la temperatura de la unión, entre otros.

Así también, desacuerdo al teorema del límite Shockley–Quesera ^[1], la mayor eficiencia que podría tenerse en un sistema de celda solar de Si (el cual es el más utilizado comercialmente por su costo y su disponibilidad en el mercado) es de alrededor de 33.7 %, asumiendo una unión para np con band gap de 1.34 eV utilizando el espectro solar AM 1.5 G. Esto se puede apreciar en la figura 1.1. De esta forma, de la energía solar incidente (típicamente, 1000 W/m²), solo 33,7% se podría convertir en densidad de potencia (337 W/m²).

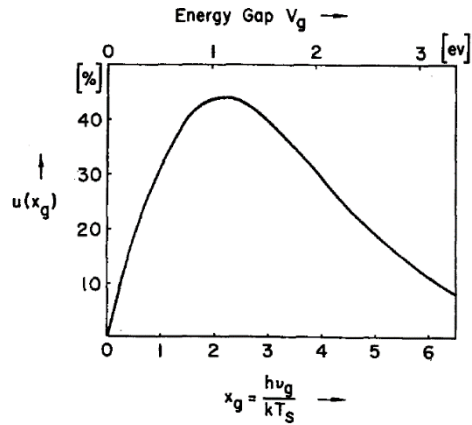


Figura 1.1: Eficiencia máxima en celdas de Si de acuerdo con el teorema del límite Shockley–Quesera

Hoy, la eficiencia promedio de los paneles solares fluctúan de acuerdo con el tipo de semiconductor y sus características, siendo en promedio, una eficiencia de 18-21% en paneles terminados y listos para entrega al cliente final [2].

Tecnologías modernas de silicio monocristalino han llegado a alcanzar eficiencias del 22%, separadas de este máximo sólo por consideraciones prácticas como radiación reflejada en la superficie y sombras debidas a las conexiones de la unión.

En el ámbito de celdas de laboratorio, laboratorios como Fraunhofer están reportando eficiencias de hasta 42% [2] utilizando técnicas Tándem con diferentes estructuras y combinaciones de materiales, sin embargo, el costo de fabricación de este tipo de celdas es muy elevado, por lo que el desarrollo comercial no ha sido todavía extendido a las líneas de producción de los fabricantes de celdas y paneles solares.

Otro tipo de celdas que está ganando terreno en términos de desarrollo es el tipo de celdas orgánicas. En términos de eficiencia, las celdas orgánicas están reportando hoy en día eficiencias del orden de 8-10%, lo relevante de este dato es que estas celdas comenzaron a desarrollarse a principios del año 2000, partiendo de una eficiencia de 2-3% [2]. Considerando que las celdas de Si han tenido un desarrollo desde mediados de los años 70s, la velocidad con la que las celdas orgánicas han alcanzado sus actuales niveles de eficiencia es muy considerable.

Debido a estas variantes, los diseñadores de celdas de Si están enfocados en mejorar la eficiencia electrónica, controlando los sistemas de unión np, haciendo experimentación dopajes, estudiando las propiedades del band gap y los coeficientes de absorción de los diferentes materiales, controlando los factores que alteran la temperatura del sensor y utilizando las capacidades eléctricas de los semiconductores, sin embargo, la mejora ha sido lenta y en algunos casos el control de las variables externas dificulta el crecimiento en la eficiencia de este tipo de tecnologías, siendo importante entonces estudiar las diferentes áreas de oportunidad para ayudar a dicha mejora.

Si bien es cierto que cada día es mayor el uso de los dispositivos fotovoltaicos en proyectos de mejora en el impacto ambiental, estos dispositivos se han visto limitados a tener bajos niveles de eficiencia para sistemas que utilizan semiconductores basados en Si.

Uno de los principales factores que limitan o disminuyen la eficiencia de las uniones fotovoltaicas es la temperatura dentro del sistema semiconductor. Está probado teóricamente y experimentalmente que la eficiencia de la celda tiende a decaer conforme el gradiente de temperatura del sólido y su entorno se incrementa. Algunos autores reportan resultados experimentales de la respuesta en eficiencia de algunos semiconductores como Si y Ge cuando existe una variación en los niveles de los gradientes de temperatura, haciendo que esta se vea afectada por el incremento en cada grado diferencial de temperatura. Ravindra [\[3\]](#) obtiene información de sus experimentos, mostrando los niveles de decaimiento de las eficiencias para diferentes materiales como lo muestra en la figura 1.2.

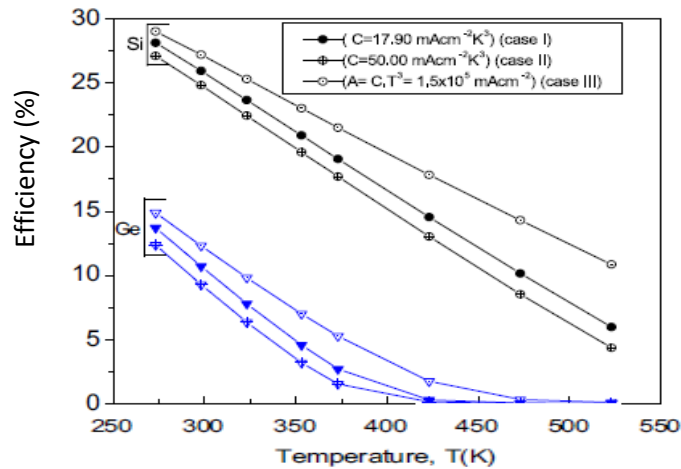


Figura 1.2: Curvas de reducción de eficiencia respecto al los incrementos de temperatura

Por esta razón, el control de los cambios en la temperatura en el proceso de foto generación eléctrica se vuelve una parte fundamental en el desarrollo de celdas con mejores eficiencias. Abriendo una amplia gama de posibilidades de estudio para mejorar los procesos térmicos y sus afectaciones en las uniones np y en otros tipos de celdas solares.

Una de las técnicas experimentales que están siendo desarrolladas actualmente para el control y mejoramiento de este proceso termino en semiconductores es el llamado “enfriamiento óptico” o LC por sus siglas en Ingles. El enfriamiento óptico fue propuesto inicialmente por el científico Peter Pringsheim en año 1929, en donde sugiere que los sólidos podrían enfriarse a través del proceso de generación de frecuencias anti-stoke en los cuales una sustancia absorbe fotones y entonces esta sustancia emiten otros con mayor energía. [4]

La figura 1.3, se muestra la forma teórica en la cual el enfriamiento óptico presenta en el intercambio de niveles energéticos en las bandas de valencia y la banda de conducción.

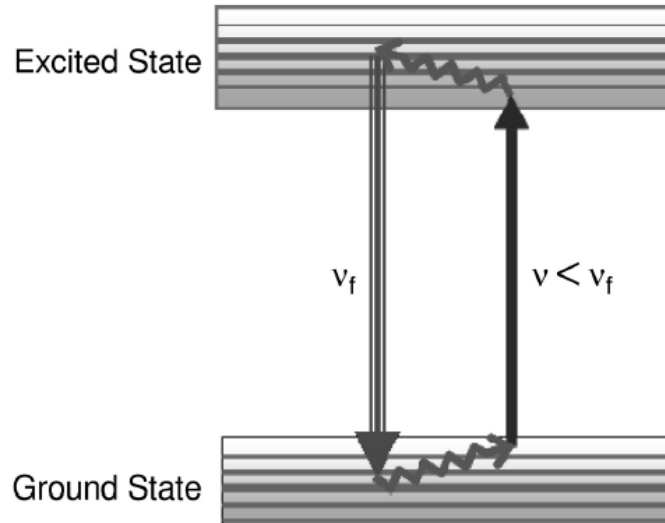


Figura 1.3: Proceso de generación de energía por intercambio de banda en el cual está basado el proceso de enfriamiento óptico.

Un átomo con dos niveles separados que están inmersos en un sólido transparente. La fuente de luz de frecuencia $h\nu$ induce energía en átomos cercanos a la parte más alta de la banda de valencia, llamada “ground state”, y los mueve a la banda de conducción o banda “de energía excitada”. Entonces se presenta un evento de termalización por vibraciones internas en donde el átomo gana energía, provocando un evento de decaimiento radiactivo, emitiendo fotones con mayor energía $h\nu_f > h\nu$.

Este fenómeno puede actuar como un disipador de calor a través de fotoestimulación del sólido. Como consecuencia de ello, se espera minimizar el impacto de los cambios en la temperatura sobre la eficiencia de las celdas solares.

Al confirmar el evento de emisión por intercambio de niveles de energía en las bandas, se analiza el impacto en la temperatura a través del estudio del el gradiente de temperatura que afecta la eficiencia en la celda. Para ello, se propone un sistema semiconductor que pueda probar que un sólido puede generar enfriamiento óptico utilizando sus características en unión np y la inclusión de un pozo cuántico de Ge. Se trabajará para comprender y predecir su comportamiento y las características de respuesta en términos de la absorción de los campos ópticos de la luz incidente y la

generación de excitones en el sólido, así como también la fotoluminiscencia asociada al balance de energía y su enfriamiento por cambio de energía en bandas.

En este estudio, propone la formación de una celda básica de silicio (Si) tipo *np* dopada a niveles bajos, la cual se va a caracterizar eléctrica y ópticamente, para después incluir un pozo cuántico que mejore la eficiencia eléctrica y a su vez pueda ayudar a la generación de frecuencias anti-stoke para el enfriamiento óptico. El esquema propuesto se muestra en la figura 1.4.

Este pozo cuántico nanométrico tendrá las propiedades adecuadas para probar que genera los niveles de energía para ganar electrones por efectos de confinamiento de cargas y al mismo tiempo promueve el proceso de inversión de población espontánea y no espontánea que ayuda disipar energía a través de la emisión de luz en longitudes de onda distintas.



Figura 1.4: Celda de Si con pozo cuántico de Ge, la intención es promover la generación de enfriamiento óptico en la zona de depleción de la unión.

El presente trabajo no contempla la implementación de este enfriamiento en términos prácticos debido a las limitaciones de la fabricación de la muestra final, sin embargo, se podrá continuar en una segunda fase la implementación práctica en estudios posteriores.

El material más utilizado en la fabricación comercial de celdas solares, desde sus inicios y en la actualidad es el Silicio policristalino dopado. El silicio es un semiconductor que se encuentra con una relativa abundancia en la tierra y que por sus características eléctricas y físicas ha sido muy utilizado no solo en las celdas solares, sino principalmente en el desarrollo de circuitos integrados para procesadores, microcircuitos de potencias medianas y sistemas electrónicos en general. Los circuitos de Si tienen muchas características que los hacen ideales para la fabricación de semiconductores en general, tales como bajo nivel de banda prohibida, su respuesta a la frecuencia y su capacidad en términos de velocidad de cambio de estado. Las empresas buscando siempre la mejora en los procesos de manufactura, están volteando hacia los centros de investigación en los cuales pueda haber técnicas que mejoren las características de desempeño de ellas a fin de tener una mejora competitiva relativa al producto final.

El estudio de la mejora en la eficiencia que presenta esta tesis tiene en su haber la idea de proponer una solución parcial para el mejoramiento de la eficiencia de los semiconductores de Silicio que son utilizados para la fabricación de celdas solares en uniones sencillas con material policristalino, incluyendo alternativas de construcción como la inclusión de pozos cuánticos para mejorar el control térmico en ellos.

En términos de volumen de producción y desempeño final de las celdas, las empresas podrán optar por incluir en sus diseños alternativas de control térmico que sean bajas en costo y que no requieran cambios mayores en sus líneas de producción, por lo que es ideal trabajar con Silicio, el cual, como ya se mencionó, suele ser el más utilizado en fabricación de celdas a gran escala.

Capítulo 2 Marco teórico

2.1 Objetivo general

El objetivo general de este trabajo es proponer un sistema semiconductor de unión np de Si policristalino sensible al espectro solar AM1.5G (1000 W/m^2), con la inclusión de un pozo cuántico de Ge en la zona de depleción de la unión, esto con el fin de calcular la fotoluminiscencia generada por los efectos de enfriamiento óptico que se presentan por la generación de frecuencias “anti-stoke” en el sólido.

2.2 Objetivos específicos

Para alcanzar el éxito en el objetivo general, se proponen los siguientes objetivos específicos:

- a) Proponer un sistema adecuado de semiconductores np de Si que tenga las propiedades de fotosensibilidad y generación de energía eléctrica, esto sin la inclusión del pozo cuántico de Ge.
- b) Caracterizar sus propiedades físicas tales como: dimensiones de los componentes de la unión, anchos de la zona de depleción, dimensionamiento físico de los contactos óhmicos, así como también si dopaje y concentración de portadores mayoritarios.
- c) Calcular el campo eléctrico, la disipación del este campo en el sólido y la generación de excitones $G(x)$ de esta unión np en función de las longitudes de onda definidas, recibidas del espectro solar definido como 1.5 AM Global, con una irradiancia de 1000 W/m^2 .
- d) Calcular las concentraciones de carga $n(x)$ y $p(x)$ y las dimensiones de la zona de agotamiento en las capas activas del dispositivo a través del uso de la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de cargas mediante el algoritmo iterativo de Gummel.
- e) Definir los resultados paramétricos de desempeño de las celda solar propuesta en términos de sus características tales como V_{oc} (Voltaje a circuito abierto), J_{sc} (densidad de corriente en corto circuito), P_{max} (potencia máxima), I_{max} (corriente máxima), V_{max} (Voltaje máximo), FF (factor de llenado) y η (eficiencia).

- f) Realizar la inclusión del pozo cuántico de Ge en la zona de depleción de la unión np de la capa activa.
- g) Definir los niveles energéticos del pozo como función del ancho de la película nanométrica y seleccionar el ancho ideal.
- h) Calcular el coeficiente de absorción, ahora para un pozo cuántico de Ge utilizando la aproximación de $\alpha(\lambda)$ y parámetros de difusión electrónica y tiempos de recombinación.
- i) Calcular la aportación del pozo de Ge en términos de campo eléctrico, disipación de campo eléctrico y su generación de excitones, para posteriormente sumarla a la generada con la unión np sin pozo.
- j) Caracterizar paramétricamente el sistema propuesto ahora con la inclusión del pozo cuántico de Ge.
- k) Calcular el nivel de fotoluminiscencia utilizando la ecuación *KMS* (Kubo-Martin-Schwinger) con lo que se obtendrá un valor estimado de la foto generación por procesos de absorción fotónica de la celda.
- l) Comprobar la existencia de enfriamiento óptico por el Cálculo de la potencia neta del sistema (P_{net}) restando la potencia de absorción y la potencia de emisión.
- m) Calcular en diferencial térmico ΔT que presenta el sólido.

2.3 Características elementales en la unión

2.3.1 Unión np y banda prohibida E_g (Band Gap)

El dispositivo inicial propuesto es una celda unitaria llamada CU de unión np de Si policristalino. Esta unión trabaja como un sistema colector de irradiancia solar, la cual, es absorbida en el sólido en forma de paquetes de energía llamados fotones.

El modelo básico de una celda unitaria de unión np se muestra en la figura 2.1, en donde se aprecia un esquema de la unión de los dos semiconductores de Si, uno dopado n y otro dopado P junto con dos contactos óhmicos que servirán de interface eléctrica con la carga, el primero de ellos llamado ITO (Indium-Tin Oxide), es una capa transparente de óxido de estaño mezclado con Indio que permite el paso del campo óptico hacia la celda por ser transparente y tiene capacidad de ser conductora al mismo tiempo. La capa de aluminio funciona como contacto eléctrico para retorno de electrones, pero también contribuye a detener el paso del campo óptico de luz en el paso a través del sistema.



Figura 2.1: Propuesta de celda de unión np de Si y contactos óhmicos de ITO y Al

Los semiconductores tienen un nivel de banda prohibida o “band gap” (E_g) que los hacen muy utilizados como fotosensores o absorbedores de espectro de energía. El

principio de funcionamiento comienza con la idea de niveles de energía creados dentro de los enlaces atómicos internos del sólido. Los átomos contienen niveles de energía discretos en donde están localizados los electrones de valencia. Debido a cercanía entre estos átomos, los átomos se concentran en don bandas energéticas creadas por la acumulación de portadores, la banda de valencia y la banda de conducción. La distancia que separa la banda de baja energía (banda de valencia o ground state) y la banda excitada (Banda de conducción), es un umbral en donde no puede existir un lugar para que los electrones se estabilicen. Concebida como la *diferencia de energía* entre la parte superior de la banda de valencia y la parte inferior de la banda de conducción, la banda prohibida (E_g) y su dimensión definen las características de los materiales entre conductores, semiconductores o aislantes, facilitando la conducción en los materiales con banda prohibida mínima o cero, y creando aislantes cuando su dimensión es muy grande. La figura 2.2 muestra gráficamente la estructura de las bandas de valencia y de conducción y la separación entre ellas conocida como banda prohibida.

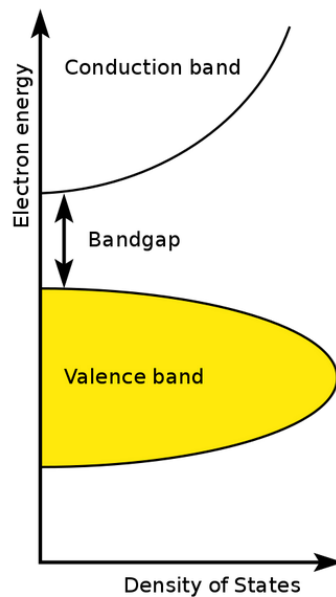


Figura 2.2: Bandas de conducción y de valencia separadas por la banda prohibida (band gap)

La banda prohibida tiene unidades de energía, comúnmente se utiliza el electrón-volt (eV). La tabla 2.1 muestra los niveles de energía de banda prohibida para algunos materiales.

Elemento	Símbolo	Banda prohibida (eV)
Silicio	Si	1.11
Germanio	Ge	0.66
Carburo de silicio	SiC	2.86
Fosfuro de aluminio	AlP	2.45
Arseniuro de aluminio	AlAs	2.16
Antimoniuro de aluminio	AlSb	1.6
Nitruro de aluminio	AlN	6.3
Diamante	C	5.5

Tabla 2.1: Banda prohibida de algunos materiales, incluido el Si y Ge como semiconductores.

Los materiales se pueden definir en tres tipos en base a su característica de banda prohibida, mientras más grande sea su E_g , los materiales tienen características de aislantes ya que se dificulta el que los electrones se muevan de la banda de valencia a la banda de conducción. Existen los materiales conductores, en los cuales, la banda prohibida tiende a ser cero y la conducción de electrones se facilita. Los semiconductores se encuentran entre los dos, con valores de entre 1 a 2.5 eV y que, para poder ser conductores de cargas, necesitan absorber energía, de otra forma se mantienen como aislantes. En la figura 2.3 se observa una descripción de los tipos de materiales en función del valor de su banda prohibida.

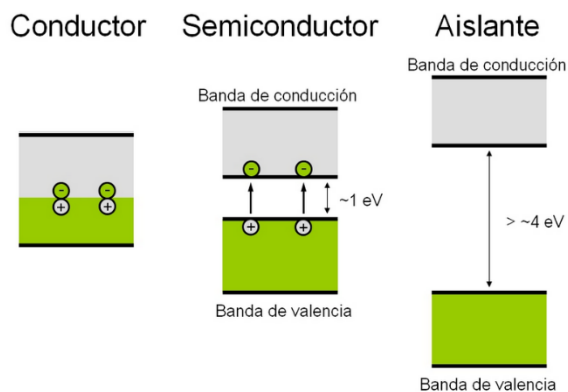


Figura 2.3: Clasificación de los materiales por su banda prohibida

2.3.2 Campo óptico y energía fotónica

El campo óptico que llega a la superficie terrestre está compuesto por campos electromagnéticos que contienen todas las longitudes de onda, desde el ultravioleta hasta el infrarrojo, pasando por el espectro de luz visible. Este campo contiene paquetes de energía llamados *fotones*, los cuales contienen un nivel de energía que depende de la longitud de onda a la cual están oscilando y de la constante de Planck. La ecuación que describe este nivel de energía de cada fotón es conocida como la ecuación de energía de Planck:

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.1)$$

Donde h es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz y λ es la longitud de onda del fotón.

Los niveles de energía del campo óptico de la luz visible están descritos en gráficas que muestran la energía que tienen los fotones que llegan y que tienen longitudes de onda que son visibles para el ojo humano y otras que no lo son. Estas energías visibles están clasificadas en tres espectros que se toman como referencia para el diseño de las celdas solares, el espectro solar AM0, el AM1.5 Directo y el AM1.5 Global. Cada uno de ellos está calculado para diferentes latitudes de incidencia en la tierra, debido a ello, los valores máximos de energía integral varia para cada uno de los espectros. El estándar AM0 tiene un nivel de energía total de 1300 W/m², este se mide en el exterior de la atmosfera terrestre, utilizado en aplicaciones espaciales principalmente. El estándar AM1.5 directo tiene un valor de energía integral de 900 W/m² y se mide en el ecuador después de cruzar la atmosfera, y el estándar AM1.5 Global tiene un nivel de energía de 1000 W/m² y se mide en regiones cercanas a los polos con ángulos 37° zenit y de azimut 47°. La figura 2.4 muestra la gráfica de irradiancia espectral para diferentes longitudes de onda y su distribución energética para los tres estándares mencionados.

Para que un material pueda conducir electrones hacia la carga, es necesario que los electrones que están ocupando la banda de valencia obtengan energía y que este valor de energía supere el valor que tiene la banda prohibida. Esto se puede hacer

inyectando un campo eléctrico como estimulación eléctrica o por incidencia de un campo óptico. El electrón al absorber la energía y superar la banda prohibida, se mueve de la banda de valencia hacia la banda de conducción donde tiene la posibilidad de ser transferido hacia la carga útil si es conectado a ella.

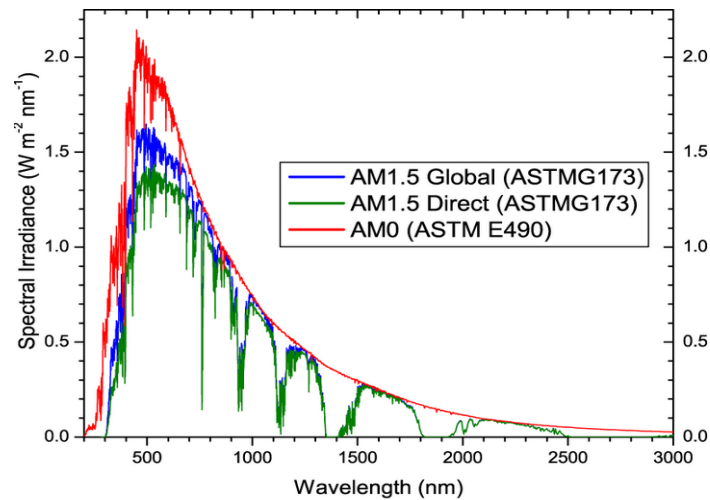


Figura 2.4: Estándares de irradiancia solar

2.3.3 El diodo de silicio (Si) y la foto-generación en la unión

En una celda solar, el impacto del campo óptico es la parte fundamental para el intercambio de energía con el sólido y así generar electrones. Sin embargo, las condiciones de los materiales que están en la unión deben tener características específicas que faciliten, por un lado, los estados de recepción del campo óptico y su absorción y por otro lado el movimiento de electrones entre la banda de valencia y la banda de conducción. La necesidad de la unión se basa en que todos los procesos de absorción fotónica se realizan a partir de la formación del campo eléctrico alrededor de la unión y la generación por iluminación del dispositivo en la zona de depleción de la capa absorbidora, esto estableciendo un potencial electrostático que responde a las ecuaciones de potencial de Poisson y a las ecuaciones de equilibrio y balance de cargas.

En una unión np no polarizada (iluminada), la curva característica de corriente esta expresada en términos de la corriente de saturación del dispositivo multiplicada por un

factor de decaimiento exponencial dependiente de la temperatura y de la diferencia de potencial, esta ecuación es llamada “Ecuación de Shockley” y tiene la forma:

$$I = I_0 \left(e^{(qV_0/kT)} - 1 \right) \quad (2.1)$$

Donde I_0 es la corriente que atraviesa el diodo, V_0 es el voltaje de polarización conocido también como voltaje “*built in voltage*”, k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura del medio.

La gráfica característica I-V se muestra en la figura 2.5. La corriente en la unión puede ser del tipo de deriva o de difusión, en donde la corriente de deriva es el flujo de carga momentáneo provocado por la recombinación de los portadores mayoritarios electrones y que a su vez generan un campo eléctrico en la barrera de potencial el cual arrastra los portadores minoritarios del lado n y los huecos del lado p.

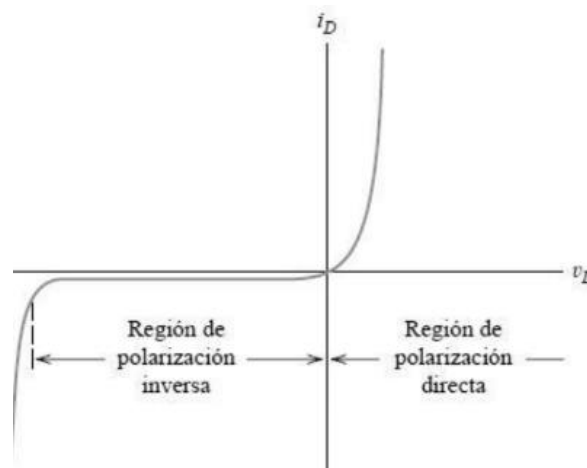


Figura 2.5: Curva característica I-V del diodo sin iluminación solar

Para una unión np iluminada o estimulada, la corriente de deriva se considera cero, por lo que entonces asumimos solamente la *corriente de difusión* alrededor de la unión, por lo tanto, podemos establecer ahora las condiciones de flujo de corriente cuando la unión se encuentra bajo los efectos de campo óptico a través de la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \Delta n_e(x)}{\partial t} = qDe \frac{d^2}{dx^2} \Delta n(x) - \frac{\Delta n(x)}{\tau_e} + G_L \quad (2.3)$$

El término de la derecha $\frac{\partial \Delta n_e(x)}{\partial t}$ nos dice que intercambio de cargas minoritarias respecto al tiempo (en este caso electrones) es igual a los cambios debidos a la corriente de difusión (la cual esta expresada en el primer término del lado derecho) menos las cargas que no generan par electrón -hueco más la corriente generada por la iluminación de la unión (tercer término a la derecha de la ecuación) GL.

Siendo esta una ecuación diferencial de segundo orden, al resolverla encontramos que las ecuaciones que solucionan la ecuación son de la forma:

$$f(x) = Ae^{x\sqrt{k}} + Be^{-x\sqrt{k}} + C \quad (2.4)$$

Donde:

$$k = \frac{1}{D_e \tau_e} \quad (2.5)$$

Aplicando las condiciones de frontera:

- a) Cuando la unión esta NO iluminada
- b) Cuando la unión esta iluminada

Calculamos las constantes A, B y C obteniendo:

$$A = 0, \quad B = n_e \left(e^{\left(\frac{qV_A}{kT} \right)} - 1 \right) - G_L \tau_e, \quad C = G_L \tau_e \quad (2.6)$$

Por lo tanto, la corriente de difusión de electrones en la unión np se obtiene al sustituir las constantes y factorizando, quedando:

$$\Delta n_e(x) = e^{(-x/L_e)} [n_e (e^{qV_A/kT} - 1) - G_L \tau_e] + G_L \tau_e \quad (2.7)$$

Y la *corriente de difusión de electrones en la unión* es obtenida al utilizar la ecuación (2.7) en la ecuación de difusión, así:

$$J_n = q \left(\frac{De}{Le} \right) \left[\eta_e \left(e^{\frac{qV_a}{kT}} - 1 \right) - G_L \tau_e \right] \quad (2.8)$$

De la misma forma calculamos la *corriente de difusión de huecos, obteniendo la ecuación:*

$$J_t = q \left(\frac{De\eta_i^2}{LeN_a} \right) \left[\eta_e \left(e^{\frac{qV_a}{kT}} - 1 \right) - qG_L\tau_e \right] \quad (2.9)$$

La suma total de estas dos corrientes forma la corriente total de difusión de huecos y electrones en la unión, incluyendo la corriente que se genera a partir de la iluminación del dispositivo.

El termino $q \left(\frac{De\eta_i^2}{LeN_a} \right)$ es la característica de corriente I_0 del diodo en función del dopaje y el termino $qG_L\tau_e$ la corriente debida a la absorción de fotones alrededor de la unión (Corriente de foto-generación).

Esta corriente total de difusión está calculada como densidad de corriente de difusión, es decir, aplica para una determinada área de sección transversal. Dividiendo J_t por el área de la sección transversal, obtendríamos la corriente puntual de difusión.

$$\frac{I_{pn}}{W * L} = \frac{qD_e n_i^2}{L_e N_a} [e^{qV_a/kT} - 1] - qL_e G_L \quad (2.10)$$

Multiplicando ambos miembros de la ecuación *por* $(W*L)$ *y agrupando* la ecuación se convierte en:

$$I_{pn} = I_{sat} [e^{Kv_d} - 1] - I_{ph} \quad (2.11)$$

Donde:

$$I_{sat} = \frac{qD_e n_i^2}{L_e N_a} (w \times L)$$

es la corriente de saturación del diodo (A)

$$K = \frac{q}{kT}$$

es el ruido térmico= 0.026 eV a $T=300^\circ K$

$$I_{ph} = qL_e G_L (wxL)$$

es la corriente fotogenerada en el diodo (A)

En la ecuación (2.1) podemos ver, que, si el diodo no es iluminado o expuesto al campo óptico, el termino Ph se hace cero y la ecuación se convierte en la respuesta en corriente del diodo para polarización directa o inversa dependiente de V_d . De la misma forma, la componente Ph se agregará siempre que el diodo sea estimulado ópticamente y así podrá contribuir a la corriente de difusión del diodo. Las características de esta ecuación I-V en forma gráfica están representadas en la figura 2.6, en donde podemos observar que sin iluminación, la gráfica en polarización inversa sigue el contorno del diodo simple descrito por la ecuación (2.1), sin embargo al ser iluminado, el diodo conduce en polarización invertida y en el sentido negativo de la corriente formando la gráfica de corriente de polarización inversa en el cuadrante tres , en donde la distancia de la ordenada (nivel cero de corriente) estará determinado por el grado de corriente fotogenerada en el diodo.

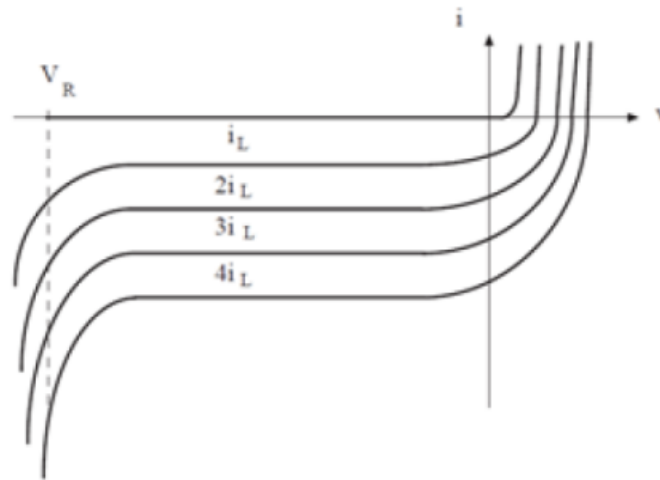


Figura 2.6: Curva característica I-V del diodo con iluminación solar y generación GL de fotocorriente

2.4 Criterio y selección del material ventana y material absorbedor

Como se observa en la ecuación (2.11), la corriente fotogenerada se incluye en la corriente total del diodo, generando así energía eléctrica o corriente de difusión a partir de la estimulación óptica. La GL o foto generación depende directamente de las

capacidades que tengan los materiales del sistema para absorber de los paquetes de energía del campo, y así transferirla a los electrones de la capa de valencia.

La necesidad de absorción es entonces una característica muy importante para el diseño de la celda y para poder definir cuál de los dos materiales de la unión es el que absorbe los fotones del campo, existen dos criterios que nos ayudan a decidir cual material deberá ser considerado como capa absorbidora.

2.4.1 Criterio de la transmitancia del material

La transmitancia de un material es la capacidad que tiene el sólido de recibir el impacto del campo óptico sin que este sea absorbido por él para las diferentes longitudes de onda de los fotones.

Existen gráficos en la literatura científica que contienen el perfil de transmitancia para los diferentes materiales más utilizados en las celdas solares, estos son de gran utilidad al ser analizados y para definir para que ancho de banda podemos nosotros ver que el material se va a comportar como una “ventana” ante el flujo del campo óptico, es decir, en que rango de longitudes de onda el campo se mantiene sin cambios al cruzar por el sólido y para que parte del espectro se absorbe en él. La figura 2.7 muestra un ejemplo de la gráfica de transmitancia del Al: ZnO [5] donde se aprecian las características de “ventana” de transmitancia para longitudes de onda mayores a los 350-370 nm y su transmitancia prácticamente nula para longitudes menores a 350 nm, en donde se asume que el material absorbe las longitudes inferiores a 350 nm, funcionando como capa activa.

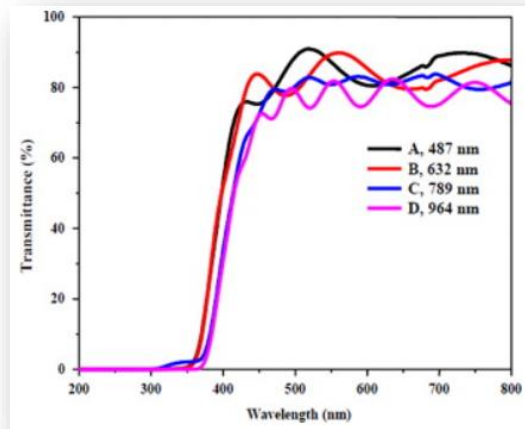


Figura 2.7: Graficas de transmitancia para películas de Al: ZnO con cuatro diferentes constantes de red

La figura 2.8, muestra las características de transmitancia del ojo humano en sus diferentes componentes oculares, como se observa, el ojo tiene la capacidad de transmitir hacia la retina (la cual recibe el impacto del campo óptico) longitudes de onda desde los 300 nm hasta 900 nm, en donde a partir de esta, existe una disminución de la transmitancia de hasta 60% en las capacidades físicas de la retina (Vitreous).

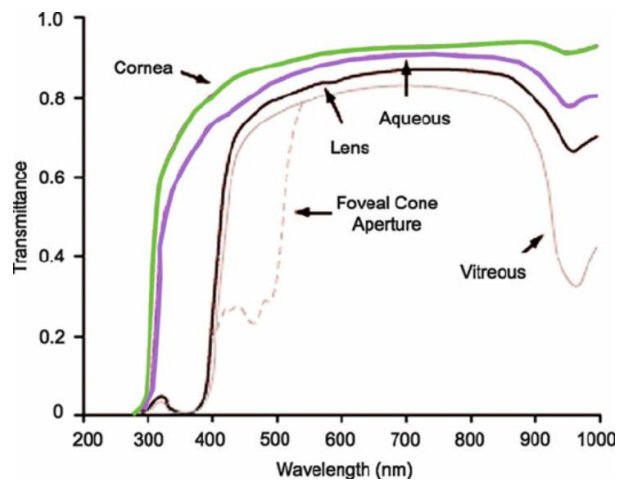


Figura 2.8: Graficas de transmitancia para los componentes del ojo humano

En los semiconductores tenemos propiedades similares de transmitancia las cuales nos permitirán, a partir del diseño, obtener sus características de alta o baja transmitancia y en que longitudes de onda las presentan de acuerdo con su perfil gráfico.

En el caso de la celda solar, se define primero el espectro de luz o campo óptico incidente sobre la unión, utilizando uno de los dos materiales como material ventana (con alta transmitancia en el espectro definido) y el otro como capa activa o absorbedor (con baja o nula transmitancia en el mismo espectro).

Así también hay que considerar algunos parámetros de los materiales que sirven como referencia para la selección de los componentes de la unión, tales como afinidad eléctrica y constantes de red, que servirán para minimizar problemas térmicos por vibraciones internas del sólido o variaciones en la resistencia eléctrica.

2.4.2 Criterio de la banda prohibida (E_g) menor

El segundo criterio para la determinación del material absorbedor es el que utiliza la banda prohibida como una forma de diferenciar al material que puede obtener más fácilmente el nivel energético en sus electrones para poder llevarlos a la banda de conducción.

La unión np surge como de la necesidad de formar una región de campo eléctrico que permita crear una corriente de difusión cuando esta se encuentra iluminada o polarizada. Este hecho obliga a considerar que uno de los dos materiales, deberá tener las características de band gap menor para absorber los fotones incidentes y al unirlo con el material ventana, se crean las condiciones de unión np y de absorción fotónica necesarias.

El material de capa activa o absorbedor, por lo tanto, deberá ser el que tenga una menor banda prohibida de los dos en el sistema, para ayudar así a alcanzar generación de absorción fotónica a menores niveles de energía y propiciar la corriente de discusión con el material de capa ventana.

En la presente tesis, se mostrará que por las características de las muestras utilizadas y con el fin de estudiar las ecuaciones de banda prohibida en función del

dopaje, vamos a trabajar con el segundo criterio de selección de material ventana y absorbedor.

2.5 Características físicas de la unión

Una unión np, experimenta algunos efectos físicos posteriores a la consolidación de dicha unión, características conocidas como concentración de electrones, de huecos, dimensión de la zona de depleción y voltaje de potencial de contacto pueden ser controladas a partir de algunas consideraciones de diseño tales como niveles de dopaje de portadores, tipos de dopantes, y consideraciones de polarización o no polarización.

En el diseño de esta tesis se asumirán algunas características que servirán para proponer un método de análisis físico y eléctrico a través del estudio de *la ecuación de Poisson* y las características del *voltaje de contacto alrededor de la unión*.

Las muestras del dispositivo fueron proporcionadas por el instituto de ingeniería de la UABC, estas fueron dos piezas de silicio policristalino de tipo N y P, en las cuales se conoce la resistividad y a partir de ellas se calculó el valor del dopaje que tiene cada pieza.

La ecuación de Cálculo para la cantidad de portadores en función de la sus parámetros constitutivos incluyendo la resistividad es:

$$q\mu\rho = \frac{1}{n} \quad (2.12)$$

Donde q representa la carga eléctrica básica, μ es la movilidad de los electrones/huecos en un material tipo n o p respectivamente, ρ la resistividad eléctrica tipo n o p, n concentración de portadores (dopaje).

Se confirmo que la muestra tipo N tenía una resistividad de 5 Ω .cm y el material P un valor de resistividad de 2.5 Ω .cm.

Considerando una movilidad característica de huecos en el material P de 400 $\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ y de 1500 $\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ para los electrones en el material n, se pudieron calcular las concentraciones de portadores para cada uno de los materiales obteniendo los siguientes resultados:

$$n = 8.3 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$$

$$p = 7.6 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$$

Estos dopajes se utilizarán posteriormente para encontrar el valor de la banda prohibida o “band gap” de cada uno de los materiales a fin de encontrar cuál de los dos será el material de la capa activa y cuál será el material de la capa ventana utilizando la ecuación que relaciona la banda prohibida en función de la temperatura y la densidad de portadores.

Las consideraciones que se asumirán para esta propuesta en términos de la solución de la zona de depleción en la unión a través de la ecuación de Poisson son las siguientes:

- a) El campo eléctrico está confinado en la región de la unión y no existe campo eléctrico fuera de ella (región cuasi-neutral)
- b) No existen cargas libres en la zona de depleción, esto debido al alto campo eléctrico que existe en ella.
- c) Gracias a la no existencia de cargas en la zona de depleción, las ecuaciones de transporte de cargas serán cero.
- d) No existe generación ni recombinación de cargas en la zona de depleción, por lo que las ecuaciones de continuidad estarán dadas por:

$$\frac{dJ_n}{d(x)} = (U - G) = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{dJ_p}{d(x)} = (U - G) = 0 \quad (2.14)$$

Lo que quiere decir que J_n y J_p son constantes en esta zona.

- e) El perfil de dopado es escalonado abrupto y constante en su región respectiva

$$N_A^+ = N_D^+ = \text{cte}$$

- f) Todos los dopantes están ionizados ($N_A = N_A^+$ y $N_D = N_D^+$)

- g) Considerar el dispositivo en una sola dirección.

2.6 Generación de excitones y método de transferencia óptica en sólidos

Basado en el hecho que la propuesta de esta tesis es estudiar un sistema semiconductor de multicapa, es decir, un sistema de unión np con capas de contacto óhmico, debemos realizar entonces el estudio óptico de una estructura multicapa y analizar el comportamiento del rayo incidente y su paso a través de él.

En el *tratamiento del comportamiento de los rayos de luz* se demuestra que, en la aproximación paraxial, óptica de Gauss, al atravesar los elementos del sistema óptico experimentando refracciones o reflexiones sucesivas, en la interfaz entre medios de diferentes índices de refracción, y al trasladarse a través del medio que separa estas superficies este es susceptible de ser estudiado en la *representación de matrices unitarias de primer orden*. [6]

Introducimos dos conceptos de tipo óptico que nos servirán para entender el comportamiento del paso de un rayo incidente a través de un sistema multicapa: La *matriz de transferencia* es la que describe la traslación del rayo desde la izquierda a la derecha dentro del sólido y la *matriz de refracción o de interface* describe la refracción del rayo en la interfaz entre dos medios de diferentes índices de refracción n_1 y n_2 .

Para ello, asumiremos que los procesos ocurridos en la propagación del campo eléctrico óptico son puramente lineales debido a que el medio es *homogéneo* y las interfaces puramente *paralelas*, entonces bajo estas dos consideraciones, podemos proponer el uso del método de la matriz de transferencia óptica. Supongamos que un haz de luz monocromática de longitud de onda λ , incide sobre una capa no conductora, homogénea, no magnética e isotrópica, de espesor tal, que la diferencia de recorrido óptico entre los haces reflejados y transmitidos, después de experimentar las reflexiones múltiples se *mantiene pequeña* en comparación con la longitud de coherencia, lo que asegura así, que los haces sean esencialmente *coherentes*. [7]

2.6.1 Cálculo y análisis de la propagación del campo eléctrico con el uso la matriz de transferencia óptica

Teniendo en cuenta las condiciones de frontera para los campos magnéticos y eléctricos de las ondas planas incidentes en las interfaces, podemos obtener la ecuación matricial que relaciona los valores de los campos netos en una cara de la capa, con los valores que tienen en la otra. La figura 2.9 muestra un esquema del proceso de incidencia del haz de luz sobre un sistema de capas.

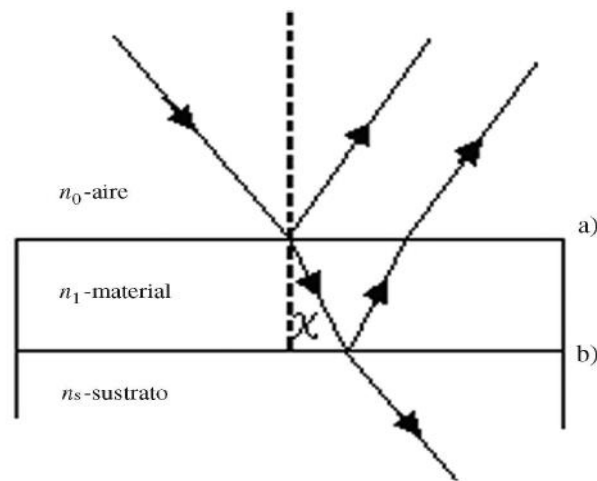


Figura 2.9: Haz de luz incidente sobre un medio y su comportamiento a través de él.

Consideremos las características del haz de luz incidente de tal forma que un campo óptico E viaja a través del aire con dos componentes, una en sentido de la propagación que se considera positiva, y la otra en sentido contrario a la propagación, entonces podemos concluir que el campo óptico es la suma de sus dos componentes de la siguiente forma:

$$E = E^+ + E^- \quad (2.15)$$

Teniendo en cuenta la dirección de propagación Z , entonces la ecuación 14 la podemos expresar en función de la dirección de propagación como:

$$E(z) = E(z)^+ + E(z)^- \quad (2.16)$$

Asumiendo ahora, que un medio de propagación puede tener cuatro componentes en su campo eléctrico (Figura 2.10):

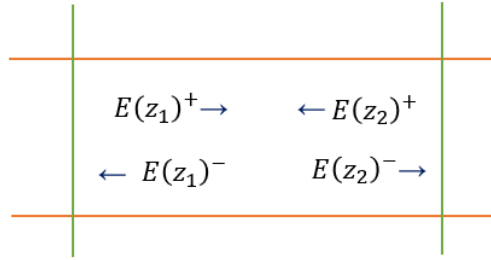


Figura 2.10: Distribución de las componentes del campo eléctrico dentro de un medio de propagación

la componente $E(z_1)^+$ viaja de izquierda a derecha y es considerada una componente de campo *independiente*, la segunda *componente independiente* en el sistema es $E(z_2)^+$ solamente que recorre el medio de derecha a izquierda.

Las otras dos componentes se *consideran dependientes*, es dependiente de y se desplaza de derecha a izquierda,

Si consideramos que las componentes que salen son dependientes de las componentes que entran al medio, entonces podemos escribir las ecuaciones que las definen de la siguiente manera:

$$E(z_1)^- = M_{11}E(z_1)^+ + M_{12}E(z_2)^+ \quad (2.17)$$

$$E(z_2)^- = M_{21}E(z_1)^+ + M_{22}E(z_2)^+ \quad (2.18)$$

donde los coeficientes M_{ij} representan los coeficientes característicos de las componentes de incidencia y reflexión de los campos eléctricos entrantes conocidos también como constantes de proporcionalidad de campo.

Debido a los campos dependientes están alineados a las componentes independientes, podremos obtener una forma matricial y obtener una matriz característica de constantes M como sigue:

$$\begin{pmatrix} E(z_1)^- \\ E(z_2)^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(z_1)^+ \\ E(z_2)^+ \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

A La matriz de coeficientes M se le conoce como *matriz descriptiva óptica* y define las características de la interacción de los campos a través del medio.

2.6.1.1. Definición de los campos, índice de refracción complejo, coeficientes de reflexión y transmisión

Ahora, analicemos el comportamiento de un campo óptico cuando se tienen dos medios unidos y dicho campo impacta el lugar de la unión, a esta unión se le llama interface de unión de dos medios distintos. Suponemos dos medios *i* y *j* unidos por una interface y que dos puntos cercanos Z_1 y Z_2 , se encuentran en lados opuestos de la interface donde el índice hace mención del medio, bajo estas condiciones encontramos *dos casos* en donde el campo óptico tiene un comportamiento específico.

Caso 1: Campo el óptico impacte de izquierda a derecha (figura 2.11):

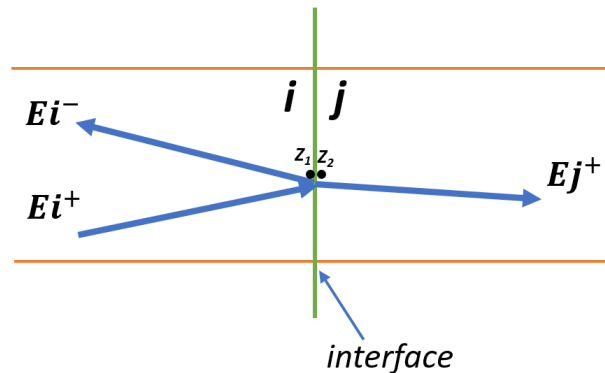


Figura 2.11: Campo transmitido Ej^+ como una función del campo incidente Ei^+ menos su reflexión Ei^-

Es ente caso tenemos que el *campo incidente total* es la suma del campo transmitido del medio *i* al medio *j* menos el campo reflejado hacia *i*, es decir:

$$Ei^+ = tEj^+ - rEi^- \quad (2.20)$$

Despejando la porción del campo que ingresa al medio *j*, es decir tEj^+ entonces tenemos:

$$t_{ij}Ej^+ = Ei^+ + r_{ij}Ei^- \quad (2.21)$$

donde r_{ij} es el índice es el coeficiente de reflexión desde la interface hacia la capa *i* y está dado por:

$$r_{ij} = \frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \quad (2.22)$$

donde n_1 y n_2 son las partes reales de los índice de refracción complejo de cada uno de los medios *i* y *j* que vienen representados por la forma compleja $\bar{n} = n + ik$.

De la misma forma, t_{ij} , es el coeficiente de transmisión dentro del medio *J* que esta dado por la ecuación:

$$t_{ij} = 1 + r_{ij} \quad (2.23)$$

Caso 2: Campo el óptico impacte de derecha a izquierda (figura 2.12):

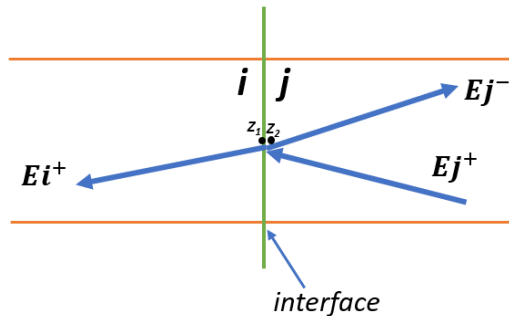


Figura 2.12: Campo transmitido Ei^+ como una función del campo incidente Ej^+ menos su reflexión Ej^-

Es este caso tenemos que el *campo incidente total* es la suma del campo transmitido del medio j al medio i menos el campo reflejado hacia j , es decir:

$$E_j^+ = tE_i^+ - rE_j^- \quad (2.24)$$

despejando la porción del campo que ingresa al medio i , es decir tE_i^+ entonces tenemos:

$$t_{ji}E_i^+ = E_j^+ + r_{ij}E_j^- \quad (2.25)$$

Considerando ahora el comportamiento en los puntos Z_1 o Z_2 , hacemos dependientes los campos incidentes y reflejados de i en el punto Z_1 como una función de j en el punto Z_2 es decir:

$$E_i^+(z_1) = S_{11}E_j^+(z_2) + S_{12}E_j^-(z_2) \quad (2.26)$$

$$E_i^-(z_1) = S_{21}E_j^+(z_2) + S_{22}E_j^-(z_2) \quad (2.27)$$

Estas ecuaciones representan las ecuaciones de dispersión de los campos en dos medios, en donde, en forma matricial se describen de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{z_1} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{z_2} \quad (2.28)$$

Donde la matriz de coeficientes S_{ij} se denomina matriz de dispersión de parámetros S o matriz característica.

2.6.1.2 Cálculo de los coeficientes de la matriz de interface

2.6.1.2.1 Impacto del campo de izquierda a derecha

En relación con el impacto de izquierda a derecha, obtenemos un sistema de ecuaciones lineales de dos incógnitas que puede resolverse en forma matricial de la siguiente forma: Utilizando la condición de frontera $E_j^-(z_2) = 0$, debido a que, el impacto de izquierda a derecha supone una reflexión nula y una transmisión total, entonces la ecuación (25a) se transforma en:

$$E_i^+(z_1) = S_{11}E_j^+(z_2) \quad (2.29)$$

despejando S_{11} se obtiene una razón de campos incidentes de i y j :

$$S_{11} = \frac{E_i^+(z_1)}{E_j^+(z_2)} \quad (2.30)$$

aplicando el concepto de proporcionalidad del campo incidente, es decir:

$$E_j^+ = t_{ij}E_i^+(z_1) \quad (2.31)$$

ya que el campo transmitido es proporcional al campo incidente, donde la constante de proporcionalidad es el coeficiente de transmisión t_{ij} , entonces tenemos que:

$$S_{11} = \frac{E_i^+(z_1)}{t_{ij}E_i^+(z_1)} \quad (2.32)$$

resolviendo los campos queda finalmente el parámetro S_{11} como:

$$S_{11} = \frac{1}{t_{ij}} \quad (2.33)$$

La ecuación (2.27) se utiliza para calcular el coeficiente, usando la misma consideración de frontera:

$$E_i^-(z_1) = S_{21}E_j^+(z_2) \quad (2.34)$$

Entonces despejando S_{21} se tiene:

$$S_{21} = \frac{E_i^-(z_1)}{E_j^+(z_2)} \quad (2.35)$$

Los campos reflejados dependen del haz incidente proporcionalmente con su coeficiente de reflexión, esto se puede expresar de la siguiente forma:

$$E_i^-(z_1) = r_{ij}E_i^+(z_1) \quad (2.36)$$

entonces sustituyendo la ecuación (2.31) y (2.34) en la ecuación (2.35) obtenemos:

$$s_{21} = \frac{r_{ij}E_i^+(z_1)}{t_{ij}E_i^+(z_1)} \quad (2.37)$$

De donde finalmente el coeficiente S_{21} queda:

$$s_{21} = \frac{r_{ij}}{t_{ij}} \quad (2.38)$$

Por lo tanto, cuando el haz impacta de izquierda a derecha y considerando que $E_j^-(z_2) = 0$ en el medio j , se obtienen los dos primeros coeficientes de la matriz característica:

$$s_{11} = \frac{1}{t_{ij}}$$

$$s_{21} = \frac{r_{ij}}{t_{ij}}$$

2.6.1.2.2 Impacto del campo de derecha a izquierda

En relación con el impacto del campo óptico de derecha a izquierda, y utilizando el sistema de ecuaciones (2.26) y (2.27), aplicamos ahora la condición de frontera $E_i^-(z_1) = 0$, que considera que la reflexión sobre el medio i igual a cero.

De la ecuación (25a) entonces tenemos:

$$E_i^+(z_1) = S_{11}E_j^+(z_2) + S_{12}E_j^-(z_2) \quad (2.39)$$

Despejando el coeficiente S_{12} :

$$S_{12} = \frac{E_i^+(z_1)}{E_j^-(z_2)} - \frac{S_{11}E_j^+(z_2)}{E_j^-(z_2)} \quad (2.40)$$

Como en la ecuación 28, los campos incidentales se transmiten en forma proporcional, siendo la constante de proporcionalidad el coeficiente de transmisión, así también, en coeficiente de reflexión en un sentido es equivalente al coeficiente de reflexión en sentido inverso, esto justo en el a interface de los dos medios, entonces:

$$\begin{aligned} E_j^-(z_2) &= r_{ji}E_j^+(z_2) & S_{11} &= \frac{1}{t_{ij}} & (1 + r_{ji}) &= t_{ji} \\ E_i^+(z_1) &= t_{ji}E_j^+(z_2) & r_{ij} &= -r_{ji} & (1 + r_{ij}) &= t_{ij} \end{aligned}$$

Sustituyendo en la ecuación (37):

$$S_{12} = \frac{t_{ji}E_j^+(z_2)}{r_{ji}E_j^+(z_2)} - \frac{1}{t_{ij}} \frac{E_j^+(z_2)}{r_{ji}E_j^+(z_2)} \quad (2.41)$$

Reduciendo en una primera iteración queda:

$$S_{12} = \frac{t_{ji}}{r_{ji}} - \frac{1}{t_{ij}r_{ij}} \quad (2.42)$$

haciendo una segunda reducción de términos y agrupando:

$$S_{12} = \frac{-[(1 + r_{ij})(1 - r_{ij})] + 1}{r_{ij}t_{ij}} \quad (2.43)$$

finalmente queda:

$$S_{12} = \frac{r_{ij}^2}{r_{ij}t_{ij}}$$

$$S_{12} = \frac{r_{ij}}{t_{ij}} \quad (2.44)$$

Ahora, de la ecuación (2.26), hacemos cero el campo reflejado en $i(z_1)$

$$0 = S_{21}E_j^+(z_2) + S_{22}E_j^-(z_2) \quad (2.45)$$

Despejando S_{22} tenemos:

$$S_{22} = -S_{21} \left[\frac{E_j^+(z_2)}{E_j^-(z_2)} \right]$$

Haciendo consideraciones similares a las de la ecuación (2.37), obtenemos:

$$S_{22} = -\frac{r_{ij}}{t_{ij}} \frac{E_j^+(z_2)}{r_{ji}E_j^+(z_2)} \quad (2.46)$$

de donde:

$$S_{22} = -\frac{r_{ij}}{t_{ij}(r_{ij})}$$

$$S_{22} = -\frac{1}{t_{ij}} \quad (2.47)$$

Ahora que ya tenemos los cuatro coeficientes de la matriz de dispersión S , entonces podemos renombrar estos coeficientes asociados a las características de interface de dos medios con diferentes parámetros constitutivos r y t con los parámetros I_{ij} . Así:

$$I_{11} = S_{11} \quad ; \quad I_{12} = S_{12} \quad ; \quad I_{21} = S_{21} \quad ; \quad I_{22} = S_{22}$$

en la ecuación (S):

$$\begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{z_1} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{z_2} \quad (2.48)$$

Sustituimos ahora los valores de la matriz de interface y nos quedan las ecuaciones del campo *en la interface* dentro de dos medios de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{z_1} = \begin{pmatrix} I_{11} & I_{12} \\ I_{21} & I_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{z_2} \quad (2.49)$$

donde:

$$I = \begin{pmatrix} I_{11} & I_{12} \\ I_{21} & I_{22} \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

sustituyendo los valores de los coeficientes obtenidos de I_{ij} :

$$I = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_{ij}} & \frac{r_{ij}}{t_{ij}} \\ \frac{r_{ij}}{t_{ij}} & \frac{1}{t_{ij}} \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

Factorizando el reciproco del coeficiente de transmisión

$$I = \frac{1}{t_{ij}} \begin{pmatrix} 1 & r_{ij} \\ r_{ij} & 1 \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

Queda entonces demostrado que las características del paso del campo a través de una interface entre dos medios están en función del índice de refracción complejo de

cada uno de los medios, por lo que, en el estudio propuesto, se van a calcular los índice de refracción para el Si del tipo P y del tipo N, utilizando las técnicas de elipsometría dentro del laboratorio de semiconductores del instituto de ingeniería de la universidad.

2.6.1.2.3 Cálculo de los coeficientes de la matriz de propagación

Para el estudio de la propagación de los campos ópticos dentro de un medio con índice de refracción complejo $\bar{n} = n + ik$, será necesario ahora analizar dos partículas que se encuentran inmersas en los medios y su interacción con el campo óptico.

Considerar dos partículas inmersas en el medio tal como se muestra en la figura 2.13, en posiciones diferentes. Al pasar un campo a través del medio, cada una de las partículas tiene dos componentes en él, la componente de incidencia con signo positivo y su reflexión.

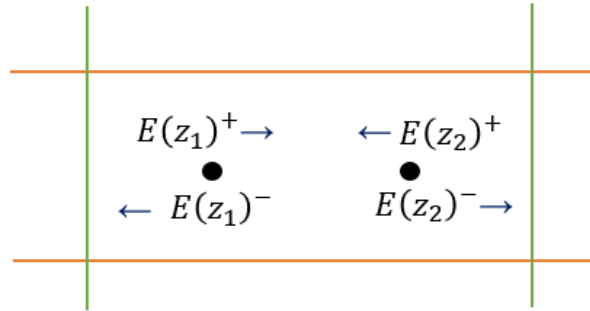


Figura2.13: Campo transmitido E_i^+ como una función del campo incidente E_j^+ menos su reflexión E_j^- en dos puntos Z_1 y Z_2 dentro del medio

Como en el caso de los campos en la interface, los campos en el punto Z_1 , los de incidencia y el de reflexión están relacionados con los del Z_2 mediante las siguientes ecuaciones lineales:

$$\begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{z_1} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{z_2} \quad (2.53)$$

donde la matriz P contiene los elementos de la matriz característica de propagación de un campo óptico en un medio en función de los campos del punto Z_2

Debido a que el medio es homogéneo, isotrópico y lineal, no existen reflexiones en los campos incidentes, por lo que solo existen campos transmitidos, de esta forma, los coeficientes P_{12} y P_{21} son cero, quedando las ecuaciones características siguientes:

$$\begin{aligned} E^+(z_1) &= P_{11}E^+(z_2) \\ E^-(z_1) &= P_{22}E^-(z_2) \end{aligned} \tag{2.53}$$

Por la naturaleza ondulatoria del campo, y por querer incluir una dependencia de la dimensión de la capa (medio), estas ecuaciones pueden ser expresadas en sus componentes trigonométricas a través de la siguiente forma:

$$E = A \sin(\omega t + \phi) \tag{2.54}$$

o bien en su forma imaginaria:

$$E = A \cos(\omega t + \phi) + i \sin(\omega t + \phi) \tag{2.55}$$

Aquí, A es amplitud de la onda, ω es la frecuencia angular igual a $2\pi f$, ϕ es la constante conocida como ángulo de fase e i es la unidad imaginaria.

A partir de la nomenclatura anterior, conviene transformar esta forma en una donde se pueda incluir el espesor de la capa a ser estudiada, para ello, la ecuación (2.54) se puede convertir a su forma *Fasorial* en la cual se integrará un concepto de ángulo respecto a la distancia dz que nos ayudara a describir el campo dentro del espesor esta película.

La forma fasorial es:

$$\begin{aligned} E^+(z_1) &= P_{11}e^{+j\beta_1 z} \\ E^-(z_1) &= P_{22}e^{-j\beta_1 z} \end{aligned} \quad (2.56)$$

Donde j es la unidad imaginaria, $\beta_1 = \frac{2\pi dz}{\lambda} n_1 \cdot \cos \emptyset$ es el fasor de las componentes trigonométricas, que contiene el ancho de la película (dz) y el ángulo de incidencia del campo.

De esta forma, la matriz de propagación en un medio de ancho dz esta expresada como:

$$P = \begin{pmatrix} e^{+j\beta_1 z} & 0 \\ 0 & e^{-j\beta_1 z} \end{pmatrix} \quad (2.57)$$

Donde las ecuaciones de campo serán:

$$\begin{pmatrix} E^+(z_1) \\ E^-(z_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{+j\beta_1 z} & 0 \\ 0 & e^{-j\beta_1 z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E^+(z_2) \\ E^-(z_2) \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

Con las dos matrices, la de propagación y la de interface, podremos ahora conocer el comportamiento del campo óptico en el momento del impacto en sus medios y su recorrido dentro de él.

Hasta aquí el análisis ha sido entre dos películas o medios, sin embargo, la propuesta de esta tesis es una *estructura multicapa* que contiene cinco capas por las que el campo óptico pasa, por lo que es necesario explicar cuál es la situación de análisis cuando tenemos una estructura de este tipo y definir las condiciones de campo eléctrico en la capa activa en la que requerimos conocer sus características. Esto se explicará en la siguiente sección.

2.6.2 Análisis de la propagación del campo óptico en estructuras multicapa

Para el análisis multicapa, vamos a considerar la capa activa como la capa en la cual se va a estudiar el campo electromagnético de interés, ya que el Cálculo de este va a generar posteriormente el nivel de disipación a través del teorema de Poynting y su posterior generación de electrones.

Para generalizar la nomenclatura, vamos a considerar la capa activa como la capa de interés, la cual se va a llamar M_j . Esta capa estará envuelta en capas que estarán antes de ella y después de ella, siendo estas múltiples capas por cada lado de la capa activa.

Las capas que están a la izquierda (anteriores) de la capa activa se llamarán M'_j y las capas que están a la derecha (posteriores) se llamarán M''_j . Consideraremos ahora la propuesta general multicapa en forma gráfica como lo muestra la figura 2.14. En ella podemos observar la estructura multicapa con la capa activa como capa de interés y los campos eléctricos que pasan por cada una de ellas, así también, los nombres asignados a cada capa anterior y posterior a la capa activa.

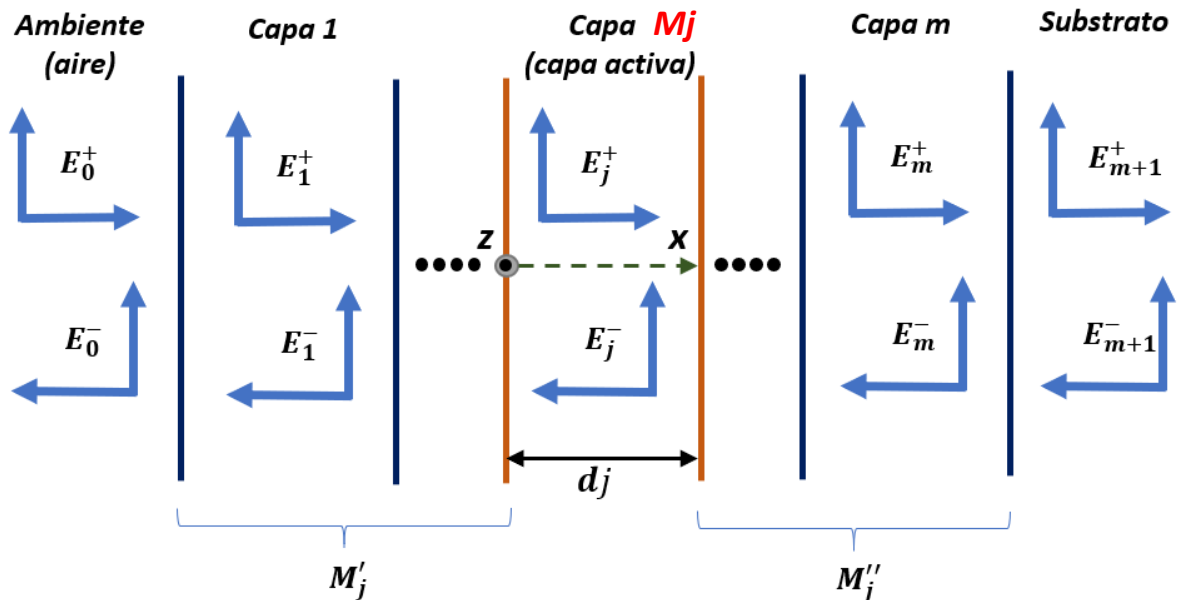


Figura 2.14: Esquema multicapas para análisis de campo óptico en la capa activa M_j

El diagrama equivalente para esta configuración de matrices en términos de las capas que recorrerá el campo óptico es el mostrado en la figura 2.15.

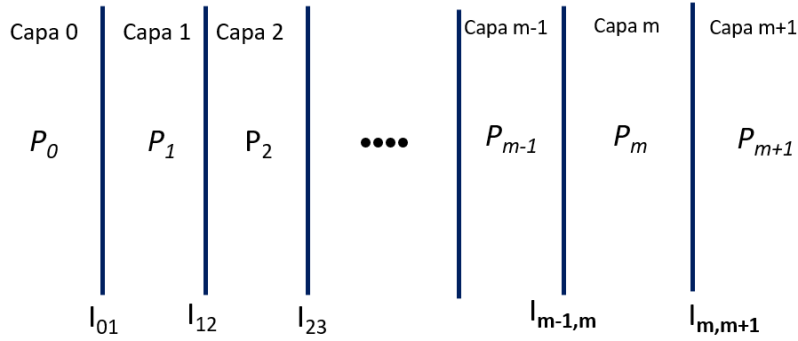


Figura 2.15: estructura en capas de un sistema donde se muestran las interfaces I y las capas donde se propaga el campo óptico

Para la capa j , escribiremos la matriz de propagación P_j y para la interface que va de la capa i a la capa j , definiremos la matriz de interface como I_{ij} . Entonces, para dos puntos, Z_0 en la capa 0 y Z_{m+1} en la capa $m+1$, podemos escribir la matriz de dispersión M general como:

$$M = I_{01}P_1I_{12}P_2I_{23}P_3, \dots, P_mI_{m,m+1} = \left(\prod_{v=1}^m I_{(v-1),v}P_v \right) I_{m,(m+1)} \quad (2.59)$$

Para analizar el recorrido del campo a través de las diferentes capas, será necesario agrupar las capas anteriores a la capa activa, así como también las posteriores a ella. Utilizando el mismo concepto de la ecuación (47), agrupamos las capas que están hacia la izquierda de M , la cual llamaremos M'_j , estas estarán expresadas a través de la siguiente serie:

$$M'_j = \left(\prod_{v=1}^{j-1} I_{v-1,v}L_v \right) I_{j-1,j} \quad (2.60)$$

Del mismo modo, la agrupación de las capas que están a la derecha de la capa activa lleva a la matriz conocida como M_j'' y está definida como:

$$M_j'' = \left(\prod_{v=j+1}^m I_{v-1,v} L_v \right) I_{m,m+1} \quad (2.61)$$

Finalmente, la matriz de dispersión del sistema propuesto estará dada por la multiplicación de las matrices anteriores, posteriores y la matriz de la capa activa como:

$$M = M_j' M_j M_j'' \quad (2.62)$$

2.6.2.1 Análisis en capas anteriores a la capa activa M_j'

Desde que las capas anteriores y posteriores a la capa de análisis pueden ser de diferentes materiales, se entiende que los coeficientes de cada una de ellas (coeficientes de reflexión y transmisión) son diferentes. Por lo que el impacto del campo desde el lado izquierdo al derecho, es decir E_o , sobre la matriz M_j' está definido por las ecuaciones matriciales tal como se muestran a continuación:

$$\begin{pmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{j,11}' & M_{j,12}' \\ M_{j,21}' & M_{j,22}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_j'^+ \\ E_j'^- \end{pmatrix} \quad (2.63)$$

de donde, al hacer las multiplicaciones indicadas resulta en:

$$E_0^+ = M_{j,11}' E_j'^+ + M_{j,12}' E_j'^- \quad (2.64)$$

$$E_0^- = M_{j,21}' E_j'^+ + M_{j,22}' E_j'^- \quad (2.65)$$

El campo total E_j^+ y E_j^- son los campos de transmisión y reflexión de interés para este estudio, por lo que al despejarlos de las ecuaciones (2.63) y (2.64) nos quedan:

$$E_j^+ = \frac{E_0^+ - M'_{j,12}E_j^-}{M'_{j,11}} \quad (2.66)$$

$$E_j^- = \frac{E_0^- - M'_{j,21}E_j^+}{M'_{j,22}} \quad (2.67)$$

Considerando las condiciones descriptivas de:

$$E_0^- = r'_j E_0^+ \quad E_j^+ = t'_j E_0^+ \quad E_j^- = r'_j E_j^+$$

que expresan los campos incidentes y reflejados en términos de sus coeficientes de transmisión y reflexión respectivamente, se obtienen las siguientes ecuaciones descriptivas:

$$t'_j = \frac{1}{M'_{j,11}} \quad r'_j = \frac{M'_{j,21}}{M'_{j,11}} \quad r'_{j-} = -\frac{M'_{j,12}}{M'_{j,11}} \quad (2.68)$$

Cuyos coeficientes de *transmisión y reflexión para las capas anteriores* a la capa activa están en función de los parámetros descriptivos de la matriz de dispersión.

2.6.2.2 Análisis en capas posteriores a la capa activa M''_j

Realizando un análisis similar para las capas posteriores a la capa activa M''_j , las ecuaciones del campo quedan de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} E_j^{''+} \\ E_j^{''-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M''_{j,11} & M''_{j,12} \\ M''_{j,21} & M''_{j,22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{m+1}^{''+} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.69)$$

Donde se observa que, solamente se están considerando campos de transmisión y los campos reflejados son cero.

Las ecuaciones de los campos de incidencia y reflejados desde las capas posteriores a la capa activa son:

$$E_j''^+ = M_{j,11}'' E_{m+1}''^+ \quad (2.70)$$

$$E_j''^- = M_{j,21}'' E_{m+1}''^+ \quad (2.71)$$

Utilizando las características de los campos en función de sus coeficientes de transmisión y reflexión:

$$E_{m+1}''^+ = t_j'' E_j''^+ \quad E_j''^- = r_j'' E_j''^+$$

Sustituyendo estas condiciones en las ecuaciones (2.69) y (2.70) y despejando los coeficientes de transmisión y reflexión, tenemos:

$$t_j'' = \frac{1}{M_{j,11}''}$$

$$r_j'' = \frac{M_{j,21}''}{M_{j,11}''}$$

2.6.2.3 Análisis en la capa activa M_j

Utilizando la notación fasorial descrita en la ecuación (48) y calculando los campos incidental y reflejado en la capa activa (capa de interés), podemos proponer las siguientes ecuaciones:

$$\begin{pmatrix} E_j'^+ \\ E_j'^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\beta_j} & 0 \\ 0 & e^{-i\beta_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_j''^+ \\ E_j''^- \end{pmatrix} \quad (2.72)$$

De donde, haciendo las multiplicaciones indicadas tenemos:

$$E_j'^+ = E_j''^+ e^{i\beta_j} \quad (2.73)$$

$$E_j'^- = E_j''^- e^{-i\beta_j} \quad (2.74)$$

Considerando que el coeficiente de reflexión es el cociente entre el campo reflejado entre el campo incidente, es decir:

$$r = \frac{E^-}{E^+} \quad (2.75)$$

Y el coeficiente de transmisión es el cociente entre el campo transmitido y el campo incidente tal como

$$t = \frac{E_j^+}{E_0^+} \quad (2.76)$$

El coeficiente de reflexión r'' en la matriz posterior M_j'' entonces estará dado por:

$$r_j'' = \frac{E_j''^-}{E_j''^+} \quad (2.77)$$

Despejando de las ecuaciones (2.72) y (2.73) los campos y haciendo las operaciones para reducir la expresión, el coeficiente de reflexión queda:

$$r_j'' = \frac{E_j'^- e^{-i\beta_j}}{E_j'^+ e^{i\beta_j}} = -\frac{1}{r_j'} e^{-2i\beta_j} \quad (2.78)$$

De la misma forma, calculamos los coeficientes de transmisión, el del campo que impacta de izquierda t_j^+ a derecha y el que impacta de derecha izquierda t_j^- dentro de la capa de interés:

$$t_j^+ = \frac{t_j'}{1 - r_j' - r_j'' \cdot e^{i2\beta_j}} \quad (2.79)$$

$$t_j^- = \frac{t_j' - r_j'' \cdot e^{i2\beta_j}}{1 - r_j' - r_j'' \cdot e^{i2\beta_j}} = t_j^+ r_j'' e^{i2\beta_j} \quad (2.80)$$

donde r_j' está definida en la ecuación 2.68.

Utilizando las ecuaciones (2.76), (2.78) y (2.79), y definiendo el campo eléctrico total en la capa activa (M_j) en función de la distancia de recorrido (ancho de la película) Z de derecha a izquierda y en función del campo incidente E_0^+ como:

$$E_j(z) = E_j^+(z) + E_j^-(z) \quad (2.81)$$

definimos el *campo eléctrico total* en términos de sus componentes transmitidas y reflejadas como:

$$E_j(z) = t_j^+ \left[e^{i\xi_j z} + r_j'' e^{i\xi_j (2d_j - z)} \right] E_0^+ \quad (2.82)$$

$$\text{Donde:} \quad \xi = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) \pi_j \cos \emptyset \quad (2.83)$$

Así también, el campo total se puede expresar en función de sus componentes matriciales obtenidas a partir del análisis de las matrices de dispersión como:

$$E_j(z) = \frac{M_{j,11}'' e^{i\xi_j (d_j - z)} + M_{j,21}'' e^{i\xi_j (d_j - z)}}{M_{j,11}' M_{j,11}'' e^{-i\xi_j d_j} + M_{j,12}' M_{j,11}'' e^{i\xi_j d_j}} E_0^+ \quad (2.84)$$

2.6.3 Disipación del campo eléctrico en el medio

El campo eléctrico total obtenido a través del método de la matriz de transferencia óptica se utiliza para obtener el número de excitones por unidad de área que se pueden presentar en el medio, analizando la cantidad de campo eléctrico es disipada (absorbida) por la

capa activa. Es por ello por lo que el concepto de disipación de campo eléctrico se utiliza en el proceso y será descrito en este párrafo a fin de entender la metodología que se utilizó durante las pruebas teóricas.

2.6.3.1 Vector Poynting y la disipación del campo eléctrico.

Se denomina *vector de Poynting* al vector cuyo módulo o magnitud representa la *intensidad instantánea de energía electromagnética que fluye a través de una unidad de área* perpendicular a la dirección de propagación de la onda electromagnética, y cuyo sentido es el de propagación. Matemáticamente, este vector se puede representar como el producto vectorial del campo eléctrico y el campo magnético de la onda incidente.

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} = \frac{1}{\mu} \vec{E} \times \vec{B} \quad (2.85)$$

donde $\vec{E}$ representa el vector del campo eléctrico, $\vec{H}$ representa la intensidad del campo magnético, $\vec{B}$ es el campo de inducción magnética y μ es la permeabilidad magnética del medio.

Una característica de este vector se la da el producto vectorial y la condición ondulatoria en el tiempo de los campos eléctrico y magnético. El vector *Poynting* es ortogonal al flujo de los campos, es decir, la dirección del desplazamiento de los dos campos estará definido por la dirección de este vector. Debido a que los campos viajan a través del medio en forma ondulatoria, se utiliza el *valor promedio* como valor de magnitud o módulo de $\vec{S}$, usualmente indicado entre los símbolos $\langle \rangle$.

Este vector está asociado a la conservación de la energía a través de las ecuaciones de Maxwell. Esta asociación se llama usualmente Teorema de Poynting y expresa la ley de la conservación de la energía. Este teorema dice que “*la disminución de la energía electromagnética en una región (área o volumen) se debe a la disipación de potencia en forma de calor por el efecto Joule, y al flujo hacia el exterior del vector Poynting*”

El flujo de energía disipado por unidad de tiempo en cualquier punto esta expresado por:

$$Q(z) = \langle -\nabla \cdot \vec{S} \rangle \quad (2.86)$$

Donde el valor del rotacional multiplicado por el vector Poynting está asociado las ecuaciones de Maxwell de la siguiente forma:

$$-\nabla \cdot S = \left(H \frac{\partial B}{\partial t} + E \frac{\partial D}{\partial t} \right) \quad (2.87)$$

En donde los campos eléctrico y magnético varían en el tiempo y dependen de sus características constitutivas de los materiales.

Dado que en una posición dada el número de estados excitados en una estructura depende directamente de la energía absorbida por el material, la disipación del campo electromagnético en el medio es la cantidad de interés en el caso de nuestro sistema de celda unitaria. Usando las ecuaciones de Maxwell se puede demostrar que la energía disipada promedio por segundo en la capa j en la posición z para incidencia normal es:

$$Q_j(z) = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \alpha_j n_j |E_j(z)|^2 \quad (2.88)$$

Esta ecuación de disipación de campo eléctrico involucra parámetros constitutivos del material en el cual se está evaluando el campo eléctrico, es decir, la capa j y a lo largo de toda su dimensión. La constante $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} F/m$ es la permitividad eléctrica del vacío, que se utiliza como un componente de referencia para la permitividad eléctrica del material del cual estará fabricada la capa activa. El parámetro tal vez mas importante por la disipación en el medio es el *coeficiente de absorción del material*, representado por α y que está definido como:

$$\alpha_j = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (2.89)$$

Aquí, k es Coeficiente de extinción complejo, que pertenece a la parte imaginaria del índice de refracción complejo del medio, que es particular al material que se tiene en la capa activa y que viene dado por $\bar{n} = n_i + jk$ y λ = Longitud de onda del campo incidente en el medio (nm).

Este coeficiente de absorción se utiliza para las uniones np simples (que no contienen pozos cuánticos en su sistema). El coeficiente de absorción para un sistema con inclusión de pozo cuántico se explicará en secciones posteriores y se definirán sus diferencias y las consideraciones que hay que tomar al calcularlo.

n_j es la parte real del índice de refracción complejo del medio, C es la velocidad de la luz $C = (3 \times 10^8 \text{ m/s})$ y $E(z)$ es el campo óptico en el punto z de evaluación.

Si utilizamos la ecuación (2.87) del campo eléctrico en el punto z y la sustituimos en la ecuación (2.81), y expandimos los componentes podemos expresar la disipación del campo eléctrico en un punto z en función del coeficiente de absorción, de la ubicación de z y de la longitud de onda incidente. Esto se representa mediante la ecuación siguiente:

$$Q_j = \alpha_j T_j I_0 \left[e^{-\alpha_j z} + \rho_j''^2 \cdot e^{-\alpha_j (2d_j - z)} + 2\rho_j'' \cdot e^{-\alpha_j d_j} \cdot \cos\left(\frac{4\pi n_j}{\lambda}(d_j - z) + \delta_j''\right) \right] \quad (2.90)$$

en donde $T_j = (n_j / n_0) |t_j^+|^2$ representa la transmitancia de la intensidad interna, I_0 es la intensidad de la luz incidente y ρ_j'' valor absoluto de los coeficientes de reflexión complejo.

Esta ecuación (2.89) está dividida en tres partes, las cuales están definidas como sigue:

El primer término se origina del campo óptico (campo electromagnético incidente) que se propaga en *dirección de z*.

El segundo término se origina en el campo óptico (campo electromagnético incidente) pero en *dirección contraria a Z*.

El tercer término es la interferencia de los dos anteriores.

2.6.4 Generación de excitones G_L

Una vez que la tasa de energía disipada por unidad de volumen Q_j es determinada y asumiendo una eficiencia de conversión de fotón a excitón η , la tasa de generación de excitones $G(x)$ puede ser expresada dividiendo Q_j sobre la energía del fotón con longitud de onda λ e integrando sobre todas las longitudes de onda del espectro en consideración. La ecuación que describe este proceso es:

$$G(x) = n \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \frac{\lambda}{hc} Q(x, \lambda) d\lambda \quad (2.91)$$

donde h es a contante de Planck.

En el presente estudio, se propondrá un sistema multicapa con Si tipo n y tipo P, en el cual se analizara, en la sección de desarrollo, el paso del campo óptico a través de la propuesta de sistema fotovoltaico. Así mismo calcularemos la disipación del campo obtenido y se obtendrá el aporte de electrones fotogenerados (GL) para este sistema. En una segunda propuesta, se incluirá el pozo cuántico de Ge como una película nanométrica que promueve el confinamiento de cargas y el enfriamiento óptico. Dicha película, se agregará al sistema inicial, y se recalculará el campo óptico, la disipación y la generación de excitones para esta nueva configuración. Solo tomaremos en cuenta, como ya se mencionó en secciones previas, la participación del coeficiente de absorción para un sistema con pozo cuántico se modifica, al incluir algunos parámetros electrónicos y de probabilidades (niveles de Fermi) que son necesarios para el Cálculo eficiente de la absorción dentro del pozo.

2.7 Cálculo de los niveles energéticos del pozo cuántico

2.7.1 Solución de la ecuación de Schrödinger para pozo con barreras finitas.

La estructura de confinamiento de un pozo cuántico se muestra en la figura 2.16.

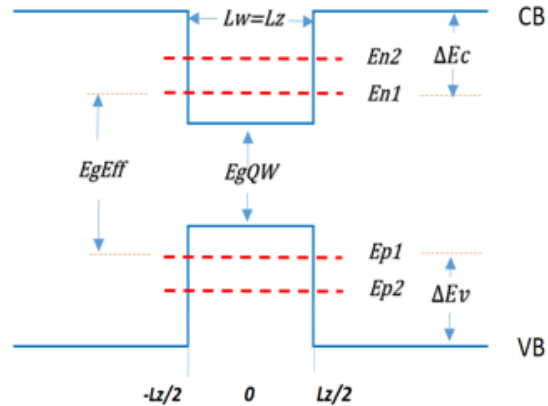


Figura 2.16: Estructura energética de Pozo cuántico, donde se observan los dos primeros niveles energéticos en la banda de conducción y banda de valencia.

El pozo está formado por dos barreras (b) de material con banda prohibida E_g que confinan a un tercer material llamado “pozo” (w) con banda prohibida menor. Las dimensiones de las película w se encuentran en el orden nanométrico, por esta razón, las leyes de la mecánica clásica a niveles dejan de aplicar tal como las conocemos, y en su lugar, las leyes de la mecánica cuántica toman efecto. El punto donde consideramos el inicio de la aplicación de la mecánica cuántica como efectiva se conoce como dimensión menor a la “longitud de onda de De Broglie”. Para detalles en el concepto y la deducción de la ecuación de la longitud de onda de De Broglie, revisar anexo A.5.

Una de las características que se observan a dimensiones menores a la longitud de onda de De Broglie es que los átomos confinados se concentran en niveles discretos de energía, y son localizados en forma probabilística dentro del pozo. Estos niveles están asociados a directamente con el ancho de la película y con las condiciones de energía del pozo.

Para obtener los niveles de energía en la banda de conducción (CB) y la banda de valencia del pozo (VB), es necesario resolver la ecuación de Schrödinger para un

pozo de paredes finitas (figura 2.17) considerando las masas efectivas de los portadores mayoritarios en cada una de las bandas (electrones en la BC y huecos en la BV).

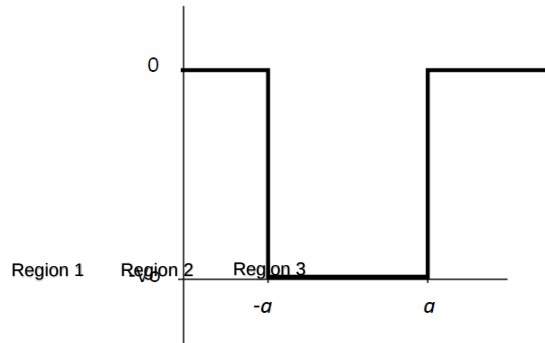


Figura 2.17: Pozo con paredes con potenciales finitos

2.7.1.1 Solución en las regiones de potencial

La ecuación de Schrödinger dependiente de X establece que:

$$\nabla^2 \phi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \phi(x) = 0 \quad (2.92)$$

Donde el termino $\nabla^2 \phi(x)$ expresa la energía cinética del sistema, mientras que el termino $\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \phi(x)$ representa la energía potencial del pozo.

Para resolverla, es necesario hacerlo para las tres regiones del pozo individualmente considerando las condiciones de $V=0$ en las regiones 1 y región 3, y $V=-V_0$ para la región 2.

En la región 1, que va desde $-\infty$ a $-a$, con $V_0=0$, la ecuación de Schrödinger queda:

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x) = 0 \quad (2.93)$$

siendo esta ecuación, una ecuación diferencial de segundo grado, consideramos la siguiente sustitución algebraica que satisface la ecuación original:

$$K^2 = -\frac{2mE}{\hbar}$$

$$K = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar}} \quad (2.94)$$

La condición de frontera numero 1 (CF-1) dice que todas las soluciones deben siempre de existir en este rango de x , por lo que se utilizan funciones exponenciales como solución general a la ecuación de la forma siguiente:

$$\phi(x) = Ae^{Kx} + Be^{-Kx} \quad (2.95)$$

debido al rango de X en esta región, solamente la solución valida es:

$$\phi(x) = Ae^{Kx} \quad (2.96)$$

En la región 3, que va desde a hasta ∞ , con $V_0=0$, se realiza un análisis similar, en donde la solución final de la ecuación en esta región queda como:

$$\phi(x) = Be^{-Kx} \quad (2.97)$$

En estas dos regiones (1 y 3), la solución muestra una función de onda que se desvanece conforme X tiende a $-\infty$ o a ∞ , por lo que el tipo de ondas en estas regiones son llamadas ondas evanescentes.

En la región 2, que va desde $-a$ hasta a con $V_0=-V_0$, la ecuación de Schrödinger toma entonces la forma:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)\phi(x) = 0 \quad (2.98)$$

Realizando la sustitución algebraica:

$$K_{II}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)$$

$$K_{II} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} \quad (2.99)$$

Entonces la solución propuesta para esta región de la ecuación diferencial es:

$$\phi(x) = C \text{sen}(K_{II}x) + D \cos(K_{II}x) \quad (2.100)$$

La cual es una función de onda “estacionaria” dentro del confinamiento del pozo cuántico y que mantiene sus características ondulatorias dependientes de senos y cosenos.

2.7.1.2 Solución en las interfaces

Aplicando ahora las condiciones frontera en las regiones de interface entre las barreras y el pozo, debemos satisfacer la continuidad de las soluciones encontradas, es decir, que las funciones encontrada existan en cualquier punto de X y también que cualquier cambio energético en ellas pueda ser reflejado en ambos lados de la interface. Para ello, se igualan las *soluciones* y *sus derivadas* dentro y fuera del pozo, obteniendo:

Soluciones	Derivadas
$\phi(x) = Ae^{Kx}$	$\phi'(x) = AK e^{Kx}$
$\phi(x) = C \text{sen}(K_{II}x) + D \cos(K_{II}x)$	$\phi'(x) = CK_{II} \cos(K_{II}x) - DK_{II} \text{sen}(K_{II}x)$
$\phi(x) = Be^{-Kx}$	$\phi'(x) = -BK e^{Kx}$

Caso 1 en la región de $-a$ a $-\infty$:

$$Ae^{Kx} = C\text{sen}(K_{II}x) + D\cos(K_{II}x)$$

$$AKe^{Kx} = CK_{II} \cos(K_{II}x) - DK_{II}\text{sen}(K_{II}x)$$

Caso 2 en la región de a a ∞ : Solución fuera del pozo=Solución dentro del pozo

Derivada fuera del pozo=Derivada dentro del pozo

$$Be^{-Kx} = C\text{sen}(K_{II}x) + D\cos(K_{II}x)$$

$$-BKe^{Kx} = CK_{II} \cos(K_{II}x) - DK_{II}\text{sen}(K_{II}x)$$

Solución fuera del pozo=Solución dentro del pozo

Derivada fuera del pozo=Derivada dentro del pozo

Igualando a cero las cuatro ecuaciones nos queda el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} 0 & - Ae^{Kx} + C\text{sen}(K_{II}x) + D\cos(K_{II}x) = 0 \\ 0 & - AKe^{Kx} + CK_{II} \cos(K_{II}x) - DK_{II}\text{sen}(K_{II}x) = 0 \\ -Be^{-Kx} & + 0 + C\text{sen}(K_{II}x) + D\cos(K_{II}x) = 0 \\ BKe^{Kx} & + 0 + CK_{II} \cos(K_{II}x) - DK_{II}\text{sen}(K_{II}x) = 0 \end{aligned} \quad (2.101)$$

Sustituyendo $x=a$ y $x=-a$ en sus correspondientes casos y ordenando:

$$\begin{aligned} -C\text{sen}(K_{II}a) & + D\cos(K_{II}a) - Ae^{-Ka} + 0 = 0 \\ C\text{sen}(K_{II}a) & + D\cos(K_{II}a) + 0 - Be^{-Ka} = 0 \\ CK_{II} \cos(K_{II}a) & + DK_{II}\text{sen}(K_{II}a) - AKe^{-Ka} + 0 = 0 \\ CK_{II} \cos(K_{II}a) & - DK_{II}\text{sen}(K_{II}a) + 0 + BKe^{Ka} = 0 \end{aligned} \quad (2.102)$$

Representando este sistema en forma matricial finalmente tenemos:

$$\begin{bmatrix} -\text{sen}(K_{II}a) & \cos(K_{II}a) & -e^{-Ka} & 0 \\ \text{sen}(K_{II}a) & \cos(K_{II}a) & 0 & -e^{-Ka} \\ K_{II} \cos(K_{II}a) & K_{II} \text{sen}(K_{II}a) & -Ke^{-Ka} & 0 \\ K_{II} \cos(K_{II}a) - K_{II} \text{sen}(K_{II}a) & 0 & 0 & Ke^{Ka} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \\ A \\ B \end{bmatrix} = 0 \quad (2.103)$$

Realizando algebra lineal, se puede probar que:

$$\begin{vmatrix} -\text{sen}(K_{II}a) & \cos(K_{II}a) & -1 & 0 \\ \text{sen}(K_{II}a) & \cos(K_{II}a) & 0 & -1 \\ K_{II} \cos(K_{II}a) + K_{II} \text{sen}(K_{II}a) & -K & 0 & 0 \\ K_{II} \cos(K_{II}a) - K_{II} \text{sen}(K_{II}a) & 0 & 0 & K \end{vmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \\ A \\ B \end{bmatrix} = 0 \quad (2.104)$$

Aplicando el método de cofactores para el Cálculo de las constantes tenemos el siguiente resultado:

$$|M| = -2K_{II}^2 \cos(K_{II}a) \text{sen}(K_{II}a) - 2KK_{II} \text{sen}^2(K_{II}a) + 2KK_{II} \cos^2(K_{II}a) + 2K^2 \text{sen}(K_{II}a) \cos(K_{II}a)$$

Reduciendo esta expresión e igualándola a cero

$$K_{II}^2 \tan(K_{II}a) + KK_{II} \tan^2(K_{II}a) - KK_{II} - K^2 \tan(K_{II}a) = 0$$

O bien:

$$(K \tan(K_{II}a) + K_{II})(K_{II} \tan(K_{II}a) - K) = 0 \quad (2.105)$$

Aplicando la propiedad del elemento nulo, para que la ecuación 2.105 se cumpla:

$$(K \tan(K_{II}a) + K_{II}) = 0 \quad \text{o} \quad (K_{II} \tan(K_{II}a) - K) = 0$$

Despejando K de cada una de las ecuaciones tenemos:

$$K = \frac{-K_{II}}{(\tan(K_{II}a))} = -K_{II} \cot(K_{II}a) \quad K = K_{II} \tan(K_{II}a) \quad (2.105)$$

$$K = -K_{II} \cot(K_{II}a) \quad (2.106)$$

La ecuación (2.105) encuentra los niveles energéticos para cuando tenemos niveles impares, de la misma forma, la ecuación (2.106) nos da los niveles de energía para los niveles pares.

Ambas ecuaciones anteriores dependen de K_{II} , que a su vez está en función de E. realizando entonces la definición final para las ecuaciones pares e impares en función de energía decimos que:

$$f(E)_{Par} = K_{II} \tan(K_{II}a) \quad (2.107)$$

$$f(E)_{impar} = -K_{II} \cot(K_{II}a) \quad (2.108)$$

Considerando ahora las ecuaciones (2.94) y (2.99)

$$K = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$K_{II} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}$$

Al multiplicarlas por a^2 nos quedan:

$$(Ka)^2 = -\frac{a^2 2mE}{\hbar^2}$$

$$(K_{II}a)^2 = \frac{a^2 2mE}{\hbar^2} + \frac{a^2 2mV_0}{\hbar^2}$$

Al igualar las dos ecuaciones y aplicando reducción por sumas y restas, se obtiene la ecuación de la circunferencia:

$$(Ka)^2 + (K_{II}a)^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \quad (2.109)$$

de radio:

$$r = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m_w V_0} \quad (2.110)$$

2.7.2 Cálculo de los niveles energéticos por método gráfico con $m_w = m_b$.

Las intersecciones entre la gráfica de la circunferencia (2.108) y la función de tangentes $f(E)_{par}$ se le conocen como “*eigenvalores*” o valores propios del sistema lineal y son los *niveles de energía pares* del pozo.

De la misma forma, los cruces de las cotangentes de $f(E)_{impar}$ con la circunferencia son los *niveles de energía impares* del pozo cuántico.

Estas ecuaciones aplican cuando las masas del electrón de la barrera y del pozo son *iguales*.

2.7.3 Cálculo de los niveles energéticos por método gráfico con $m_w \neq m_b$.

Para el caso donde las masas de los electrones de la barrera y del pozo son diferentes, las ecuaciones toman la forma siguiente:

$$(K_{II}a)^2 + \frac{m_w}{m_b} (Ka)^2 = \frac{a^2 2m_w}{\hbar^2} V_0 \quad (2.111)$$

$$r = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m_w V_0} \quad (2.112)$$

$$K'a = -a \sqrt{\frac{m_b}{m_w}} K_{II} \cot(K_{II}a) \quad (2.113)$$

$$K'a = \sqrt{\frac{m_b}{m_w}} a K_{II} \tan(K_{II}a) \quad (2.114)$$

y los niveles energéticos del pozo se pueden ubicar gráficamente en las intersecciones con la circunferencia de la misma forma que en el caso descrito en el punto 2.7.2

En la figura 2.22 podemos observar como ejemplo los puntos de intersección entre la función $f(E) = 102364319.2\sqrt{E + 624} \tan(0.124\sqrt{E + 654})$ y $K = 72382504.27\sqrt{-E}$, que resultan de analizar un pozo cuántico de barrera CdS ($E_g=2.52$ eV) y pozo CdTe ($E_g=1.43$ eV), con masas efectivas diferentes ($m_b \neq m_w$).

Se pueden observar los puntos de intersección que se encuentran en las regiones indicadas con los círculos en rojo (2.22a), los cuales muestran los niveles energéticos de los pozos para un ancho de película de $50 \text{ \AA}$ ($a=25\text{\AA}$). Los niveles reales se obtienen calculando $(V_0 - |E_c|)$, debido a la referencia del Cálculo. (2.22b).

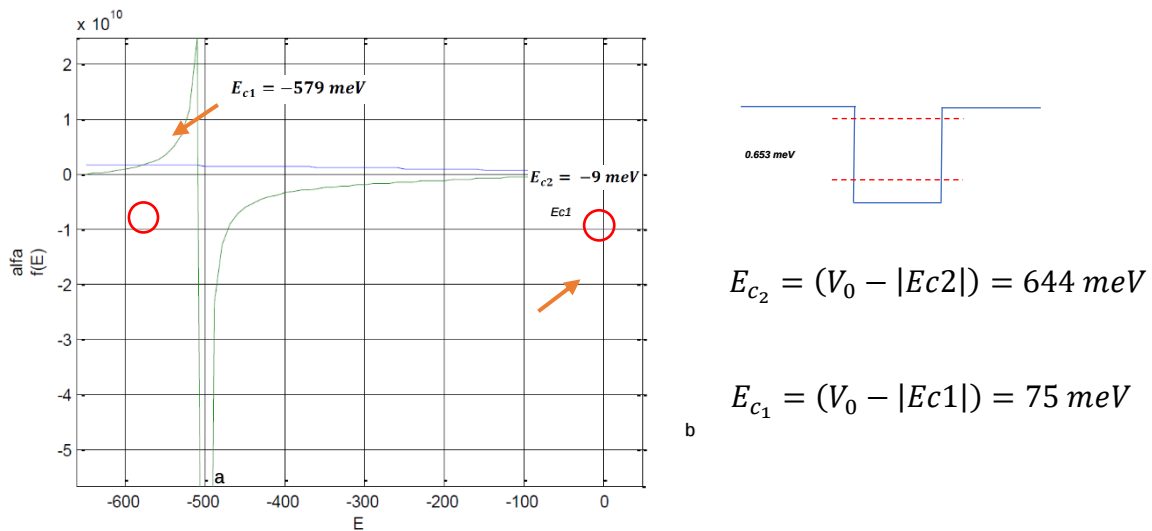


Figura 2.18: Ejemplo del grafico para calcular niveles energéticos de pozo cuántico, donde se aprecian las intersecciones (a), y la obtención de nivel real considerando la diferencia de los potenciales (b).

2.8 Interacción de la luz en semiconductores

Una vez que el flujo de fotones penetra la superficie del semiconductor, la interacción de este con el material se rige por el concepto de conservación de la energía por los siguientes aspectos: absorción, emisión y pérdidas. El esquema de general de la tasa de cambio en el flujo de fotones en el sólido se muestra en la figura 2.19.

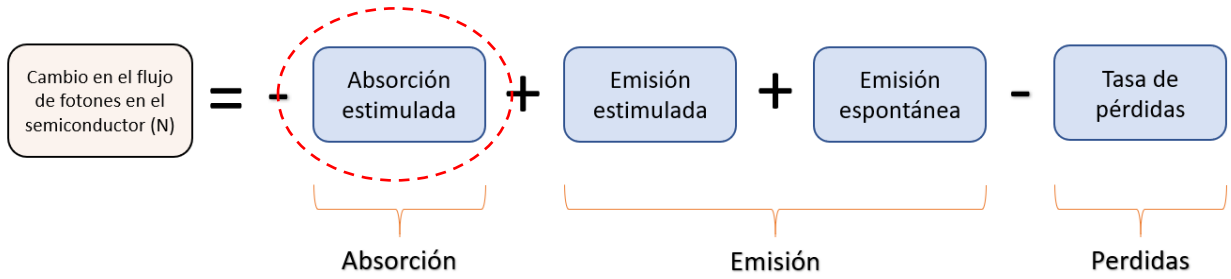


Figura 2.19: Esquema del flujo de fotones durante el impacto del campo óptico en los semiconductores

En donde la tasa de absorción estimulada total del semiconductor tiene que ver con los procesos de emisión total (estimulada y espontánea) y la tasa de pérdidas durante el impacto del campo en el sólido tal como se muestra en la figura 2.20:

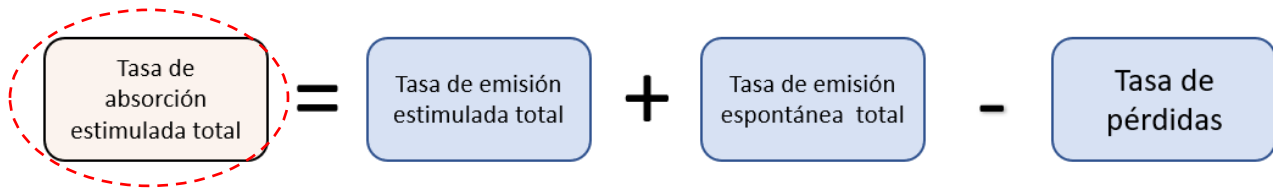


Figura 2.20: Esquema de la tasa de absorción total estimulada total

Esto puede ser expresado en forma matemática de la siguiente forma:

$$v_g \frac{dF_{in}}{dx} = -R_{abs} + R_{estim} + R_{spont} - R_{Loss} \quad (2.115)$$

donde R_{abs} es la tasa total de absorción, R_{estim} es la tasa total estimulada, R_{spont} la tasa total de emisión espontánea, R_{Loss} la tasa total de pérdidas y V_g la velocidad de grupo de fotones en la material.

La tasa de absorción R_{abs} de banda a banda en un semiconductor es la tasa a la cual los electrones de la banda de valencia con energía E' hacen la transición a la banda de conducción con energía E absorbiendo un fotón con energía $h\nu$.

La grafica de energía – momento en un semiconductor con band gap directo se muestra en la figura 2.21.

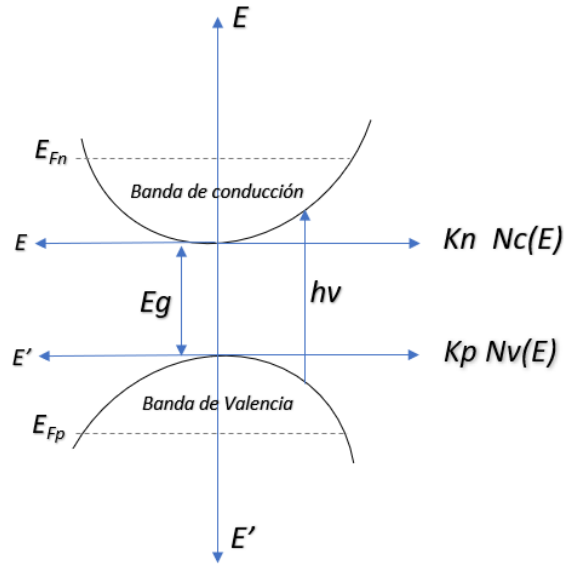


Figura 2.21: Gráfica energía-momento

Aquí, E_{fn} y E_{fp} son los niveles cuasi-Fermis de la banda de conducción y de valencia respectivamente y $N_c(E)$ y $N_v(E)$ son las densidades de estados disponibles en las bandas.

El número de portadores (electrones o huecos) en cada una de las bandas depende de la densidad de estados disponibles en dicha banda $N(E)$ y de las distribuciones de Fermi, multiplicando ambos conceptos.

El número de estado electrónicos en las bandas quedan definidos entonces como:

Electrones (estados electrónicos) disponibles en la banda de valencia.	$N_v(E')f_v(E')$
Electrones (estados electrónicos) no disponibles en la banda de valencia.	$N_v(E')[1-f_v(E')]$
Huecos (estados electrónicos) disponibles en la banda de conducción.	$N_c(E)[1-f_c(E)]$
Huecos (estados electrónicos) no disponibles en la banda de valencia.	$N_c(E)f_c(E)$

2.8.1 Semiconductores con incidencia de luz

Con estas definiciones, podemos escribir las ecuaciones que describen la absorción, la emisión y las perdidas en función de la densidad de estados probables, las probabilidades de Fermi cuando el sólido está estimulado con un campo óptico.

Tasa de absorción:

Considerando que la tasa de absorción es proporcional a la densidad espectral de fotones ($R_{abs} = h\nu F(\nu)$) e incluyendo la probabilidad de absorción estimulada (constante de Einstein) $B(\nu)$, la tasa neta de absorción se puede escribir como:

$$r_{abs} = N_v(E') f_v(E') N_c(E) [1 - f_c(E)] B(\nu) F(\nu) h\nu dE dE' \quad (2.116)$$

donde:

$$f_v(E') = \frac{1}{1 + \exp[(E_{Fp} - E') / kT]} \quad (2.117)$$

$$1 - f_c(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E_{Fn} - E) / kT]} \quad (2.118)$$

son las distribuciones de Fermi-Dirac para la banda de valencia (2.117) y para la banda de conducción (2.118).

Tasa de emisión estimulada Inter banda:

$$r_{stim} = N_v(E') [1 - f_v(E')] N_c(E) f_c(E) B(\nu) F(\nu) h\nu dE dE' \quad (2.119)$$

Tasa de emisión espontanea Inter banda:

$$r_{spt} = N_v(E') [1 - f_v(E')] N_c(E) f_c(E) A_b dE dE' \quad (2.120)$$

Donde A_b es el coeficiente de Einstein para la recombinación espontanea.

Tasa de perdidas:

$$r_{loss} = \frac{F(\nu)\delta\nu}{\tau_{loss}(\nu)} \quad (2.121)$$

Aquí, $(F(\nu)\delta\nu)$ es la tasa de fotones incidentes y es $\tau_{loss}(\nu)$ la constante de tiempo en la cual el fotón si ya no cedió su energía, se desvanece. $(\delta\nu)$ es in intervalo de frecuencias.

Finalmente, integramos dentro de un espectro específico de frecuencias (de V_1 a V_2) de luz incidente para así asegurar la participación de ellas en la transición de estados, y, por otro lado, integramos las tasas individuales en la banda de valencia y conducción para que sean consideradas todas las posibles transiciones para una energía de fotón dada (de 0 a $h\nu$) y así obtenemos las ecuaciones ahora en términos totales dentro de un espectro fotónico.

Las ecuaciones por lo tanto se modifican y quedan de las siguiente forma:

Absorción:

$$R_{abs} = \int_{V_1}^{V_2} B(\nu)F(\nu)h\nu \int_0^{h\nu} N_v(h\nu - E)N_c(E)f_v(h\nu - E)[1 - f_c(E)]dEd(h\nu) \quad (2.122)$$

Emisión estimulada:

$$R_{stim} = \int_{V_1}^{V_2} B(\nu)F(\nu)h\nu \int_0^{h\nu} N_v(h\nu - E)N_c(E)[1 - f_v(h\nu - E)]f_c(E)dEd(h\nu) \quad (2.123)$$

Emisión espontanea:

$$R_{spont} = A_b \int_{V_1}^{V_2} \int_0^{h\nu} N_v(h\nu - E)N_c(E)[1 - f_v(h\nu - E)]f_c(E)dEd(h\nu) \quad (2.124)$$

Perdidas:

$$R_{Loss} = \int_{V_1}^{V_2} \frac{F(\nu) - F_{eq}(\nu)}{\tau_{loss}(\nu)} d\nu \quad (2.125)$$

2.8.2 Semiconductores en equilibrio térmico

Cuando se retira la incidencia de la luz sobre el semiconductor, las condiciones de las ecuaciones anteriores se transforman en:

$$\frac{dF_{in}}{dx} = 0 \quad \text{El cambio de flujo en los fotones es cero}$$

$$-(E_{Fn} + E_{Fp}) = E_g \quad \text{Band gap igual a la diferencia de los niveles de Fermi}$$

$$F(\nu) = F_{eq}(\nu) \quad \text{Densidad espectral fotónica igual a la densidad espectral de fotones en equilibrio.}$$

2.8.3 Cálculo del coeficiente de absorción del pozo cuántico

Para el Cálculo del coeficiente de absorción del pozo, se debe considerar el método de análisis de las transiciones Inter banda de energía-momento que se presentan durante el proceso de absorción. Para ello se han definido tres tipos de selección de momento k que tienen características específicas que los hacen útiles bajo diferentes condiciones. A continuación, se explican cada uno de ellos.

2.8.3.1 Selección estricta de momento k

Las transiciones en esta selección están calculadas para ser en forma vertical pura con momento constante entre E' y E , en donde el estado inicial y el estado final de momento son iguales ($K_n=K_p$). (figura 2.22)

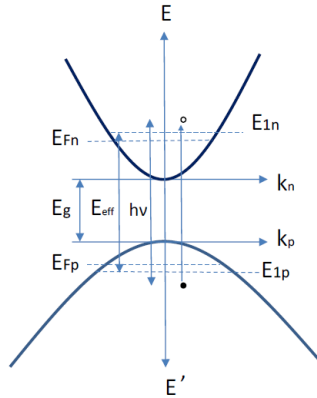


Figura 2.22: Grafico de análisis de las transiciones electrónicas con el método de selección estricta de momento.

Este método, por su implicación simple, reduce y simplifica los Cálculos en las ecuaciones (2.122, 2.123, 2.1124 y 2.125).

Bajo este criterio, y utilizando ecuación de Beer-Lambert, se puede realizar la siguiente comparación:

$$\frac{d\phi(x, \nu)}{\phi(x, \nu)} = \alpha(x, \nu) dx$$

Ecuación de Beer-Lambert

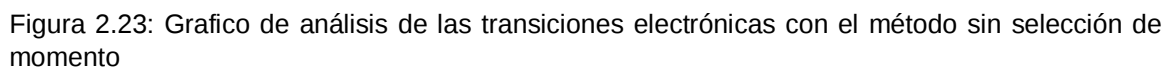
$$\frac{dF_{in}}{F_{in}} = - \frac{1}{v_g} \left[\underbrace{\bar{B}(\nu) \frac{D_{1n} D_{1p}}{L_z^2} a \bar{b} h^2 \delta \nu}_{\alpha(x, \nu)} + \frac{1}{\tau_{loss}} \right] dx$$

Donde $a = \frac{1}{(m_n/m_p)+1}$ y $b=(1-a)$, D_{1n} y D_{1p} son las densidades de estado en los primeros niveles del pozo, Vg es la velocidad de grupo de los electrones y Lz el ancho del pozo. En la selección de momento se considera que la emisión estimulada y la espontánea son cero.

Por lo tanto, el coeficiente de absorción para el método de selección estricta de momento esta expresado por la ecuación siguiente:

(2.126)

En el método no selección de momento, las tasas reales de transición deben de considerar transiciones entre bandas sin tener momento constante, por lo que hay que considerar que todos los estados separados por la energía del fotón están disponibles para las transiciones (figura 2.23).



Se debe considerar que el proceso dominante es el de la absorción y el método requiere considerar entonces cada una de las energías de los fotones incidentes, por lo que hay que considerar el rango o espectro de energías en el que se va a integrar el coeficiente de absorción.

Evaluando (2.122):

79

integrando para todo el espectro de energías E , se obtiene el primer valor integral de la absorción I_{abs} :

$$I_{abs}(E) = \int_0^{h\nu} \frac{D_{1n}(E)}{L_z} \frac{D_{1p}(h\nu - E)}{L_z} \left[\frac{1}{1 + \exp[(E_{Fn} - E)/kT]} \right] \left[\frac{1}{1 + \exp[(E_{Fp} - h\nu + E)/kT]} \right] dE \quad (2.127)$$

definiendo:

$$a = \exp[-(h\nu - E_{Fp})/kT]$$

$$b = \exp[-E_{Fn}/kT]$$

$$y = \exp[E/kT]$$

$$dE = \frac{kT}{y} dy$$

Sustituimos en (2.122) y nos queda:

$$I_{abs}(E) = \frac{D_{1n}(E)}{L_z} \frac{D_{1p}(h\nu - E)}{L_z} b kT \int_1^{1/ac} \frac{1}{1 + by} \frac{1}{1 + ay} dy$$

Resolviendo la integral obtenemos:

$$I_{abs}(E) = \frac{D_{1n}(E)}{L_z} \frac{D_{1p}(h\nu - E)}{L_z} \left[\frac{kT}{1 + \exp[(E_{Fn} - E_{Fp} - h\nu)/kT]} \right] \cdot \ln \left[\frac{(1 + \exp[(h\nu - E_{Fn})/kT])(1 + \exp[(-h\nu + E_{Fp})/kT])}{(1 + \exp[-E_{Fn}/kT])(1 + \exp[E_{Fp}/kT])} \right] \quad (2.128)$$

Por lo tanto, la tasa neta de absorción se puede escribir como:

$$R_{abs} = \bar{B}(\nu) F(\nu) h \delta \nu I_{abs}(E) \quad (2.129)$$

Sustituyendo en la ecuación de balance de energía, considerando solo absorción y las perdidas:

$$v_g \frac{dF_{in}}{dx} = - \left[\overline{B}(v) h I_{abs}(E) + \frac{1}{\tau_{loss}} \right] F(v) \delta v \quad (2.130)$$

Haciendo la misma comparación con la ecuación de Beer-Lambert concluimos que el coeficiente de absorción *sin selección de momento* es:

$$\alpha(v) = \frac{1}{v_g} \left[\overline{B}(v) h I_{abs}(E) + \frac{1}{\tau_{loss}} \right] \quad (2.131)$$

2.8.3.3 Selección parcial de momento

Es una expansión del número de posibles transiciones entre bandas del caso de selección estricta de momento “k” y una restricción del número de posibles transiciones entre bandas del caso sin selección de momento “k”.

Esta selección Incluye los mecanismos de colisión “scattering” o de dispersión que proveen la conservación del momento en transiciones entre bandas y sub-bandas.

Así también, bajo este criterio de selección estricta de momento y por los mecanismos de dispersión, es necesario entonces agregar una función en la función original de absorción, que incluya este fenómeno. A esta función se le conoce como función de peso o función de densidad Cauchy-Lorentz y está representada como $g(E)$. En esta función, se consideran las perturbaciones en los dipolos ópticos y eléctricos del material que modifican la polarización de este. Estas perturbaciones causan que los dipolos se comporten como osciladores, siendo estas oscilaciones causantes de mecanismos para la transición electrónica, los cuales modifican las tasas de transición. La función de distribución Lorentziana esta descrita a traes de la siguiente ecuación:

$$\Phi(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(x-x_0)^2 + \gamma^2} \quad (2.132)$$

En donde podemos ver que X_0 es el parámetro de corrimiento o de localización en donde se puede apreciar el valor máximo de la función Lorentziana (mayor probabilidad del evento).

En la figura 2.28 se observa la gráfica en la que se puede apreciar el cambio de momento y el cambio de energía durante las transiciones electrónicas.

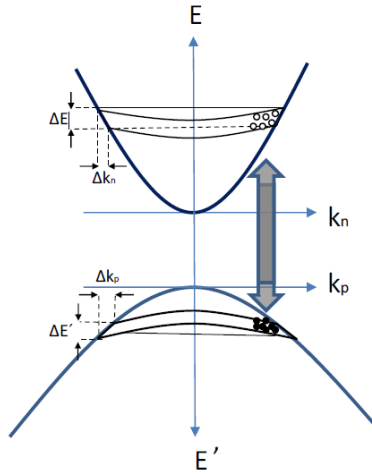


Figura 2.28: Grafico de análisis de las transiciones electrónicas con el método de selección parcial de momento

Al incluir esta función $g(E)$ en la ecuación de absorción R_{abs} , esta se convierte ahora en:

$$R_{abs} = \int_{v_1}^{v_2} B(v)E(v) h\nu \int_0^{h\bar{\nu}} N_v(h\bar{\nu} - E) N_c(E) f_v(h\bar{\nu} - E) (1 - f_c(E)) g(E) dE d(h\nu)$$

Donde $g(E)$ esta descrito como:

$$g(E) = \frac{1}{4} \frac{(h\delta\nu)^2}{(E - E_T)^2 + (h\delta\nu/2)^2} \quad (2.133)$$

Evaluando la integral R_{abs} para la E se obtiene la siguiente ecuación (2.134):

$$I_{abs}(E) = \int_0^{h\nu} \frac{D_{1n}(E)}{L_z} \frac{D_{1p}(h\nu - E)}{L_z} \left[\frac{1}{1 + \exp[(E_{Fn} - E)/kT]} \right] \left[\frac{1}{1 + \exp[(E_{Fp} - h\nu + E)/kT]} \right] \frac{1}{4} \frac{[h\delta\nu(E_{Fn})]^2}{[E - E_T(E_{Fn})]^2 + [h\delta\nu(E_{Fn})/2]^2} dE$$

En donde:

$$h\delta\nu = h\delta_{\max} \left[\frac{1}{1 + \exp[1.5(E - E_{Fn})/kT]} \right] + h\delta_{\min} \left[\frac{1}{1 + \exp[1.5(E_{Fn} - E)/kT]} \right] \quad (2.134)$$

Resolviendo la segunda integral y comparando con la ley de Beer-Lambert, el coeficiente de absorción para la selección parcial de momento queda de la siguiente forma:

$$\alpha(\nu) = \frac{1}{\nu_g} \left[\bar{B}(\nu) h I_{abs}(E) + \frac{1}{\tau_{loss}} \right] \quad (2.135)$$

Capítulo 3 Desarrollo de investigación

3. Propuesta de sistema de celda solar sin pozo cuántico

3.1 Descripción del sistema propuesto

Para este apartado de desarrollo de investigación, se propone el sistema de materiales compuesto de una celda unitaria de Silicio (Si) policristalino de unión np dopada, la cual estará vinculada a dos capas frontales, una capa de vidrio soda-lima (ARC-G) con índice de transmitancia del 80% y superficie antirreflejante junto con una capa de Oxido de Estaño (ITO) que servirá como contacto óhmico para la carga, así también se agrega una capa posterior de aluminio (Al) como contacto eléctrico de carga y barrera. En un segundo bloque, se estudiarán las características del sistema mencionado ahora incluyendo un pozo cuántico, de tal forma que el sistema incluirá una película nanométrica de Germanio (Ge) en la parte central de la zona de depleción de la unión que servirá para confinamiento de cargas.

La figura 3.1 muestra las características del sistema propuesto para nuestro primer análisis en unión np.



Figura 3.1: Estructura del sistema propuesto de celda unitaria sin pozo cuántico.

3.2 Preparación de los materiales

3.2.1 Cálculo del dopaje de los materiales np de la unión

Las muestras de Si fueron proporcionadas por el instituto de ingeniería de la UABC con el fin de obtener su concentración de portadores. De estas muestras solo se tenía información de la resistividad, por lo que fue necesario calcular de manera indirecta el dopaje N y P de cada uno de ellos. Utilizando los valores conocidos para el silicio como la movilidad de los electrones en el material N y la movilidad de los huecos en el material

P, así como la carga del electrón, se calculó la concentración utilizando la de la resistividad eléctrica en un semiconductor descrita como:

$$p = \frac{1}{\rho q \mu_h} \quad (3.1)$$

$$n = \frac{1}{\rho q \mu_e} \quad (3.2)$$

En donde:^[8]

μ es la movilidad de huecos o electrones según sea el caso

Para los electrones $\mu_e = 400 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$

Para los huecos $\mu_h = 1500 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$

ρ es la resistividad eléctrica del material n o del material p

Para el material N $\rho = 2.05 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}$

Para el material P $\rho = 5 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}$

q la carga eléctrica $= 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$

Los resultados del dopaje fueron los siguientes:

Dopaje Material tipo P	$p = 8.3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
Dopaje Material tipo N	$n = 7.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

3.2.2 Definición de capa activa y capa ventana

El Silicio (Si) tiene una banda prohibida también llamada “band gap” (E_g) de 1.12 eV, que es la distancia en términos energéticos entre la banda de conducción y la banda de valencia del Si y está dada en electrón-volts de energía (eV). Esta banda prohibida depende en partes de la concentración de portadores que tenga el material al momento de ser dopado. Existen dopajes bajos que son del orden de 10^{14} , dopajes medios del orden de $10^{16} - 10^{17}$, y altos dopajes, valores que pueden llegar hasta ordenes de magnitud de $10^{20} - 10^{23}$. En la medida que el material semiconductor se dope con mayores ordenes de magnitud, la variación en su banda prohibida se verá más afectada. Este cambio esta descrito a través de la ecuación (101), la cual se utiliza para conocer los cambios de la banda prohibida en función de la variación del dopaje a una determinada temperatura en diferentes materiales semiconductores.

$$\Delta E_g(N) = -\frac{3q^2}{16\pi\epsilon_s} \sqrt{\frac{q^2 N}{\epsilon_s kT}} \quad (3.3)$$

El termino constitutivo ϵ_s es se refiere a la permitividad eléctrica del material. Para nuestro caso, en el Si como material seleccionado en ambas partes de la unión, los parámetros a utilizar son: Permitividad eléctrica de $12\epsilon_0$, donde $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} C^2 / N \cdot m^2$ reduciendo esta ecuación (101) con los valores de $T=300$ °K, la constante de Boltzmann $k = 8.617 \times 10^{-5} eV \cdot K^{-1}$ y la carga eléctrica fundamental $q = 1.602 \times 10^{-19} C$, la ecuación final queda :

$$\Delta E_g = -22.5 \sqrt{\frac{N}{1 \times 10^{18}}} \quad (3.4)$$

El criterio por utilizar para definir el material de la unión que trabajará como material ventana (el que deja pasar el campo óptico a través del sistema) y el material capa activa (con características de absorción del campo) será *el criterio del band gap menor*. Para ello, es necesario calcular en las muestras existentes el valor de la concentración de dopaje para posteriormente calcular la diferencial de banda prohibida que tiene la muestra dependiente de su valor de concentración de portadores y así calcular el E_g de cada uno de los dos materiales de unión np.

El silicio tiene un E_g directo de 1.12 eV. Calculando el diferencial ΔE_g mediante la ecuación 102 para el material N y el material P se obtiene:

$$\begin{aligned} \Delta E_{gp} &= -1.96 \text{ meV} \\ \Delta E_{gn} &= -0.65 \text{ meV} \end{aligned}$$

Sumando este valor de diferencia de banda prohibida al E_g del Si, se obtiene el valor del nuevo E_g de los materiales:

$$\begin{aligned} E_{gp} &= 1.1176 \text{ eV} \\ E_{gn} &= 1.1193 \text{ eV} \end{aligned}$$

Aplicando el criterio del material con menor banda prohibida, concluimos que el material que será utilizado como capa activa será el material tipo P y el material ventana será el tipo N como se indica en la figura 3.2

Material Ventana	Si-N
Material Capa Activa	Si-p

Figura 3.2: Material ventana y material capa activa basado en el criterio del E_g menor

La especificación de N mayúscula en la nomenclatura significa que es el material que tiene el mayor E_g entre los que se están utilizando en la unión.

3.3 Diseño de las características eléctricas

3.3.1 Discontinuidades de energía en las bandas de conducción y de valencia

El diagrama de acoplamiento de unión de banda prohibida en la unión se puede ahora presentar a través de la figura 3.3 como:

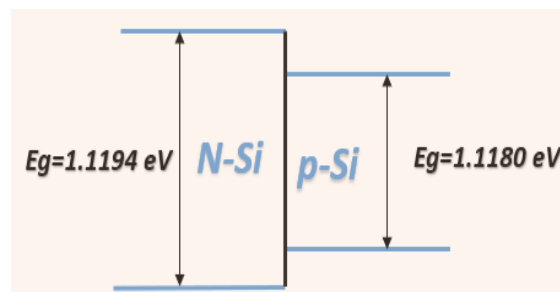


Figura 3.3: Diagrama de banda prohibida después de la unión entre los dos semiconductores

Con estos resultados, las discontinuidades con las bandas de conducción y la banda de valencia se pueden calcular conociendo el diferencial entre las dos bandas prohibidas y multiplicándolo por el porcentaje adecuado. El diferencial de las bandas de energía $\Delta E_g = E_{gp} - E_{gn}$ se aplica en un 60% de la energía hacia la banda de conducción y para la banda de valencia se considera el resto.^[9] Al realizar los Cálculos, el diagrama con la inclusión de las discontinuidades en las bandas queda como lo indica en la figura 3.4.

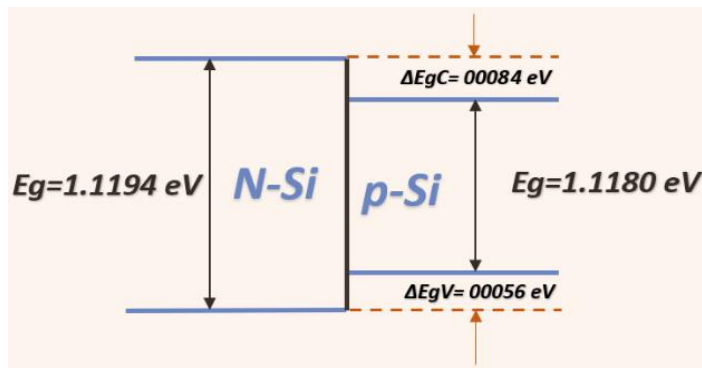


Figura 3.4: Cálculo de las discontinuidades en la banda de conducción y de valencia para la unión de p-Si y N-Si.

3.3.2 Dimensionamiento de la unión np

Debido a que el material utilizado en ambos lados de la unión es Si, el voltaje de contacto se conoce como “built in voltage” y es característico de este tipo de uniones. Este voltaje V_0 depende proporcionalmente de las concentraciones de dopaje y de la concentración intrínseca del material, a una determinada temperatura. La ecuación para el Cálculo de este voltaje es la siguiente:

$$V_0 = \left(\frac{kT}{q} \right) \ln \left(\frac{N_A N_D}{n_i^2} \right) \quad (3.5)$$

La concentración intrínseca del Si a temperatura ambiente esta reportada como $n_i^2 = 1 \times 10^{10}$ [7], utilizando este valor y los valores de los dopajes para cada uno de los materiales de la unión, el Cálculo de V_o nos da un valor de:

$$V_o = 0.650 V$$

Se calcula ahora la zona de depleción total que será la suma de la zona de depleción creada en el material tipo P más la creada en el material tipo N. Es lógico que, desde que el material tipo P es nuestra capa activa, la zona de depleción que se requiere en ella deberá ser mayor a fin de captar más campo óptico y absorberlo.

De acuerdo con la ecuación, la longitud de la zona de depleción en el material P es directamente proporcional al dopaje de “donadores”, contrario a lo que pareciera, para que el material P tenga mayor dimensión en su zona de depleción, deberá haber mayor concentración de donadores (electrones). Esto se explica en la ecuación para el Cálculo de la zona de agotamiento en el lado P. del sistema propuesto que es la siguiente:

$$x_p = \left[\frac{2\varepsilon_p V_o}{qN_D N_a \left(N_D + \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_n} N_a \right)} \right]^{\frac{1}{2}} N_D \quad (3.6)$$

Como se puede observar, la mayor concentración de donadores del dopaje n le da las características de dimensión en forma proporcional. Al incluir los valores de las permitividades eléctricas del Si y el voltaje de contacto obtenido, tenemos que, para este sistema, la zona de depleción en el material tipo P de la unión es de $x_p = 1 \times 10^{-6} m$.

Para la zona de depleción en el material tipo N, la ecuación para calcular la dimensión es:

$$x_n = \left[\frac{2\varepsilon_n V_o}{qN_D N_a \left(N_a + \frac{\varepsilon_n}{\varepsilon_p} N_D \right)} \right]^{\frac{1}{2}} N_A \quad (3.7)$$

donde, al sustituir los datos correspondientes nos queda una dimensión de depleción en el material N de $x_n = 0.11 \times 10^{-6}m$. De tal forma que la suma de las dos dimensiones arroja la dimensión de la zona de depleción total W igual a: $x_w = 1.11 \times 10^{-6}m$.

Por las facilidades de fabricación de un sólido tan pequeño, la recomendación para su elaboración en términos de las dimensiones anteriores son las siguientes:

- a) Para el material tipo P, se propone una dimensión de $10 \mu m$, esto asegura el crecimiento de la zona de agotamiento dentro de la capa y permite fabricarse con mayor facilidad.
- b) Para el material tipo N, se propone una dimensión de $0.11 \mu m$. Esta dimensión es solo para justificar el hecho de que se necesita crear una unión para la generación del campo electromagnético en la zona de depleción, cuidando que no sea tan pequeña que pueda crear un corto circuito en la unión.

De esta forma, el sistema np dimensionado en términos de sus zonas de depleción e incluyendo las dimensiones del Vidrio-ARC, la capa de ITO y la capa posterior de Al, queda como se ilustra en la figura 3.5

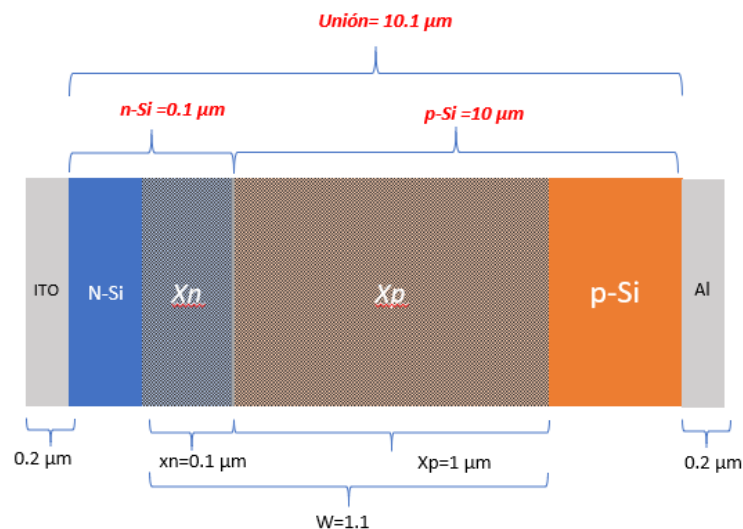


Figura 3.5: Dispositivo dimensionado de unión np-Si con inclusión de contactos óhmicos de ITO y Al en donde las regiones X_n y X_p indican las zonas de depleción en el sistema en equilibrio.

Observar que las dimensiones del ITO y de la capa de Al han sido incluidas, estas se determinaron a partir de las características de los dispositivos comerciales que se utilizan en la fabricación de celdas y estas funcionan como contactos eléctricos de carga.

3.4 Diseño de las características ópticas y de generación de energía

3.4.1 Análisis del campo eléctrico (E) dentro en el material

Para el Cálculo de los excitones, se obtuvieron los índices de refracción complejos de los diferentes materiales de la estructura a través de todo el espectro de longitudes de onda que se utiliza como campo óptico incidente. Con estos datos, se realizó una simulación en la plataforma de Matlab *para calcular los coeficientes de la matriz de transferencia óptica de primer grado* (conocidos también como coeficientes de Fresnel) para cada una de las longitudes de onda propuesta y calcular el campo eléctrico total en la capa activa, la disipación del campo y la generación de excitones, esto para cada una de las longitudes de onda propuestas y a lo largo de todo el espesor de la capa activa.

El barrido que se realizó fue entre las longitudes de onda desde 350 a 800 nm, que es donde el espectro solar incidente tiene su mayor energía irradiada.

Para el Cálculo de los índices de refracción del Si tipo P y N, se utilizaron las muestras que nos proporcionó la universidad y se realizó un estudio de elipsometría en el cual las muestras fueron expuestas a un haz de luz incidente variable en su longitud de onda y se colectaron los patrones de reflexión y extinción. La imagen 3.6 muestra el equipo utilizado que se encuentra en el laboratorio de semiconductores del instituto.



Figura 3.6: Elipsómetro utilizado para el Cálculo de índice de refracción complejos utilizado en Si

Los resultados de los índices de refracción obtenidos para las muestras de Si a través del elipsómetro del laboratorio se muestran en el anexo A.1

Con los índices n y K , se desarrolla un programa para realizar el estudio del campo óptico dentro de la película de p-Si de ancho $10\ \mu\text{m}$. En la figura 3.7 se observa el paso del campo óptico incidente en dicha capa cuando tiene una longitud de onda de $400\ \text{nm}$. La grafica muestra la naturaleza ondulatoria que produce el sentido fasorial de la matriz en sus coeficientes de Fresnel obtenidos.

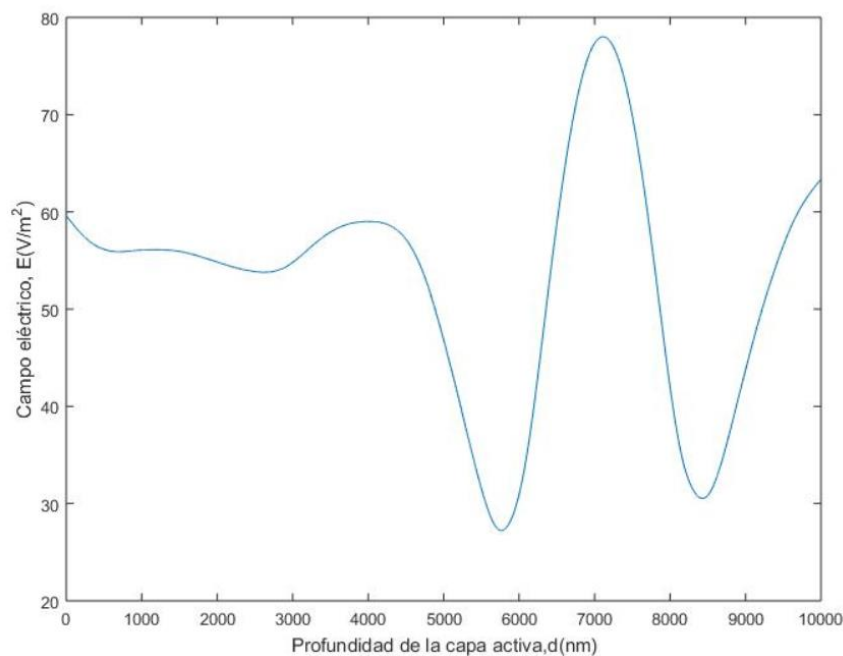


Figura 3.7: Campo eléctrico generado a través en la película capa activa de P-Si de $10\ \mu\text{m}$ de espesor al paso de una longitud de onda de $\lambda = 400\ \text{nm}$

También podemos ver que el campo electromagnético se crea a partir del impacto con la interface de entrada, obteniendo su máximo en espesores alrededor de $7\ \mu\text{m}$ para esta longitud de onda.

El campo total en toda la película, ser obtenido barriendo todas las longitudes de onda desde $350\ \text{nm}$ hasta $800\ \text{nm}$ (espectro de luz visible) en incrementos de 10 , y cambiando el espesor de la película.

Ya obtenido el campo, la distribución del campo eléctrico dentro de la película se muestra en la figura 3.8 como función del espesor de la película y las longitudes de onda incidentes:

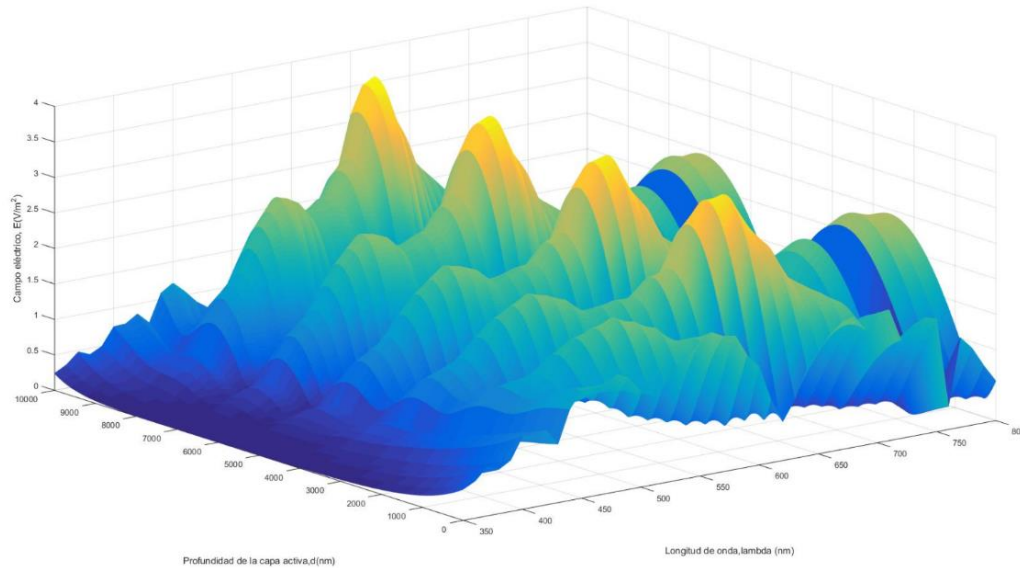


Figura 3.8: Campo eléctrico en el medio capa activa p-Si de 10 μm de espesor al paso del espectro de luz visible.

3.4.2 Disipación del campo eléctrico (Q) (Vector Poynting)

Utilizando el análisis del producto vectorial del campo eléctrico y el campo magnético (vector Poynting) como se analizó en el capítulo 2, se itera todo el espectro dentro del mismo programa para encontrar la disipación del campo dentro de la película, obteniendo la siguiente distribución de la figura 3.9:

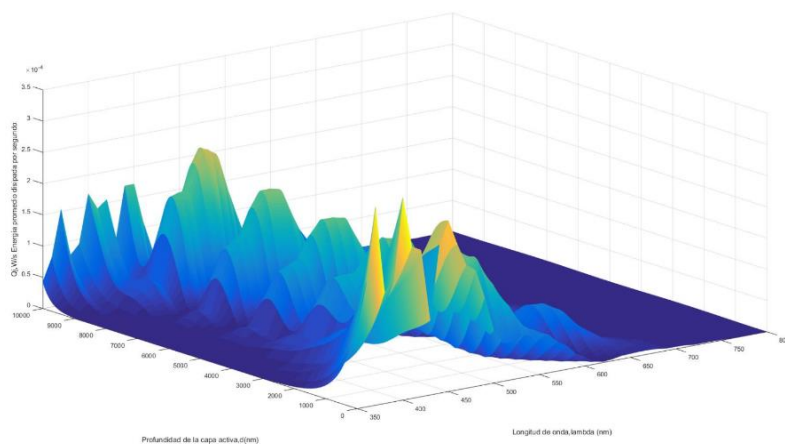


Figura 3.9: Campo disipado en el medio capa activa P-Si de 10 μm de espesor al paso del espectro de luz visible.

3.4.3 Generación de excitones G_L

Finalmente, el Cálculo de la tasa de generación de excitones G_L resulto de la integración de todo el campo disipado dentro del sólido en consideración (capa activa) a lo largo de todo espectro evaluado, esto asumiendo una eficiencia de conversión de 1, dicho valor obteniendo fue:

$$G_L = 4.0867 \times 10^{28} cm^{-3}$$

La grafica tridimensional de la generación de excitones dentro de toda la película de capa activa como función del espesor de la capa activa y de las diferentes longitudes de onda esta mostrada en la figura 3.10:

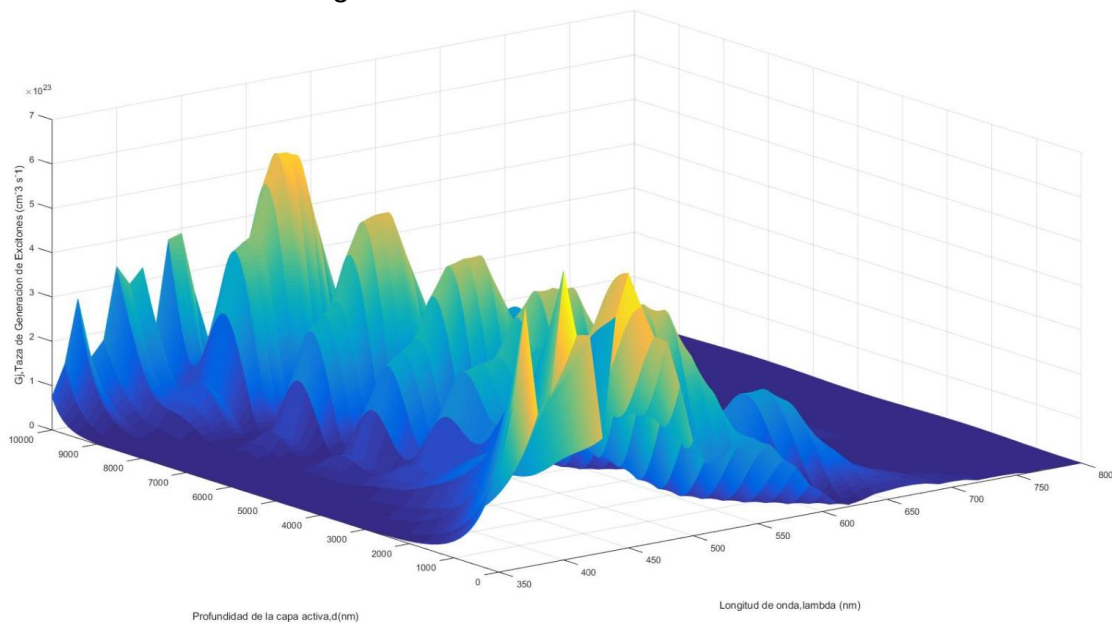


Figura 3.10: Distribución de la tasa de generación de excitones en la película capa activa.

Se observa que, la región del espectro comprendida entre 450nm hasta 525 nm es la porción que tiene mayor generación de excitones a lo largo de toda la película, especialmente en 500 nm. En longitudes de onda mayores de 650 nm, prácticamente no existe ninguna aportación a la tasa de excitones del sistema.

Una gráfica lateral, permite ver los picos de máxima generación de excitones en la película al paso del campo eléctrico la figura 3.11.

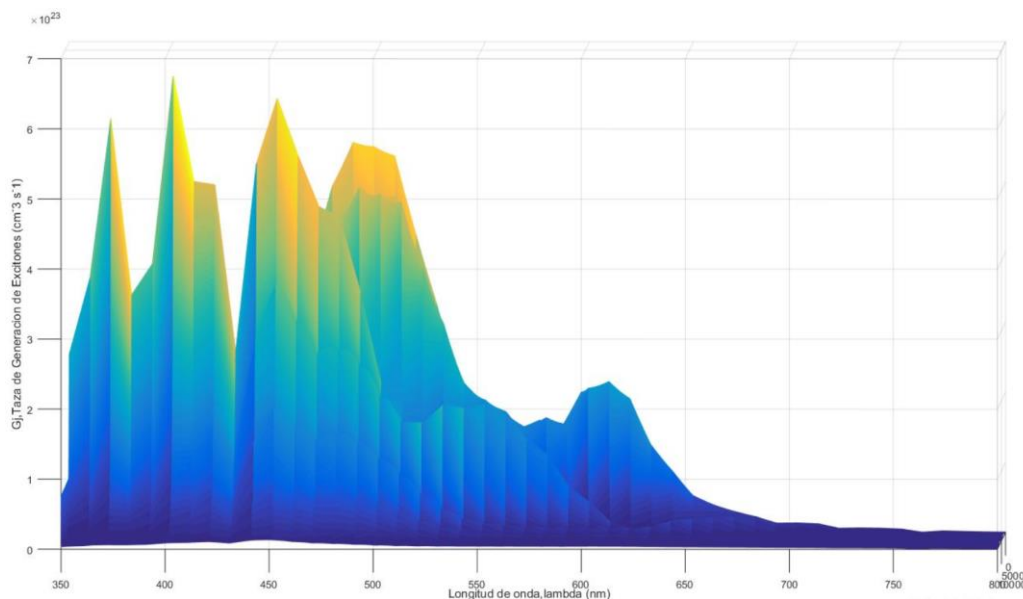


Figura 3.11: Tasa de generación de excitones en la película capa activa vs longitud de onda

3.5 Balanceo de cargas y Voltaje de Poisson con estimulación óptica

El Cálculo del potencial de contacto V_0 en la unión propuesta, es resultado del conjunto de características de los materiales involucrados en términos de las concentración de portadores mayoritarios en estado de equilibrio térmico y químico, es decir, sin estimulación externa. Este voltaje depende directamente de la densidad de portadores de carga y de las características constitutivas de los materiales con el que se trabaja en el dispositivo, como la permitividad eléctrica ϵ , con un nivel de equilibrio libre de estimulación del campo óptico. Sin embargo, cuando la celda se ilumina, la estimulación del semiconductor genera exceso de portadores que influyen en el voltaje de contacto final de la unión. Estos portadores se generan por efectos de la ganancia de energía descrita por la ecuación de Planck. El voltaje de contacto y las condiciones de equilibrio durante este proceso de iluminación de modifican. Al aplicar las ecuaciones de balance de cargas y las ecuaciones de continuidad, podremos conocer las concentraciones de

cargas y el voltaje de Poisson o Voltaje de contacto en la unión formados en un equilibrio electroquímico del semiconductor.

La metodología utilizada para encontrar este balance energético es la aplicación del *método de Gummel* de balance de portadores descrito en el capítulo 2, esto con el fin de encontrar las concentraciones finales de portadores n y p , así como también el nuevo voltaje electrostático en la unión V_0 que cumplan con las condiciones de equilibrio bajo condiciones de iluminación.

El método lleva a cabo iteraciones cíclicas por lo que se realizó un programa de la plataforma MATLAB para realizar estos ciclos internos y obtener los resultados de las iteraciones. La tabla 1 muestra el sumario de valores iniciales y las constantes utilizadas para el Cálculo de las nuevas concentraciones y el voltaje final de Poisson:

Parámetro	Descripción	Valor	Unidad
Constantes Físicas			
G_L	Tasa de excitones generados	4.087E+28	cm^{-3}
T	Temperatura	300	$^{\circ}K$
q	carga elemental del electrón	1.61E-19	C
k	Constante de Boltzmann	8.62E-05	$eV \cdot K^{-1}$
kT	Ruido eléctrico	0.026	eV
ϵ_0	Permitividad eléctrica en el vacío	8.854E-14	$C^2 / N \cdot m^2$
m_0	masa de referencia	9.10E-31	Kg
V_{poiss}	Voltaje inicial de Poisson	7.00E-01	V
ϵ	Constante dieléctrica del Si	11.9 ϵ_0	$C^2 / N \cdot m^2$
n_i	Concentración intrínseca del Si	1.00E+10	cm^{-3}
m_e	Masa del electrón en Si	1.1 m_0	Kg
m_h	Masa del hueco en Si	0.59 m_0	Kg
Para el material tipo P			
N_a	Concentración de dopaje aceptores	8.3E+14	cm^{-3}
D_p	Constante de difusión en P	12	cm^2 / s
τ	Tiempo de latencia del hueco	1.00E-09	s
L_p	Longitud de difusión del hueco	1.10E-04	cm
E_{g_p}	Banda prohibida del material tipo P	1.11176	eV
P_{no}	Portadores minoritarios (e) en Mat P	1.32E+04	cm^{-3}
Para el material tipo N			
N_d	Concentración de dopaje donadores	7.6E+15	cm^{-3}
D_n	Constante de difusión en N	36	cm^2 / s
τ_n	Tiempo de latencia del electrón	1.00E-09	s
L_n	Longitud de difusión del electron	1.90E-04	cm
E_{g_n}	Banda prohibida del material tipo N	1.1194	eV
n_{p0}	Portadores minoritarios (h) en Mat N	1.20E+05	cm^{-3}

Tabla 3.1: Valores de las constantes y parámetros utilizados en el Cálculo de las concentraciones de portadores y el voltaje V_0 de Poisson en la unión propuesta.

La estructura del programa de MATLAB para la solución de las ecuaciones de continuidad y de Poisson por el método Gummel está disponible en el apéndice A.2 al final de esta tesis.

Los resultados generados a través del proceso son los mostrados en la tabla 3.2 siguiente:

Parámetro	Descripción	Valor	Unidad
$n_{(x)}$	Concentración de carga n	$8.12E+16$	cm^{-3}
$p_{(x)}$	Concentración de carga p	$1.22E+16$	cm^{-3}
V_o	Voltaje de contacto Poisson	0.700	V

Tabla 3.2: Concentración de cargas y V_o Poisson obtenidos a través del método de Gummel

Los resultados obtenidos serán de utilidad en la siguiente sección para calcular las características paramétricas de desempeño de la celda unitaria.

3.6 Desempeño de la celda unitaria propuesta

3.6.1 Parámetros eléctricos de desempeño

Como se menciona en el marco teórico, los principales indicadores de desempeño de una celda solar son: La densidad de corriente en corto circuito J_{sc} , el voltaje a circuito abierto V_{oc} , la corriente y voltaje máximos alcanzados, I_{max} y V_{max} respectivamente, la potencia alcanzada por la celda P_{max} , factor de llenado FF y la eficiencia η .

Para el Cálculo de la densidad de corriente y el voltaje a corto circuito, es necesario generar la curva I-V, que proviene de la solución de las ecuaciones de estos parámetros y que está dada en función de las concentraciones de portadores, las longitudes de difusión de los electrones y la generación de excitones obtenida.

De la ecuación de la densidad de corriente para una celda solar podemos despejar el V_{oc} considerando que para cuando existe una densidad de corriente, significa que tenemos un voltaje en terminales llamado V_{oc} . Esta ecuación de corrientes es la que se muestra a continuación:

$$J_1 = qn_i^2 \left[\frac{D_p}{L_p N_D} + \frac{D_n}{L_n N_a} \right] \left(e^{qV_A/kT} - 1 \right) - qG_L (L_p + L_n) \quad (3.8)$$

Para el Voc, igualamos a cero ($J_1=0$) la ecuación anterior y despejamos:

$$V_{oc} = \frac{kT}{q} \ln \left\{ \frac{qG_L(L_p + L_n)}{q \left[\frac{D_p}{L_p} (p_{no}) + \frac{D_n}{L_n} (n_{po}) \right]} + 1 \right\} \quad (3.9)$$

en donde al sustituir los valores obtenidos tenemos que:

$$V_{oc} = 0.521 V$$

El valor de Voc se entiende como el valor de voltaje en las terminales de la celda propuesta sin que esta tenga algún tipo de carga eléctrica que esté actuando sobre el sistema. Del mismo modo, al juntar las terminales eléctricas del circuito propuesto, se generará la máxima corriente posible que proporcionara a la carga, esta es la Jsc. De la ecuación 3.8 ahora despejamos Jsc, haciendo que el valor del voltaje en las terminales se igual a cero, por lo que la ecuación queda de la siguiente manera:

$$J_{sc} = -qG_L(L_p + L_n) \quad (3.10)$$

Al realizar las sustituciones de los componentes de la ecuación, el resultado de la densidad de corriente para esta celda es:

$$J_{sc} = -1.96 A / cm^2$$

Con estos valores se crea la curva I-V de la celda solar mostrada en la figura 3.12, en donde, se puede observar que se realizó un barrido simultaneo de la potencia, el cual se obtiene con la ecuación $P = IV$ para todos los valores obtenidos de voltajes y corrientes en el rango de operación. Ambas curvas se trazaron sobre la misma grafica para obtener los valores de Pmax, Imax y Vmax del sistema.

El factor de llenado se calcula con el uso de la ecuación descriptiva, la cual compara el valor de potencia máxima obtenida, es decir, la potencia útil, con la potencia total de diseño, esta ecuación es la siguiente:

$$FF = \frac{P_{max}}{V_{oc}J_{sc}} \quad (3.10)$$

Al hacer los Cálculos obtenemos:

$$FF = \frac{0.8}{(1.96)(0.521)}$$

$$FF = 0.803$$

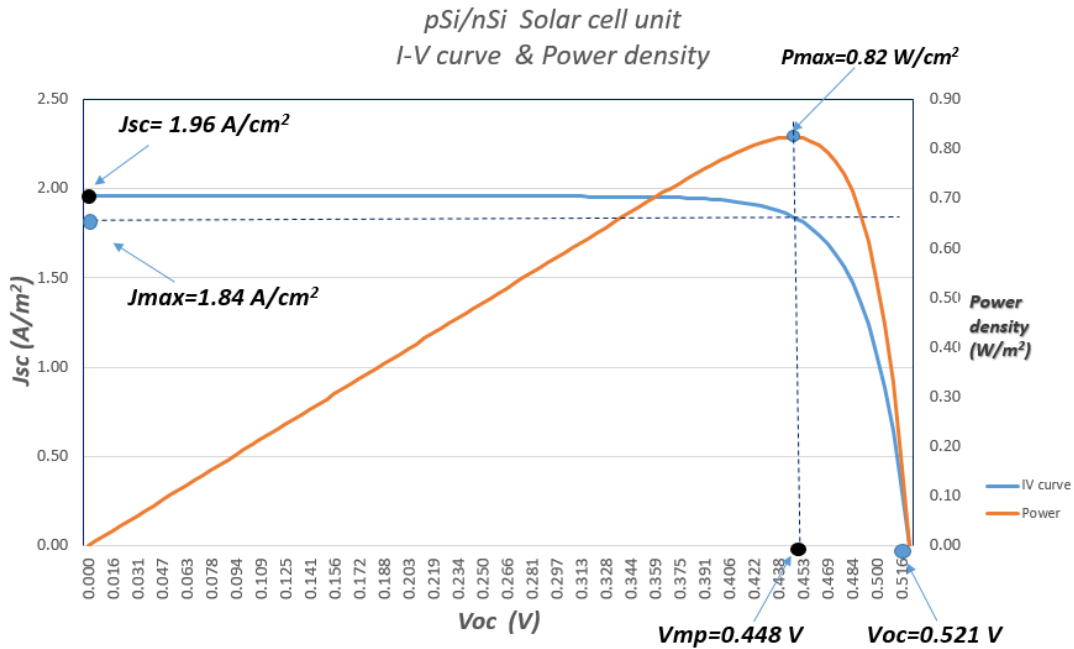


Figura 3.12: Curva I-V de la celda unitaria propuesta que incluye la característica de potencia máxima, Imax y Vmax.

Para el Cálculo de la eficiencia obtenida para la propuesta se utilizó la ecuación (3.11).

$$\eta = \frac{V_{oc}J_{sc}FF}{P_{in}} \quad (3.11)$$

Esta ecuación, calcula la eficiencia en una celda unitaria e incluye la irradiancia incidente, la cual está referida hacia el estándar solar AM1.5 global, de 1000 W/m². Este estándar tiene como superficie de referencia 100 X 100 mm² [13], por lo que se propone un área de dispositivo del tamaño similar de referencia para el Cálculo de la eficiencia. De esta manera, el valor obtenido en la eficiencia de conversión electrónica es:

$$\eta = \frac{(0.521)(1.96)(0.803) \left(\frac{VA}{cm^2} \right)}{0.1 (W/cm^2)}$$

$$\eta = 8.2 \%$$

Lo que indica una eficiencia de 8.2 % de conversión fotónica a eléctrica bajo el estándar AM1.5 global. Los resultados finales se muestran en la tabla 3.3.

Símbolo	Descripción	Valor	Unidad
<i>Jsc</i>	<i>Densidad de corriente en corto circuito</i>	<i>1.96</i>	<i>A/cm²</i>
<i>Voc</i>	<i>Voltaje en circuito abierto</i>	<i>0.521</i>	<i>V</i>
<i>Jmax</i>	<i>Densidad de corriente a máxima potencia</i>	<i>1.84</i>	<i>A/cm²</i>
<i>Vmax</i>	<i>Voltaje a máxima potencia</i>	<i>0.448</i>	<i>V</i>
<i>Pmax</i>	<i>Potencia máxima</i>	<i>0.82</i>	<i>W/cm²</i>
<i>FF</i>	<i>Factor de llenado</i>	<i>0.8</i>	
<i>η</i>	<i>Eficiencia</i>	<i>8.2</i>	<i>%</i>

Tabla 3.3: Resumen de resultados de caracterización de la celda unitaria propuesta en términos de la densidad de energía que genera.

3.6.2 Dimensionamiento final

3.6.2.1 CÁLCULO del ancho W y largo L de la celda unitaria

Los dispositivo convencional de celda unitaria más comúnmente utilizados tienen una dimensión de 100μm X 100μm de área. Para poder dimensionar el ancho y el largo de la celda unitaria (CU), deberemos considerar un valor máximo de corriente total en todo el sustrato, y dividir el área entre el área deseada de la CU, a fin de obtener el valor de Jsc total deseado al sumar todas las pequeñas CU obtenidas en dicha área.

La ecuación que se utiliza para calcular el valor de W (ancho) de la celda unitaria en función de las corrientes que generan es:

$$W = \frac{X\%I_{max}}{L J_{max}} \quad (3.12)$$

Donde X% es el porcentaje de corriente máxima total del dispositivo comercial deseado, el cual se deberá de iterar al fin de alcanzar un valor menor que el área del sustrato total. El valor propuesto de I_{max} para un dispositivo comercial para este caso se propuso 250 mA (0.25 A).

Se propuso un valor de longitud L de fabricación comercial de $100\mu m$.

Desde que la longitud L es $100\mu m$, se considera una fracción de corriente de tal forma que W sea igual o menor de $100\mu m$ (esto para cumplir con el área comercial de $100 \times 100\mu m$).

Al realizar la primera iteración con un valor del 30% por ejemplo de I_{max} obtuvimos:

$$W = \frac{(0.3)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (1.96 A/cm^2)} = 3.82 cm = 38200\mu m$$

El valor obtenido es mucho mayor que la longitud W efectiva total disponible ($38200\mu m > 10000\mu m$), por lo que fue necesario realizar más iteraciones reduciendo el porcentaje de utilización de la I_{max} requerida.

Realizando una segunda iteración con el 15% del valor efectivo de I_{max} se obtiene:

$$W = \frac{(0.15)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (1.96 A/cm^2)} = 1.91 cm = 19100\mu m$$

Nuevamente ($19100\mu m > 100\mu m$). Se realiza una tercera iteración.

Realizando una tercera iteración con el 10% del valor efectivo de I_{max} se obtiene:

$$W = \frac{(0.10)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (1.96 A/cm^2)} = 1.27 cm = 12700\mu m$$

Nuevamente ($12700\mu m > 100\mu m$). Se realiza una cuarta iteración:

Realizando una cuarta iteración con el 7% del valor efectivo de I_{max} se obtiene:

$$W = \frac{(0.07)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (1.96 A/cm^2)} = 0.8928 cm = 8928\mu m$$

Continúa siendo $12700\mu m > 100\mu m$ por lo que realizamos una quinta iteración con 1 % de la corriente I_{max} .

$$W = \frac{(0.01)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (1.96 A/cm^2)} = 0.1275 cm = 1275\mu m$$

Continúa siendo $1275\mu m > 100\mu m$ por lo que realizamos una sexta iteración con 0.075% de la corriente I_{max} .

$$W = \frac{(0.00075)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (1.96 A/cm^2)} = 0.0095 cm = 95\mu m$$

$$95\mu m < 100\mu m$$

Como el valor de W ya es menor que $100 \mu m$, esto indica que cada una de las CU tendrá las dimensiones de acuerdo con la forma comercial de fabricación, y que la corriente máxima que podrá generar será la que resulta de la multiplicación de la J_{sc} (A/cm^2) y el área formada por W y L (cm^2), de tal forma que los Cálculos quedan:

Área del dispositivo final:

$$A = W * L = 100 \times 95 = 9500 \mu m^2 = 9.5 \times 10^{-5} cm^2 \quad (3.13)$$

Corriente máxima (I_{max}) proporcionada por la CU:

$$I_{max} = A * J_{sc} = 9.5 \times 10^{-5} (cm^2) * 1.96 \left(\frac{A}{cm^2} \right) \quad (3.14)$$

$$I_{max} = 0.000186 A = 0.186 mA$$

Se realizaron Cálculos de los parámetros eléctricos finales tales como:

La resistencia máxima (R_{max}) de la CU:

$$R_{max} = \frac{V_{max}}{I_{max}} = \frac{0.448 (V)}{0.000186 (A)} = 2.4 K\Omega \quad (3.15)$$

La potencia máxima (PM) de la CU:

$$P_{maxCU} = P_{max} * A = 0.82 \left(\frac{W}{cm^2} \right) * 9.5 \times 10^{-5} (cm^2)$$

$$\frac{P_{max}}{CU} = 0.0000779A$$

$$\frac{P_{max}}{CU} = 0.078 \text{ mW} \quad (3.16)$$

Los valores obtenidos están resumidos en la tabla 4.

Simbolo	Descripción	Valor	Unidad
L	Largo del dispositivo comercial	100	μm
W	Ancho del dispositivo comercial	95	μm
I _{max}	Corriente maxima por CU	0.186	mA
R _{max}	Resistencia maxima de la CU	2.400	KΩ
PM	Potencia maxima por CU	0.078	W

Tabla 4: Resumen de resultados de caracterización de la celda unitaria propuesta.

En la figura 3.13 se observa la descripción física de la celda unitaria (no a escala) que contiene las capas que la conforman, así como las dimensiones de cada una de ellas, indicando el ancho y el largo total del dispositivo.

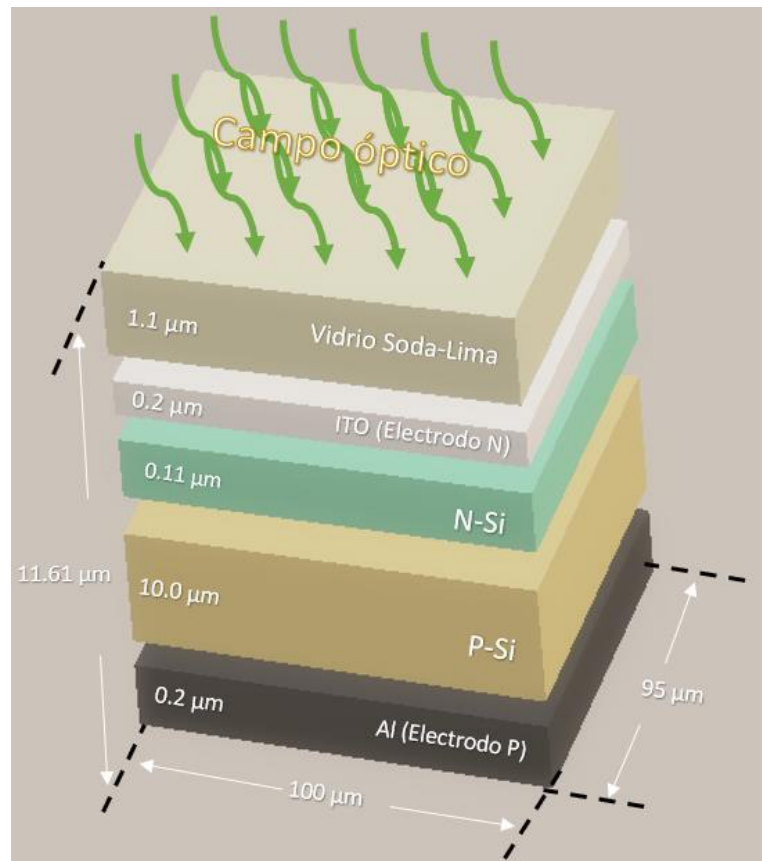


Figura 3.13: Propuesta final de dispositivo de unión np de Si

Capítulo 4 Desarrollo de investigación

4. Propuesta de sistema de celda solar con inclusión de pozo cuántico

4.1 Descripción del sistema propuesto

La figura 4.1 muestra las características del sistema propuesto de unión np con la inclusión de pozo cuántico (QW) de Germanio (Ge), localizado en la en la parte media de la zona de depleción de la capa activa p-Si.

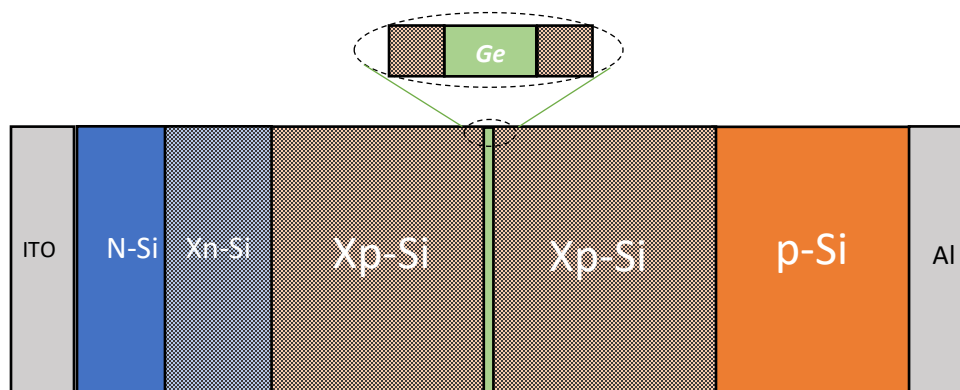


Figura 4.1: Estructura del sistema propuesto de celda unitaria con pozo cuántico de Germanio (Ge).

En este tipo de configuración ahora se involucra un pozo cuántico nanométrico que tiene efectos en la banda prohibida debido a que se crean dos barreras de potencial que encierran un potencial menor, formando un “pozo” de energía que tiene algunas propiedades importantes a dimensiones muy bajas.

Una de las propiedades principales es la formación de niveles energéticos dentro del pozo debido a que ahora, por las dimensiones que tiene, se forman niveles discretos de energía donde se tienen ciertas probabilidades de encontrar electrones.

El diagrama energético de las bandas se modifica de tal forma que se crea un escalón dentro de la gráfica actual de energía. Este escalón es diseñado para confinar cargas en dimensiones nanométricas que contribuyen a la generación de excitones y a la mejora de la eficiencia de la celda.

4.2 Cálculo de los niveles energéticos del pozo dependientes del ancho Z

En la figura 4.2 podemos ver los niveles de banda prohibida para ambos materiales al formar el pozo cuántico cuando se encuentra en estado de equilibrio, esto es, un nivel energético para el Si tipo p de $E_g=1.1178$ eV y de $E_g= 0.66$ eV para el Ge.

De esta forma se propone el pozo en la forma indicada y se empieza con el dimensionamiento del pozo de Ge para darle características de confinamiento de cargas, para ellos, se realiza un análisis con diferentes espesores del pozo (d), desde 100 Å hasta 300 Å en intervalos de 10Å. El método de diseño involucra realizar Cálculos por cada uno de los espesores y calcular los niveles energéticos que se generan en el pozo debido al cambio de su espesor.

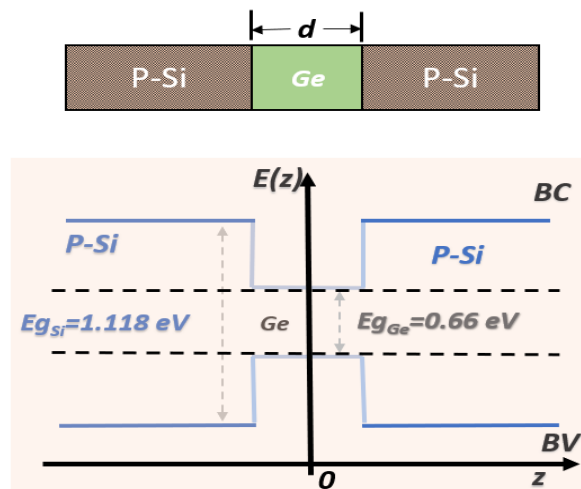


Figura 4.2: Bandas de Valencia y conducción del pozo en estado de equilibrio.

Los niveles energéticos, se calculan a partir de resolver la ecuación de onda de Schrödinger independiente del tiempo y dependiente de x . Estos están localizados en lugares discretos dentro del ancho como se aprecia en la figura 4.3.

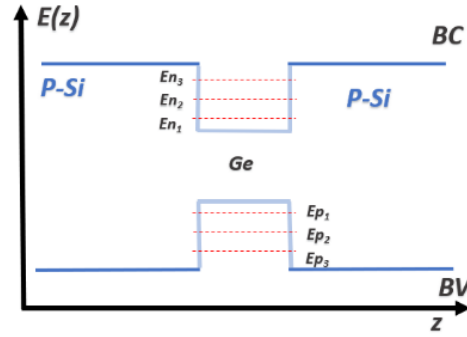


Figura 4.3: representación de los niveles energéticos creados en el pozo dentro de la región formada por la banda de valencia (BV) y la banda de conducción (BC)

Estos niveles discretos de energía se calcularon para el sistema propuesto de P-Si/Ge/P-Si, en la tabla 4.1 se observan los resultados de los dos primeros niveles de energía obtenidos mediante la programación en MATLAB de las soluciones de la ecuación de Schrödinger (ecuación 4.1), graficando la solución del sistema de ecuaciones obtenido y los puntos de intersección entre estos sistemas. Una detallada explicación del Cálculo de estos niveles en forma gráfica se encuentra en capítulo 2, sección 2.7 de esta tesis.

La lista de parámetros utilizados para el Cálculo de los niveles a través del programa de MATLAB es la siguiente:

Símbolo	Descripción	Valor	Unidad
m_{ew}	Masa del electrón en el pozo	$0.5m_0$	Kg
m_{eb}	Masa del electrón en la barrera	$1.1m_0$	Kg
m_{hw}	Masa del hueco en el pozo	$0.37m_0$	Kg
m_{hb}	Masa del hueco en la barrera	$0.59m_0$	Kg
Vo_c	Potencial en la discontinuidad de la banda de conducción	274.8	meV
Vo_v	Potencial en la discontinuidad de la banda de valencia	183.2	meV
$\hbar$	Constante de Planck normalizada	$1.05499E-34$	J.s
eV	Electrón Volt	$1.602E-19$	C
m_0	Masa de referencia	$0.91E-30$	Kg
L	Ancho del pozo	50	Å

Durante el Cálculo, se generan muchos niveles de energía dentro del pozo sobre todo cuando la dimensión del ancho de la película se va incrementando, sin embargo, a partir del tercero, los niveles de energía no aportan significativamente al Cálculo de la

banda prohibida efectiva desde que el diferencial de energía con la discontinuidad de las bandas de conducción y valencia es muy pequeño, por lo que solo se consideran los dos primeros de cada banda de energía para este estudio.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 U(r,t) + V(r)U(r,t) = EU(r,t) \quad (4.1)$$

Primeros dos Niveles de Energía del Pozo P_Si-Ge-P_Si (eV)				
QW(Å)	En ₁	En ₂	Ep ₁	Ep ₂
10	0.1247	0.0000	0.1180	0.0000
20	0.0626	0.2475	0.0678	0.1840
30	0.0368	0.1528	0.0425	0.1599
40	0.0242	0.1005	0.0287	0.1156
50	0.0173	0.0724	0.0216	0.0860
60	0.0108	0.0530	0.0149	0.0652
70	0.0405	0.0594	0.0118	0.0511
80	0.0319	0.0543	0.0064	0.0410
90	0.0262	0.0439	0.0342	0.0767
100	0.0218	0.0512	0.0277	0.0651
110	0.0144	0.0420	0.0547	0.0817
120	0.0361	0.0661	0.0185	0.0542
130	0.0105	0.0565	0.0141	0.0401
140	0.0482	0.0585	0.0347	0.3037
150	0.0240	0.0430	0.0000	0.0559
160	0.0539	0.1203	0.0095	0.0495
170	0.0350	0.0781	0.0043	0.0444
180	0.0274	0.0623	0.0219	0.0393
190	0.0436	0.0631	0.0165	0.0356
200	0.0099	0.056621	0.0526	0.0754
210	0.0052	0.019248	0.0279	0.0461
220	0.0137	0.031277	0.0640	0.0862
230	0.0442	0.058901	0.0386	0.0571
240	0.0374	0.093167	0.0126	0.0741
250	0.0495	0.066452	0.0074	0.0195
260	0.0155	0.035532	0.0143	0.0309
270	0.0094	0.02873	0.0256	0.0439
280	0.0378	0.054798	0.0379	0.0723
290	0.0477	0.065332	0.0508	0.0659
300	0.0580	0.107827	0.0454	0.0797

Tabla 4.1 Cálculo de los dos primeros niveles de energía del pozo cuántico para la BC y la BV.

Conforme el ancho de la película cambia, los lugares donde las posibilidades de encontrar cargas confinadas cambian también, afectando a la banda prohibida efectiva, cambiando su valor y generando mayores o menores probabilidades de confinamiento en el pozo.

4.3 Cálculo de los niveles Cuasi-Fermis

En la teoría de niveles energéticos del pozo cuántico, la posibilidad de encontrar electrones dentro de ciertos niveles está en función de algunos factores que a dimensiones pequeñas generan características y respuestas que ya no son iguales a lo que se presentan en la mecánica clásica. Los electrones, dentro de un régimen nanométrico se localizan en lugares discretos dentro del pozo y eso es consecuencia de que son dimensiones del pozo menores a la longitud de onda de Broglie.

Dentro de los Cálculos del pozo es necesario conocer *las densidades de carga y concentraciones que aporta al sistema*. Así mismo es necesario encontrar el *coeficiente de absorción* que depende de entre otras cosas de los niveles de Fermi que permitirán asegurar la existencia de lugares disponibles para la localización de electrones en forma probabilística y su posterior ganancia de energía. Los niveles de Fermi serán factor importante dentro de la teoría de confinamiento de cargas y su Cálculo se realizará a través de la resolución iterativa de las ecuaciones de balance de cargas 4.2:

$$\left(1 + e^{E_{Fn}/kT}\right) \left(1 + e^{(E_{Fn} - \Delta E_n)/kT}\right) = \left(1 + e^{E_{Fp}/kT}\right)^Z \left(1 + e^{(E_{Fp} - \Delta E_p)/kT}\right)^Z \quad (4.2)$$

Al resolver la ecuación en forma iterativa, utilizando los niveles energéticos obtenidos previamente, se logran obtener los valores de los niveles cuasi-Fermi para los que dicha ecuación se equilibra. Esta ecuación es dependiente del espesor de la película nanométrica, por lo que los niveles cuasi fermi se obtuvieron para cada uno de los anchos de película propuestos. Se realizó un programa iterativo en MATLAB y se corrieron los anchos de película, la tabla 4.2 muestra los valores de los niveles Cuasi fermi obtenidos:

4.4 Cálculo de las concentraciones de carga $n(x)$, $p(x)$ y n_i^2

Con los niveles de energía del pozo ya calculados y con los niveles cuasi-Fermi obtenidos, se calcularon las concentraciones de cargas en las bandas de valencia (BV) y en la banda de conducción (BC). Así también, obtenemos también la concentración intrínseca de las cargas al multiplicar las concentraciones calculadas.

Quasifermis (eV)		
QW(Å)	E_{fn}	E_{fp}
10	0.1227	0.1327
20	0.0626	0.0881
30	0.0368	0.0695
40	0.0242	0.0458
50	0.0173	0.0732
60	0.0108	0.0452
70	0.0405	0.0511
80	0.0319	0.0410
90	0.0262	0.0520
100	0.0218	0.0426
110	0.0144	0.0577
120	0.0361	0.0542
130	0.0105	0.0184
140	0.0482	0.1423
150	0.0240	0.0532
160	0.0539	0.0495
170	0.0350	0.0444
180	0.0274	0.0379
190	0.0436	0.0356
200	0.0099	0.0633
210	0.0052	0.0304
220	0.0137	0.0640
230	0.0442	0.0571
240	0.0374	0.0638
250	0.0495	0.0195
260	0.0155	0.0268
270	0.0094	0.0319
280	0.0378	0.0635
290	0.0477	0.0656
300	0.0580	0.0715

Tabla 4.2: Niveles Quasi-Fermi obtenidos para las dimensiones del pozo de Ge al resolver la ecuación de balance de cargas.

Las ecuaciones para el Cálculo de las concentraciones de carga son:

$$N_i = \frac{m^* K_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_{Fn} - E_i}{K_B T} \right) \right) \quad \text{Para la BC} \quad (4.3)$$

$$P_i = \frac{m^* K_B T}{2\pi \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_i - E_{Fp}}{K_B T} \right) \right) \quad \text{Para la BV} \quad (4.4)$$

donde los valores para el Ge son:

$$m_0 = 9.1093 \times 10^{-31}$$

$$m_n = 0.570 m_0 \quad [10]$$

$$m_p = 0.360 m_0 \quad [10]$$

$$T = 300 \text{ K}$$

$$K = 8.65 \times 10^{-5} \text{ eV/}^\circ \text{K}$$

$$q = 1.601 \times 10^{-19}$$

$$\hbar = 1.054571 \times 10^{-30} \text{ cm}^2 \text{ Kg/s}$$

Se resuelven las ecuaciones para cada uno de los anchos de la película y los resultados con valores se muestra en la tabla 4.3.

La resolución de dichos Cálculos se realizó a través de la creación de un programa en la plataforma MATLAB para obtenerlos en una sola iteración, colocando los valores de los niveles de energía del pozo y los niveles cuasi-fermi en vectores que se iteran dentro de un ciclo repetitivo.

4.5 Potencial electrostático de Poisson V_0 , el V_{bp} y las dimensiones de la zona de depleción

La última serie de Cálculos requeridos para la definición del ancho del pozo son los que se relacionan con el Voltaje de Poisson (V_0), y el voltaje de potencial (V_{bp}). Estos voltajes aseguran tener consistencia en términos de energía cuando los incrementos en las

concentraciones de portadores se ven afectadas cuando se involucran procesos fotónicos en el sólido.

La tabla 4.4 muestra los Cálculos para el Cálculo del voltaje de referencia V_0 resolviendo la ecuación de Poisson en auto consistencia con la ecuación de Schrödinger, sí mismo se calculan las nuevas zonas de depleción y el V_{bp} , que es el voltaje más cercano posible alcanzado al valor de la discontinuidad en la banda de conducción.

<i>Desnsidades de carga (cm^{-2})</i>			<i>Concentracion Intrinseca (cm^{-3})</i>
QW(Å)	$n(x)$	$p(x)$	ni^2
10	3.58E+17	6.26E+16	2.24E+34
20	4.25E+17	9.79E+16	4.16E+34
30	2.81E+17	9.74E+16	2.73E+34
40	2.00E+17	7.69E+16	1.54E+34
50	1.78E+17	6.19E+16	1.10E+34
60	1.35E+17	5.19E+16	7.04E+33
70	9.84E+16	4.83E+16	4.75E+33
80	1.03E+17	4.53E+16	4.69E+33
90	9.67E+16	4.76E+16	4.60E+33
100	1.28E+17	4.49E+16	5.74E+33
110	1.11E+17	4.04E+16	4.49E+33
120	1.15E+17	4.60E+16	5.30E+33
130	1.42E+17	3.96E+16	5.64E+33
140	8.70E+16	2.08E+17	1.81E+34
150	9.85E+16	5.85E+16	5.77E+33
160	1.80E+17	4.87E+16	8.79E+33
170	1.37E+17	4.88E+16	6.69E+33
180	1.23E+17	3.55E+16	4.37E+33
190	9.93E+16	3.65E+16	3.63E+33
200	1.43E+17	3.76E+16	5.39E+33
210	9.18E+16	3.58E+16	3.28E+33
220	9.66E+16	3.82E+16	3.69E+33
230	9.27E+16	3.62E+16	3.36E+33
240	1.60E+17	6.05E+16	9.68E+33
250	9.57E+16	3.30E+16	3.16E+33
260	1.00E+17	3.49E+16	3.49E+33
270	9.90E+16	3.56E+16	3.52E+33
280	9.58E+16	4.37E+16	4.19E+33
290	9.66E+16	3.45E+16	3.33E+33
300	1.49E+17	4.38E+16	6.52E+33

Tabla 4.3: Densidad de carga n y p , así como las concentraciones intrínsecas ni^2 para los diferentes anchos de pozo

	<i>V poisson</i> (V)	<i>Zona de depletion</i> (cm)		<i>W (nm)</i>	(V)
QW(Å)	<i>Vo</i>	<i>xp</i>	<i>xn</i>	<i>W</i>	<i>Vbp</i>
10	0.7157	1.27E-05	2.22E-06	149.35	0.1947
20	0.7346	1.01E-05	2.09E-06	122.24	0.1758
30	0.7209	9.40E-06	3.27E-06	126.67	0.1896
40	0.7059	1.03E-05	3.96E-06	142.68	0.2045
50	0.6973	1.16E-05	4.04E-06	156.32	0.2131
60	0.6857	1.24E-05	4.74E-06	170.99	0.2247
70	0.6756	1.22E-05	5.97E-06	181.40	0.2349
80	0.6752	1.28E-05	5.62E-06	184.45	0.2352
90	0.6747	1.22E-05	6.02E-06	182.66	0.2357
100	0.6805	1.34E-05	4.72E-06	181.49	0.23
110	0.6741	1.40E-05	5.09E-06	191.18	0.2363
120	0.6784	1.30E-05	5.19E-06	181.53	0.2321
130	0.6800	1.48E-05	4.12E-06	189.01	0.2305
140	0.7102	3.79E-06	9.07E-06	128.53	0.2002
150	0.6806	1.07E-05	6.33E-06	169.96	0.2299
160	0.6915	1.35E-05	3.65E-06	171.46	0.219
170	0.6844	1.29E-05	4.59E-06	174.87	0.226
180	0.6734	1.55E-05	4.46E-06	199.36	0.2371
190	0.6686	1.47E-05	5.39E-06	200.45	0.2419
200	0.6788	1.53E-05	4.00E-06	192.93	0.2316
210	0.6660	1.46E-05	5.70E-06	203.42	0.2444
220	0.6690	1.42E-05	5.60E-06	197.68	0.2414
230	0.6665	1.45E-05	5.68E-06	202.34	0.2439
240	0.6940	1.16E-05	4.36E-06	159.17	0.2164
250	0.6650	1.55E-05	5.36E-06	208.83	0.2454
260	0.6675	1.51E-05	5.27E-06	203.85	0.2429
270	0.6678	1.49E-05	5.35E-06	202.51	0.2426
280	0.6723	1.29E-05	5.91E-06	188.35	0.2381
290	0.6663	1.51E-05	5.40E-06	205.36	0.2441
300	0.6838	1.40E-05	4.11E-06	181.19	0.2267

Tabla 4.4: Vo y Vbp calculados a partir de la solución auto consistente de las ecuaciones de Poisson y Schrödinger.

4.6 Selección del espesor del pozo cuántico de Germanio (Ge)

Finalmente, con todos estos datos calculados, se recomienda seleccionar el ancho del pozo de 5 nm, en base al espesor que genera más densidades de portadores como criterio inicial. El segundo criterio fue la selección del ancho del pozo basado en la delta menor obtenida entre el Vbp y con la discontinuidad de la banda de conducción (BC).

El anexo A.3, contiene el sumario de todos los Cálculos. En color naranja, las celdas que indican el proceso de selección y el resultado del espesor bajo los criterios de selección (5 nm).

4.7 Definición y Cálculo del coeficiente de absorción del pozo

De las ecuaciones de conservación de la energía en un pozo, se requiere que los procesos posteriores al impacto del campo óptico y sus efecto en el sólido sigan los principios de la conservación de energía.

En la ecuación que rige el comportamiento dentro del sólido en términos de conservación de energía, el parámetro crítico que se evalúa para conocer la cantidad de energía que puede haber en el intercambio fotónico es el coeficiente de absorción α .

El proceso de transición de electrones de la banda de valencia a la banda de conducción en dimensiones nanométricas se presenta bajo condiciones específicas que involucran la interacción entre la energía y momento de los portadores, existiendo tres tipos de transición que aplican directamente en el Cálculo del coeficiente de absorción: sin selección de momento, selección estricta de momento y selección parcial de momento. En el anexo A.4 se presentan los detalles de las tres diferentes posibilidades de transición y su explicación. Para nuestro Cálculo se decidió utilizar la metodología de la “selección parcial de momento”, en donde, se consideran algunas características del método selección directa de momento” y del método” sin selección de momento”.

Al seleccionar esta metodología, se calculó el coeficiente de absorción del pozo (α) de acuerdo con la ecuación siguiente:

$$\alpha(v) = \frac{1}{v_g} \left[\bar{B}(v) h I_{abs}(E) + \frac{1}{\tau_{loss}} \right] \quad (4.5)$$

en donde se incluyen parámetros tales como la velocidad de grupo V_g , las distribuciones de Fermi que están dentro del factor I_{abs} y que corresponde a la tasa total de absorción definidas en la ecuación de la conservación de la energía, la tasa o razón de perdidas τ_{loss} y los coeficientes de estimulación espontanea $B(v)$. Todos estos parámetros se obtienen como una función de la longitud de onda incidente sobre la película y son dependientes de x y están explicados en el *capítulo 2.8* de esta tesis.

Desde que la longitud de onda central del Ge es 1878 nm (obtenido al sustituir la energía de banda prohibida del Ge en la ecuación de Planck), se entiende que las longitudes de onda por debajo de esta serán las que proporcionará la energía necesaria para la absorción fotónica, por lo que el aporte esperado de absorción de fotones se puede representar junto a la porción de absorción del Si. Esta representación gráfica se muestra en la figura 4.4, junto con algunos otros semiconductores utilizados comúnmente en la electrónica de celdas.^[11]

Los Cálculos del coeficiente de α se realizaron a través del barrido de longitudes de onda incidentes en el espectro de absorción del Ge, los cuales van desde los 1200 a 1900 nm de longitud de onda de acuerdo con las características de absorción.

En la sección en circulo punteado rojo, se puede apreciar el aporte del Ge esperado en la absorción en el espectro de longitudes de onda y que será el espectro del barrido que se estudiará para conocer el coeficiente de absorción del pozo.

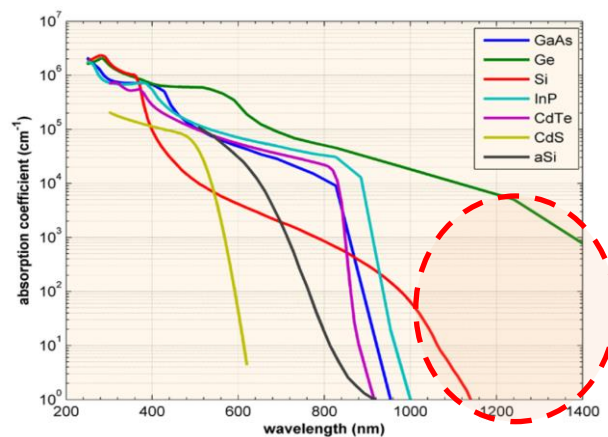


Figura 4.4: Coeficientes de absorción del Si (rojo) y Ge (verde) en bulk.

Se realizó un código de MATLAB para el Cálculo del coeficiente de absorción del pozo a partir de diversas iteraciones respecto a la longitud de onda del espectro propuesto. La grafica en 3D de este coeficiente de absorción se muestra en la figura 4.5 en un intervalo de ancho de película de 15 nm, debido a que películas más grandes que este espesor tienen muy bajo nivel de absorción.

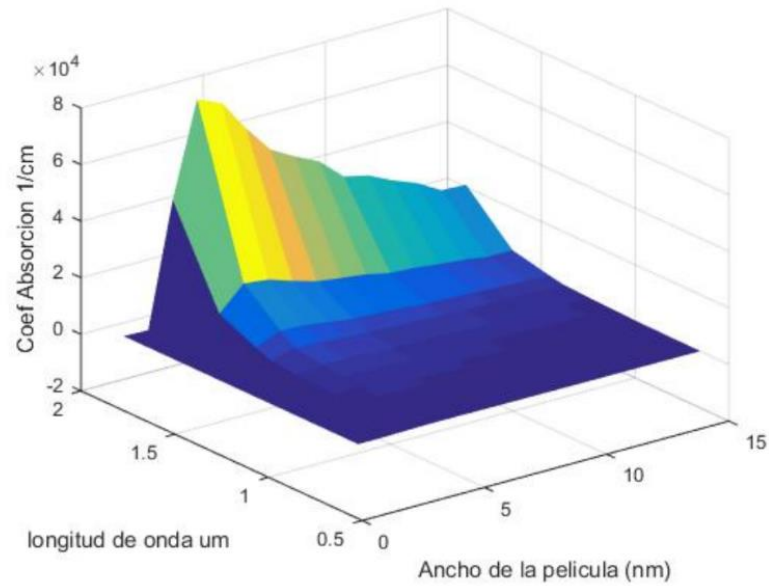


Figura 4.5: Grafica del coeficiente de absorción del pozo cuántico obtenido como función del ancho de la película y de la longitud de onda

En la figura 4.5 se puede observar que las longitudes de onda a las cuales existe mayor coeficiente de absorción en el pozo están comprendidas en el rango de 1400 a 1900 nm como era de esperarse por el patrón de transmitancia del Ge.

Sin embargo, como se puede apreciar en la figura 4.6 los picos mayores de absorción se muestran en dimensiones que están alrededor de los 5 nm. Ante esta situación, se decidió cambiar el espesor del prototipo de 10 nm obtenido en el análisis del balance de cargas y concentraciones de portadores por el de 5 nm que tiene mejores características de absorción.

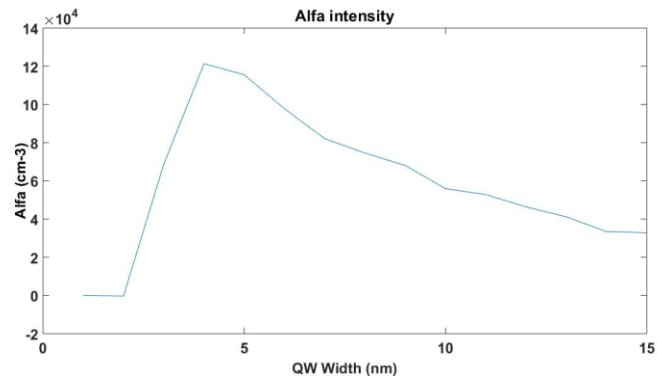


Figura 4.6: Coeficiente de absorción del pozo cuántico Vs dimensión de la película de Ge.

Con este perfil de absorción, se obtuvieron los valores de coeficientes de absorción del pozo para una película de Ge de 5 nm en las longitudes de onda definidas entre 600 y 1900 nm en forma de vectores, con los cuales se calculará la nueva generación de excitones que será el aporte de electrones del pozo y se sumará al sistema integral de unión *np* sencillo para evaluar la generación total de la estructura con pozo cuántico.

4.8 Generación de excitones G_{LQW} del pozo cuántico de pSi/Ge/pSi

Con los valores del coeficiente de absorción obtenidos para el pozo, se calcula el campo eléctrico en la película, la disipación y la generación de excitones, considerando ahora como capa activa la película de Ge. El sistema completo para análisis utilizando el método de matriz de transferencia óptica de primer grado es el mostrado en la figura 4.7 a continuación:

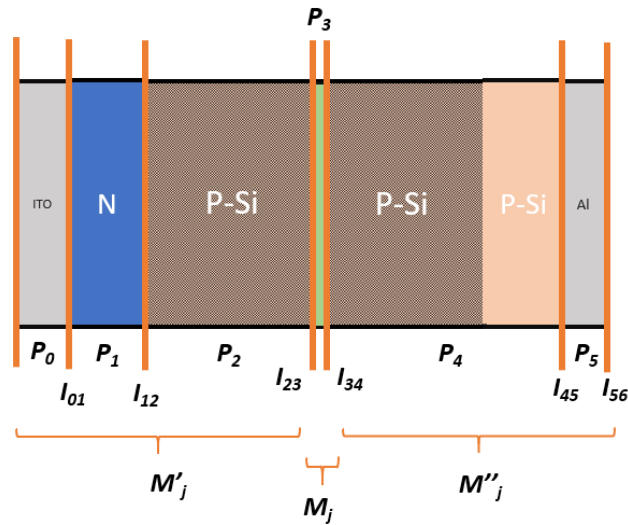


Figura 4.7: Sistema de unión np con inclusión de pozo cuántico de Ge en la zona de depleción del material P-Si.

Se realizó el programa del método de la matriz de transferencia óptica de primer grado en el lenguaje MATLAB para calcular el campo eléctrico, la disipación del campo y la generación de excitones del pozo, obteniendo los siguientes resultados.

4.8.1 Campo eléctrico (E)

Respecto al campo eléctrico, se obtuvo la gráfica en dos y tres dimensiones donde se observan, por un lado, la forma ondulatoria del campo eléctrico dentro de la película cuando se hace incidir una longitud de onda de 1300 nm (Figura 4.8). Por el otro lado, se realizó un barrido a través de toda la capa de 5 nm variando todas las longitudes de onda, desde 600 hasta 1900 nm, para ver la distribución del campo eléctrico en la película (Figura 4.9)

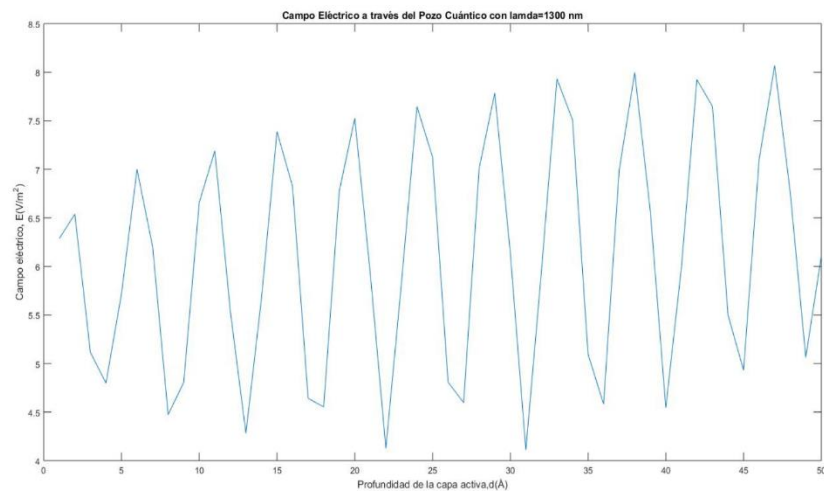


Figura 4.8: Campo eléctrico dentro de la película de 5 nm para un campo de 1300 nm de longitud de onda

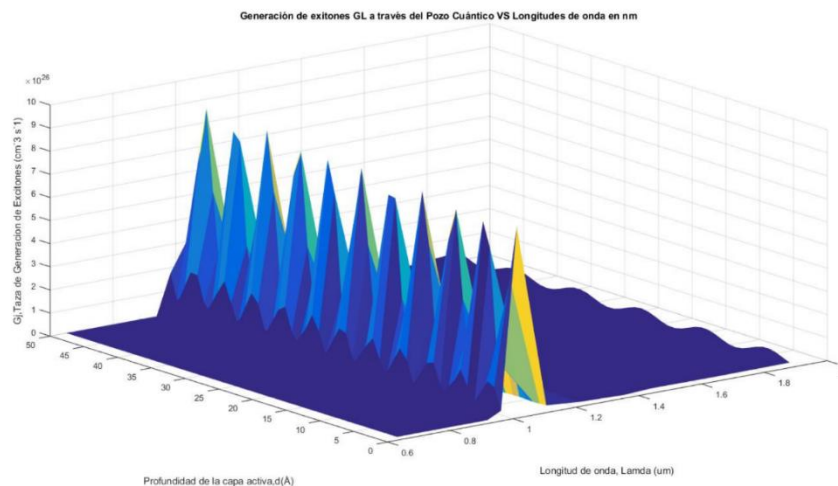
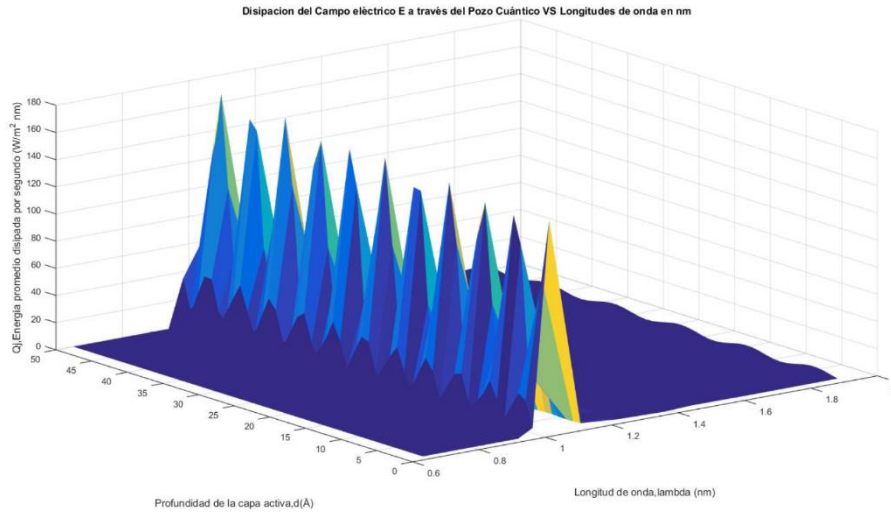


Figura 4.9: Distribución del Campo eléctrico dentro de la película de 5 nm para todo el espectro de 600-1900 nm

4.8.2 Disipación del campo eléctrico (Q)

La disipación del campo eléctrico dentro de la película se muestra en la figura 4.9



4.8.3 Generación de Excitones del Pozo Cuántico (G_{LQW})

Al integrar la disipación del campo eléctrico obtenemos la cantidad de excitones generados por el poco cuántico, la cantidad de excitones generados como resultado de la inserción del campo eléctrico fue:

$$G_{LQW} = 3.38 \times 10^{28} \text{ cm}^{-3}$$

La grafica de la distribución de excitones en la película de Ge a través del espectro dado se aprecia en la figura 4.10.

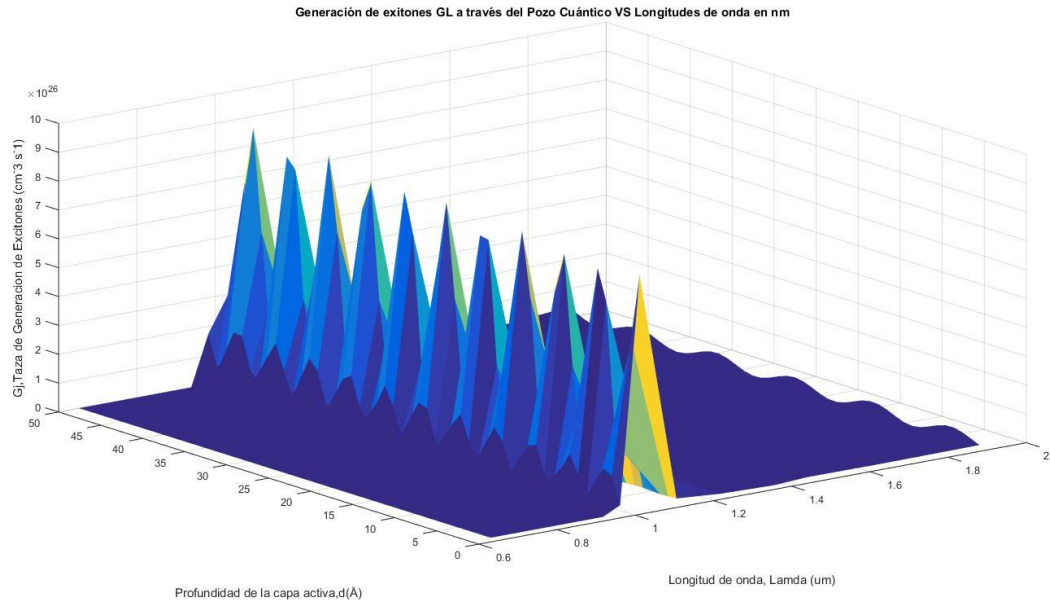


Figura 4.10: Generación de Excitones GL dentro de la película de 5 nm para todo el espectro de 600-1900 nm

4.9 Aportaciones energéticas Totales

4.9.1 Valores totales de G_{LT} (Unión +QW)

La tasa de generación de excitones con pozo cuántico se suma al valor obtenido en la fase de análisis de la unión np sin pozo. La suma de las dos tasas de excitones nos permite conocer la tasa final de electrones generados por los procesos de iluminación de celda np de Si con pozo cuánticos de Ge

El valor obtenido total se confirma de los siguiente:

$$G_{LT} = G_{Lnp} + G_{LQW} \quad (4.6)$$

$$G_{LT} = 4.08 \times 10^{28} + 3.38 \times 10^{28}$$

$$G_{LT} = 7.46 \times 10^{28} cm^{-3}$$

Las concentraciones finales de portadores se calculan sumando las obtenidas durante la caracterización de la unión, más las que se calcularon considerando las

densidades de carga al resolver simultáneamente las ecuaciones de Schrödinger-Poisson para el ancho de película que se está utilizando en el pozo.

4.9.2 Valores totales de densidad de portadores (Unión +QW)

Al tomar la decisión de usar 5 nm, la concentración intrínseca del pozo obtenida para ese ancho de película se calcula multiplicando la densidad de portadores P y los portadores N:

$$n_i^2 = 1.10 \times 10^{34} \text{cm}^{-6}$$

Considerando ahora los resultados de la unión, las densidades de carga calculadas fueron:

$$P(x) = 1.22 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$$

$$N(x) = 8.12 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$$

Por lo que la concentración intrínseca calculada en la unión es:

$$n_i^2 = 9.90 \times 10^{32} \text{cm}^{-6}$$

Así, el valor total de las densidades de carga para el sistema integral será:

$$n_{itotal}^2 = n_{iunion}^2 + n_{iPozo}^2 \quad (4.7)$$

$$n_{itotal}^2 = 1.10 \times 10^{34} + 9.90 \times 10^{32}$$

$$n_{itotal}^2 = 1.2 \times 10^{34} \text{cm}^{-6}$$

4.10 Caracterización del desempeño del sistema con pozo cuántico

El procedimiento de la caracterización de parámetros de desempeño es igual al desarrollado para el sistema de unión sin pozo, la diferencia radica en el valor total de la tasa de generación de excitones que se calculó a partir de la suma de las dos tasas, las de la unión y la del pozo, así como también el uso de la concentración intrínseca total: El valor de la tasa total de excitones como se vio fue de:

$$G_{LT} = 7.46 \times 10^{28} \text{ cm}^{-3}$$

Con este valor, se calcula la densidad de corriente en la celda que esta Esta ecuación de corrientes es la que se muestra a continuación:

$$J = \left[q \frac{D_p}{L_p} p_{no} + q \frac{D_n}{L_n} n_{po} \right] (e^{qV_A/kT} - 1) - qG_L(L_p + L_n) \quad (4.8)$$

Para el V_{oc} , igualamos a cero ($J_L=0$) la ecuación anterior y despejamos:

$$V_{oc} = \frac{kT}{q} \ln \left\{ \frac{qG_L(L_p + L_n)}{q \left[\frac{D_p}{L_p} (p_{no}) + \frac{D_n}{L_n} (n_{po}) \right]} + 1 \right\} \quad (4.9)$$

en donde al sustituir los valores obtenidos tenemos que:

$$V_{oc} = 0.536 \text{ V}$$

Nuevamente, de la ecuación 4.8 hacemos el $V_{oc}=0$ y despejamos J_{sc} , por lo que la ecuación queda de la siguiente manera:

$$J_{sc} = -qG_L(L_p + L_n) \quad (4.11)$$

Al realizar las sustituciones de los componentes de la ecuación, el resultado de la densidad de corriente para esta celda es:

$$J_{sc} = -3.572 \text{ A / cm}^2$$

Con estos valores se crea la curva I-V de la celda solar mostrada en la figura XXX, en donde, se puede observar que se realizó un barrido simultaneo de la potencia, el cual se obtiene con la ecuación $P = IV$ para todos los valores obtenidos de voltajes y corrientes en el rango de operación. Ambas curvas se trazaron sobre la misma grafica para obtener los valores de densidad de P_{max} , I_{max} y el valor del V_{max} del sistema.

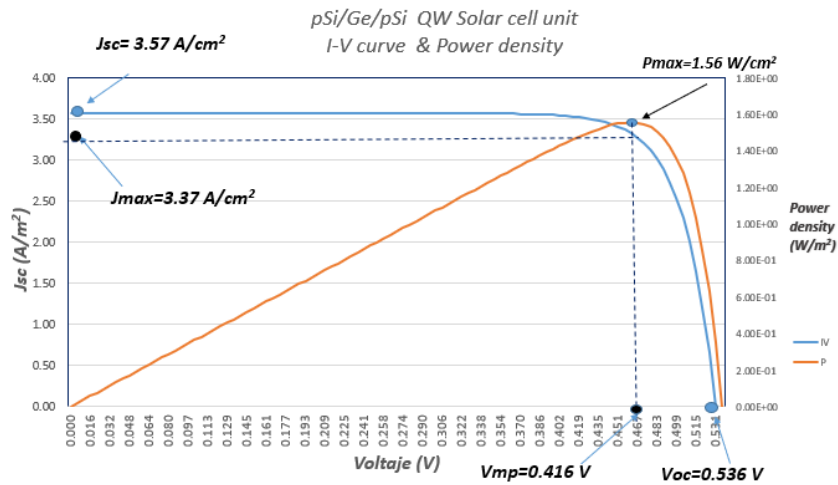


Figura 4.11 Curva I-V de la celda unitaria propuesta que incluye la característica de potencia máxima, I_{max} y V_{max} .

El factor de llenado se calculó con la fórmula para el Cálculo de la razón entre la potencia de máxima y la potencia de diseño.

$$FF = \frac{P_{max}}{V_{oc}J_{sc}} \quad (4.12)$$

Al hacer los Cálculos obtenemos:

$$FF = \frac{1.56}{(0.563)(3.57)}$$

$$FF = 0.776$$

Para el Cálculo de la eficiencia obtenida para la propuesta se utilizó la ecuación (3.11).

$$\eta = \frac{V_{oc}J_{sc}FF}{P_{in}}$$

Esta ecuación, calcula la eficiencia en una celda unitaria e incluye la Irradiancia solar incidente, la cual está referida hacia el estándar solar 1.5AM global, de 1000 W/m². Por lo que se propone un área de dispositivo del tamaño similar de referencia, es decir, de 100 X 100 mm de superficie por lo que el Cálculo de la eficiencia queda:

$$\eta = \frac{(0.536)(3.57)(0.776) \left(\frac{VA}{cm^2}\right)}{0.1(W/cm^2)}$$

$$\eta = 14.86$$

Lo que indica una eficiencia de 14.84 % de conversión fotónica a eléctrica bajo el estándar AM1.5 global. Los resultados finales se muestran en la tabla 4.5.

Resumen de parametros CU Union N-Si/p-Si y Pozo cuantico de Ge			
Simbolo	Descripción	Valor	Unidad
<i>Jsc</i>	<i>Densidad de corriente en corto circuito</i>	<i>3.570</i>	<i>A/cm²</i>
<i>Voc</i>	<i>Voltaje en circuito abierto</i>	<i>0.536</i>	<i>V</i>
<i>Jmax</i>	<i>Densidad de corriente a máxima potencia</i>	<i>3.370</i>	<i>A/cm²</i>
<i>Vmax</i>	<i>Voltaje a máxima potencia</i>	<i>0.416</i>	<i>V</i>
<i>Pmax</i>	<i>Densidad de Potencia máxima</i>	<i>1.560</i>	<i>W/cm²</i>
<i>FF</i>	<i>Factor de llenado</i>	<i>0.776</i>	
<i>η</i>	<i>Eficiencia</i>	<i>14.86</i>	<i>%</i>

Tablas 4.5: Resumen de resultados de caracterización de la celda unitaria propuesta en términos de la densidad de energía que genera.

4.11 Dimensionamiento final

4.11.1 CÁLCULO del ancho W y largo L de la celda unitaria (CU)

Como en el caso de la CU sin pozo cuántico estudiada en el capítulo tres, los dispositivos convencionales de celda unitaria más comúnmente utilizados tienen una dimensión de $100\mu m \times 100\mu m$ de área. Para poder dimensionar el ancho y el largo de la celda unitaria (CU), deberemos considerar un valor máximo de corriente total en todo el sustrato, y dividir el área entre el área deseada de la CU, a fin de obtener el valor de J_{sc} total deseado al sumar todas las pequeñas CU obtenidas en dicha área.

La ecuación que se utiliza para calcular el valor de W (ancho) de la celda unitaria en función de las corrientes que generan es:

$$W = \frac{X\% I_{max}}{L J_{max}} \quad (4.14)$$

Donde X% es el porcentaje de corriente máxima total del dispositivo comercial deseado, el cual se deberá de iterar al fin de alcanzar un valor menor que el área del sustrato total. El valor propuesto de I_{max} para un dispositivo comercial para este caso se propuso 250 mA (0.25 A).

Se propuso un valor de longitud L de fabricación comercial de $100\mu m$.

Desde que la longitud L es $100\mu m$, se considera una fracción de corriente de tal forma que W sea igual o menor de $100\mu m$ (esto para cumplir con el área comercial de $100 \times 100\mu m$).

Al realizar la primera iteración con un valor del 30% por ejemplo de I_{max} obtuvimos:

$$W = \frac{(0.3)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (3.67 A/cm^2)} = 2.04 cm = 20435\mu m$$

El valor obtenido es mucho mayor que la longitud W efectiva total disponible ($20435\mu m > 10000\mu m$), por lo que fue necesario realizar más iteraciones reduciendo el porcentaje de utilización de la I_{max} requerida.

Realizando una segunda iteración con el 15% del valor efectivo de I_{max} se obtiene:

$$W = \frac{(0.15)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (3.67 A/cm^2)} = 1.0217 cm = 10217\mu m$$

Nuevamente ($10217\mu m > 100\mu m$). Se realiza una tercera iteración.

Realizando una tercera iteración con el 10% del valor efectivo de I_{max} se obtiene:

$$W = \frac{(0.10)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (3.67 A/cm^2)} = 1.27 cm = 12700\mu m$$

Nuevamente ($12700\mu m > 100\mu m$). Se realiza una cuarta iteración:

Realizando una cuarta iteración con el 7% del valor efectivo de I_{max} se obtiene:

$$W = \frac{(0.07)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (1.96 A/cm^2)} = 0.6811 cm = 6811\mu m$$

Continúa siendo $12700\mu m > 100\mu m$ por lo que realizamos una quinta iteración con 1 % de la corriente I_{max} .

$$W = \frac{(0.01)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (3.67 A/cm^2)} = 0.0681 cm = 681\mu m$$

Continúa siendo $681\mu m > 100\mu m$ por lo que realizamos una sexta iteración con 0.075% de la corriente I_{max} .

$$W = \frac{(0.0014)\%(0.25 A)}{(0.01 cm) (3.67 A/cm^2)} = 0.009536 cm = 95\mu m$$

$$95\mu m < 100\mu m$$

Como el valor de W ya es menor que $100 \mu m$, esto indica que cada una de las CU tendrá las dimensiones de acuerdo con la forma comercial de fabricación, y que la

corriente máxima que podrá generar será la que resulta de la multiplicación de la J_{sc} (A/cm^2) y el área formada por W y L (cm^2), de tal forma que los Cálculos quedan:

Área del dispositivo final:

$$A = W * L = 100 \times 95 = 9500 \mu m^2 = 9.5 \times 10^{-5} cm^2 \quad (4.15)$$

Corriente máxima (I_{max}) proporcionada por la CU:

$$I_{max} = A * J_{sc} = 9.5 \times 10^{-5} (cm^2) * 3.57 \left(\frac{A}{cm^2} \right) \quad (4.16)$$

$$I_{max} = 0.00034 A = 0.34 mA$$

Se realizaron Cálculos de los parámetros eléctricos finales tales como:

La resistencia máxima (R_{max}) de la CU:

$$R_{max} = \frac{V_{max}}{I_{max}} = \frac{0.416 (V)}{0.00034 (A)} = 1.22 K\Omega \quad (4.17)$$

La potencia máxima (PM) de la CU:

$$P_{maxCU} = P_{max} * A = 1.56 \left(\frac{W}{cm^2} \right) * 9.5 \times 10^{-5} (cm^2)$$

$$\frac{P_{max}}{CU} = 0.000148 A$$

$$\frac{P_{max}}{CU} = 0.148 mW \quad (4.18)$$

Los valores obtenidos están resumidos en la tabla 4.6

Simbolo	Descripción	Valor	Unidad
L	Largo del dispositivo comercial	100	μm
W	Ancho del dispositivo comercial	95	μm
I _{max}	Corriente máxima por CU	0.340	mA
R _{max}	Resistencia máxima de la CU	1.220	K Ω
PM	Potencia máxima por CU	0.148	W

Tabla 4.6: Resumen de resultados de caracterización de la celda unitaria de Si con pozo cuántico de Ge.

En la figura 4.12 se observa la descripción física de la celda unitaria (no a escala) que contiene las capas que la conforman, así como las dimensiones de cada una de ellas, indicando el ancho y el largo total del dispositivo.

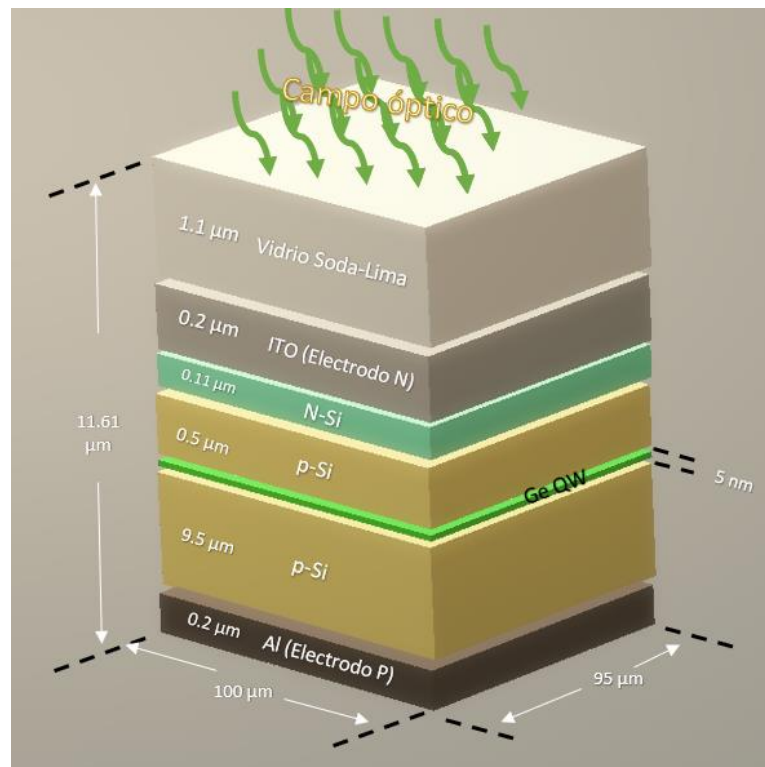


Figura 4.12: Propuesta final del sistema de materiales para fotodetector unitario de unión np con inclusión de pozo cuántico en la región de depleción del material absorbedor.

Capítulo 5 Desarrollo de investigación

5. Enfriamiento óptico del dispositivo

5.1 Introducción al enfriamiento óptico de semiconductores

En 1929, Pringsheim fue reconocido por demostrar que la energía vibracional térmica podía ser removida por frecuencias de fluorescencia anti-stokes si el material era excitado con fotones con energía menor que la media de la energía de fluorescencia.^[3]

Esto es conocido como “enfriamiento óptico” por conversión ascendente de luminiscencia. Sin embargo, resultados confirmados fueron establecidos hasta 1995 utilizando muestras dopadas de Iterbio (Yb) y Talio (Tl) dopadas. En 1997, Gauck propuso la refrigeración óptica fabricando dispositivos semiconductores con auto enfriamiento donde el dispositivo semiconductor y el dispositivo enfriador podrían ser crecidos en el mismo sustrato.^[17]

En los mecanismos de luminiscencia de conversión ascendente para semiconductores burdos, los electrones de la banda de valencia realizan una transición a la banda de conducción por la absorción de fotones con energía $h\nu$ provenientes de una luz incidente. Los electrones de la banda de conducción experimentan un intercambio de energía debido a las colisiones inelásticas existentes en la red, absorbiendo vibraciones térmicas en el material. Después de obtener esta energía, los electrones de la banda de conducción “caen” hacia la banda de valencia emitiendo una luz incoherente movida hacia el azul en forma de fotón con energía $h\nu_f$ la cual es generada a través de recombinación radiativa, retirando de esta forma el calor del material. Como resultado, el material es enfriado por un haz incidente de luz ^[12]. Este mecanismo de enfriamiento está explicado en forma esquemática en la figura 5.1. Las características eléctricas de los semiconductores permiten pensar que a través de ellos existe un gran número de procesos atómicos que al presentarse incrementan su temperatura interior y el diferencial de temperatura con respecto al medio que los rodea es mayor.

Los semiconductores obedecen a las estadísticas de Fermi – Dirac. Así, la banda de valencia de menor energía permanece llena incluso en el cero absoluto. Por lo tanto, los semiconductores tienen el potencial de alcanzar temperaturas más bajas que los alcanzados por el muestras dopadas.

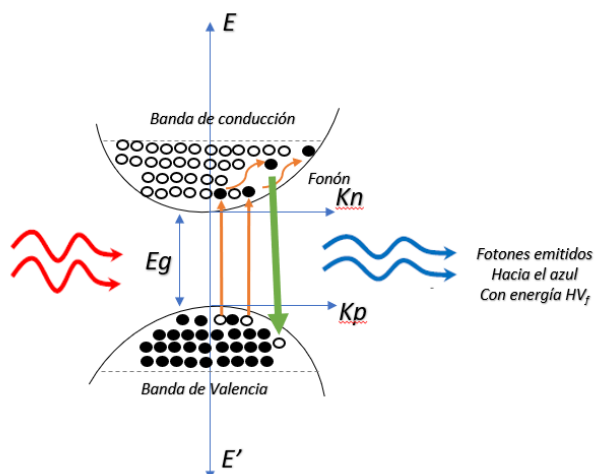


Figura 5.1: Mecanismo del ciclo de enfriamiento con iluminación en un semiconductor burdo

El mayor reto de los semiconductores para alcanzar temperaturas por debajo de 10 K es que, a estas temperaturas de la red, el componente fonón acústico domina y la tasa de dispersión se hace comparable a la tasa de transición radiativa de banda a banda. Esto permite la transición radioactiva de banda a banda antes de completar la termalización de la red cristalina. Este problema puede ser mejorado de manera significativa al emplear sistemas confinados cuánticamente, donde la relajación de la conservación del vector de onda en la dirección confinada reduce la conductividad del material en casi tres órdenes de magnitud. [16]

Aunque estudios anteriores han mostrado resultados teóricos y experimentales de las características de enfriamiento para semiconductores [3], la transición de banda a banda debido a la absorción de fotones o la emisión de fotones, en condiciones de enfriamiento en sistemas de semiconductores confinados cuánticamente, que exhiben efectos cuánticos en las dimensiones de varios nanómetros no han sido completamente analizados en estudios teóricos convencionales.

Cuando un electrón está confinado dentro de una estructura semiconductor nanométrica de tamaño comparable a la longitud de onda de De Broglie del electrón, su propagación está limitada en una dirección, y el electrón puede ser descrito por una onda estacionaria. La energía electrónica en la dirección de confinamiento no es continua, sino que, su espectro consiste en un conjunto de niveles de energía separados discretos.

En la literatura, hetero estructuras de baja dimensión de un pozo cuántico simple o de múltiples pozos cuánticos, donde los portadores son inyectados en la región activa y son mecánicamente confinados en una dimensión, han sido reportadas como potenciales alternativas para evitar la tasa de dispersión de las componentes acústicas del fonón, siendo comparables con la tasa de transición radiativa Inter banda.^[12] Enfriamiento neto de alrededor de 40 K ha sido reportado nano bandas o nano cintas^[18].

Sin embargo, la comprensión y diseño de estas estructuras de baja dimensión para enfriamiento de semiconductores requiere Cálculos precisos en parámetros fundamentales como niveles de energía discretos dentro de los pozos (E_n y E_p), longitud de onda efectiva de absorción (λ_{eff}), posición de los cuasi-fermi, coeficiente de absorción fotónica dependiente de la longitud de onda (α), fotoluminiscencia (PL), densidad de potencia de enfriamiento (P) y el diferencial de temperatura (ΔT).

5.2 Análisis y Cálculos

5.2.1 Fotoluminiscencia espectral (PL)

Cuando el flujo de fotones ha pasado a través de la superficie del material, la estimación de la generación de los pares electrón-hueco está determinada por la tasa de recombinación no radiativa (AN), la tasa de recombinación radiativa (BN^2) y la tasa de generación Auger (CN^3). Epstein^[3] menciona que solo una fracción de la luminiscencia η_e total puede ser emitida fuera del material, mientras que el remanente de luminiscencia ($1-\eta_e$) se queda atrapada y es reciclada.

El balance energético, la tasa de generación electrón-hueco con la recombinación de fotones, puede ser escrita de la siguiente manera: ^[3]

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\alpha(v)I}{hv} - AN + BN^2 - CN^3 + (1 - n_e)BN^2 \quad (5.1)$$

La ecuación 5.1 describe el cambio en la densidad N de electrón-hueco como una función del tiempo. El termino $\alpha(v)$ es el coeficiente de absorción entre las bandas, llamado “coeficiente de absorción Inter banda”, y el último término $(1 - n_e)BN^2$ representa el incremento de N a consecuencia de la reabsorción de la luminiscencia.

Bajo condiciones de estado estable (sin iluminación) la tasa de generación N es cero y la se puede reescribir como:

$$0 = \frac{\alpha(\nu)I}{h\nu} - AN + n_e BN^2 - CN^3 \quad (5.2)$$

El término n_e , el cual es la emisión de luminiscencia se calcula utilizando la tasa promedio de emisión en todo el intervalo de longitudes de onda como:

$$n_e = \frac{\int S(\nu)R(\nu)}{\int R(\nu)} \quad (5.3)$$

en donde el termino $S(\nu)$ es la probabilidad de emisión de fotones con energía $h\nu$ que es dependiente de la geometría del material y $R(\nu)$ es la densidad de fotoluminiscencia espectral.^[3]

La ecuación 5.3, se pueden relacionar el coeficiente de absorción a través de la relación de no equilibrio de van Roosbroeck-Shockley mejor conocida como relación KMS (Kubo-Martin-Schwinger) ^[12].

$$R(\nu, N) = \frac{8\pi n^2 \nu^2}{c^2} \alpha(\nu, N) \left(\frac{f_v(1-f_v)}{f_v - f_c} \right) \quad (5.4)$$

en donde $R(\nu, N)$ representa la densidad de fotoluminiscencia espectral del sólido, c es la velocidad de la luz y n es el índice de refracción del material y los términos F_v y F_c son las distribuciones de Fermi en las bandas de valencia y conducción respectivamente.

El análisis de la ecuación KMS y los detalles de su proceso electrónico dentro de los semiconductores se explica en el capítulo 2.7

Utilizando los coeficientes de absorción obtenidos para todo el rango de longitudes de onda y las funciones de Fermi-Dirac a partir de las condiciones de energía calculadas, se resuelve la función de densidad de fotoluminiscencia espectral $R(\nu, N)$ para diferentes espesores (figura 5.2).

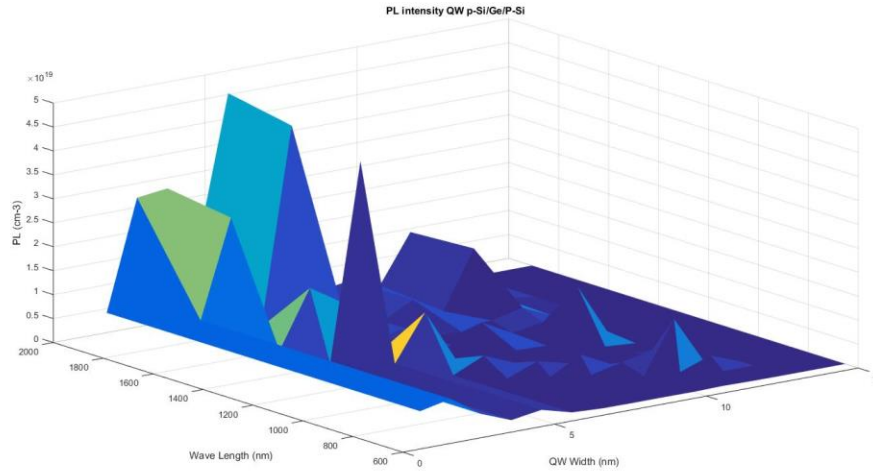


Figura 5.2: Densidad de fotoluminiscencia espectral (PL)
para el pozo cuántico p-si/Ge/p-Si

Niveles significativos de foto emisión para anchos de película menores a 8 nm son generados (figura 5.1), esto hace sentido porque los niveles energéticos del pozo cuántico se incrementan cuando el ancho del pozo se reduce. El pico máximo de generación de fotoluminiscencia se observa en longitudes de onda cercanas a 1900 nm, al mismo tiempo, confirma la hipótesis de mayor emisión cuando la película de Ge tiene un espesor de 5 nm (figura 5.3), propuesta que se revisó en capítulo 4.

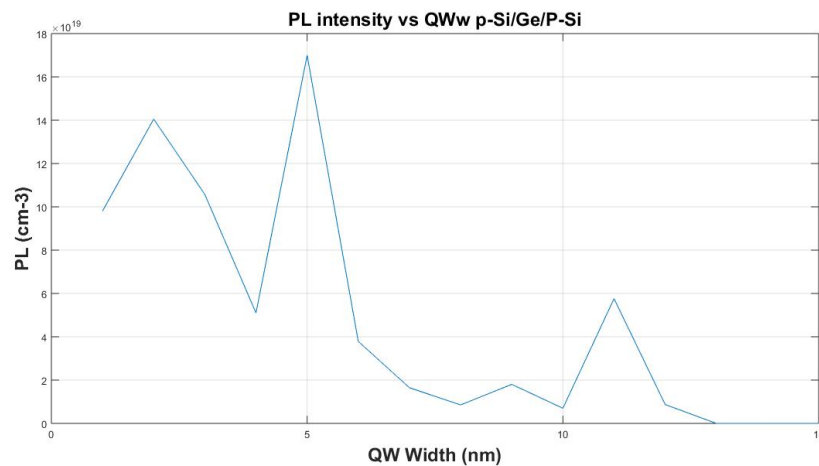


Figura 5.3: Emisión de PL en la película de 5 nm de Ge

5.2.2 Potencia neta (Pnet)

La potencia neta (P_{net}) que es depositada en el semiconductor es la diferencia entre la potencia absorbida por el impacto óptico (P_{abs}) y la luminiscencia de emisión del (P_{le}) que esta expresada a través de la siguiente ecuación:^[3]

$$P_{net} = P_{abs} - P_{le} = [[\alpha I + \Delta P]] - [n_e B N^2 k \tilde{\nu}_f] \quad (5.5)$$

El termino ΔP se incluye en la ecuación debido a las absorciones parasitas que se presentan dentro del material por exceso de portadores entre otras, el termino $k \tilde{\nu}_f$ es la fotoluminiscencia que escapa del material en la media de la energía luminiscente.^[12]

Realizando el Cálculo de la potencia neta, considerando $\Delta P=0$, se obtiene datos de longitud de onda por Potencia (figura 5.3).

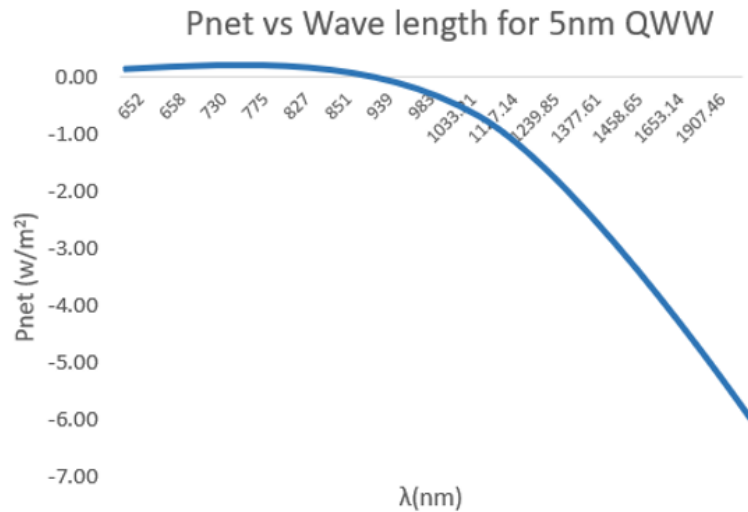


Figura 5.3: Pico de PL espectral para en la película de 5 nm de Ge

Si la diferencia entre la potencia de absorción y la potencia de emisión por fotoluminiscencia es negativa, significa que existe una mayor tasa de liberación de

energía por emisión (PeI). Debido a esto, podemos deducir que la refrigeración óptico comienza en los valores donde $P_{net} < 0$, aproximadamente a partir de los 1000 nm de longitud de onda, donde se obtienen valores negativos de la potencia.

5.2.3 Diferencial de temperatura (ΔT)

El cambio de temperatura observado está definido como $\Delta T = T_s - T_R$, donde T_s y T_R son las temperaturas del dispositivo y de su entorno respectivamente. ΔT es una expresión que relaciona la temperatura en estado estable alcanzada por el sistema propuesto con la carga neta obtenida desde los alrededores a esa temperatura. Así, la ecuación 5.5 puede ser relacionada con la carga térmica de la absorción neta del material a temperatura ambiente de la siguiente forma ^[12]:

$$\Delta T = - \frac{[\alpha(v)I + \Delta P] - [n_e B N^2 h \bar{\nu} f]}{4A_v \epsilon_{eff} \sigma_B T_R^3} \quad (5.6)$$

En donde A_v es el volumen neto del sólido, ϵ_{eff} emisividad efectiva, σ_B es la constante de Stefan- Boltzmann.

La figura 5.4 muestra el gradiente de temperatura ΔT obtenido considerando un volumen de $A_v = 10.1 \text{ cm}^3$ y una temperatura ambiente de $T = 300 \text{ °K}$, considerando una emisividad efectiva de $\epsilon_{eff} = 1$.

Para 5 nm de ancho de película, se observa la tendencia del gradiente de temperatura para todo el rango de longitudes de onda analizado. Se aprecia que la tasa de variación de la temperatura se incrementa a partir de 1000 nm , manteniéndose casi estable en longitudes menores a esta. Los valores de la variación de temperatura se encontraron entre 15 a 30 °K .

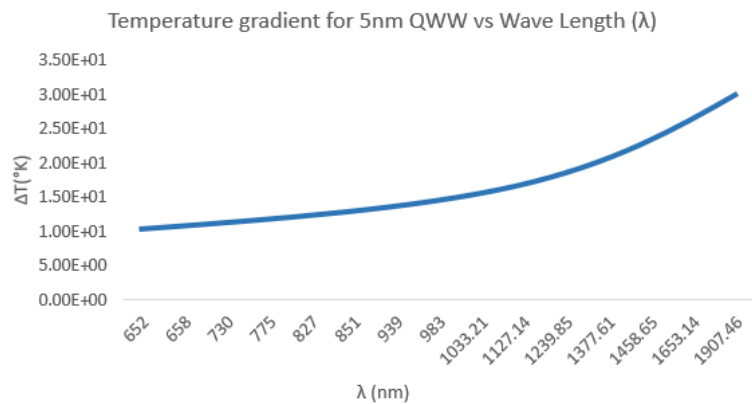


Figura 5.4: Diferencial de temperatura (ΔT) del sistema propuesto para el rango de longitudes de onda estudiadas.

CAPITULO 6 CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

En esta tesis, el diseño del fotodetector celda unitaria se separó en dos partes, primeramente se consideró la unión np como una celda unitaria estándar, con características de conducción eléctrica y óptica a partir de la unión de dos materiales iguales (homounión) y posteriormente se consideró la inclusión de una película nanométrica de Ge (pozo cuántico de Germanio) en la zona de depleción del dispositivo inicial, lo que aumentaría la eficiencia de la celda debido al confinamiento de cargas y al aporte de ellas a la corriente de difusión, y al mismo tiempo generaría el efecto de fotoluminiscencia y enfriamiento óptico en la celda, esto con el fin de analizar las características de enfriamiento óptico del sistema como objetivo primario de este estudio de tesis.

Al proponer la unión np de Si, se definieron el material ventana y la capa activa a través del criterio de la banda prohibida (band gap directo) menor y también las dimensiones de la zona de depleción en la capa activa, siendo el material *tipo p* el que obtuvo las mejores propiedades de absorción óptica. Los Cálculos iniciales del diseño eléctrico mostraron dimensiones de zonas de depleción cargadas hacia el material *p*, de $1\ \mu\text{m}$ y voltajes de contacto de alrededor de $V_0=0.65\text{V}$, resultados obtenidos únicamente desde el punto de vista eléctrico de la unión np. Estos parámetros se complementan posteriormente con la parte óptica, donde se incluyeron ahora los efectos de la corriente fotogenerada a partir de los procesos de absorción del material propuesto, primero el campo eléctrico generado E dentro del sólido, seguido del Cálculo de la disipación de dicho campo Q por el método de la multiplicación del campo eléctrico y el campo magnético como vector Poynting y finalmente el Cálculo de la generación de excitones G_L , integrando la disipación del campo a lo largo del espectro de longitudes de onda estudiadas, obteniendo un valor total de $G_{Lpn}=4.8 \times 10^{28}\text{ cm}^{-3}$. Bajo esta condición, se modifican las características de la zona de depleción en términos de su dimensionamiento y los voltajes de contacto del sólido, debido a que el material se estimula ópticamente., por lo que se realizaron los Cálculos de las dimensiones y del voltaje de contacto bajo condiciones de estimulación óptica. Para esto, se calculó la solución de las ecuaciones de continuidad y la ecuación de Poisson simultáneamente

dentro de un procedimiento iterativo conocido como Método Gummel y se obtuvieron las nuevas densidades de carga finales combinadas (sin iluminación y con iluminación) , y se obtuvo el nuevo valor de contacto en la unión , siendo este de $V_0 = 0.7$ V. Finalmente se calcularon los parámetros de desempeño del dispositivo bajo iluminación se pudo obtener una eficiencia eléctrica de 8.2% de eficiencia con una potencia máxima de 0.82 W/m^2 .

En la segunda parte de esta tesis, se incluyó la película nanométrica de Ge, y se resolvió el pozo cuántico finito calculando la nueva longitud de onda efectiva que incluye los primeros niveles energéticos, que se obtienen calculando la ecuación de Schrödinger en forma gráfica. Así también, se definió que el ancho de la película ideal para obtener un V_{bp} mayor y un diferencial menor de este con respecto a la discontinuidad en la banda de conducción era de 5 nm. Usando ahora el coeficiente de absorción en términos de la *selección parcial de momento*, se pudo probar que gracias al aporte de cargas por confinamiento de cargas y su correspondiente foto generación de excitones que fue de $G_{LqW} = 3.38 \times 10^{28} \text{ cm}^{-3}$ en el pozo cuántico, el valor total de excitones obtenido por el sistema, que es la suma a la obtenida en forma de unión np simple más la obtenida por el pozo, genera un valor total de generación de excitones de $G_{Ltotal} = 7.46 \times 10^{28} \text{ cm}^{-3}$. En el análisis paramétrico, utilizando este nuevo valor de excitones, se obtuvieron valores de 14.84% de eficiencia en términos de conversión eléctrica de la celda con el pozo cuántico.

Finalmente, se resolvió la ecuación de Van Roosveck-Shotkey, para obtener el nivel de fotoluminiscencia del sistema, que es dependiente de la longitud de onda y del coeficiente de absorción y las probabilidades de estados disponibles a través de las distribuciones de Fermi. Los resultados mostraron que en para longitudes de onda de alrededor de 1200 nm, se puede encontrar la concentración mayor de fotoluminiscencia, la cual se asocia posteriormente a la potencia neta calculada.

La potencia neta negativa nos muestra que existe un proceso de disipación de calor que depende directamente de la capacidad de absorción fotónica del material, y de la conversión de esta en fotoluminiscencia.

También podemos observar, mediante la ecuación paramétrica del diferencial de temperatura, que la inclusión de la potencia neta en el Cálculo de dicho diferencial nos

arroja valores de alrededor de 30°K en el barrido máximo de longitudes de onda. Lo cual confirma que es posible explorar materiales que participen en el confinamiento de cargas dentro de la zona de depleción, y esto propicia la potencial absorción en corrimiento de longitudes de onda y la fotoluminiscencia a apropiada para obtener disipación de calor por medios de impacto óptico sobre el dispositivo.

En el trabajo futuro, se estudiarán las ecuaciones descriptivas de la eficiencia electrónica de las fotoceldas solares, con el fin de acoplar dichas funciones con los resultados obtenidos en relación con la disipación de calor (ΔT). La idea final será trabajar utilizando este diseño de unión np con pozo cuántico, que sea capaz de probar que la fotoluminiscencia tiene un impacto en la pendiente de degradación de eficiencia, modificando la tasa actual de cambio (ver figura 1.2) en forma significativa, es decir, mejorando la capacidad del sólido propuesto en términos de calidad de energía a largo plazo, mejorando así su capacidad de foto-generación a través del tiempo con una menor degradación de su eficiencia electrónica.

Referencias

- [1] W. Shockley and Hans J. Queisser, "Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells", *Journal of Applied Physics* 32, 510 (1961);
[doi: 10.1063/1.1736034]
- [2] NREL data base, "Best Research-Cell efficiency chart", <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>
- [3] N. Ravindra et al "Temperature dependence of solar cell performance-An analysis" *Solar Energy Materials & Solar Cells* 101 (2012) 36–45
[doi:10.1016/j.solmat.2012.02.019]
- [4] Ripstein and M. Sheik-Bahae, "Optical Refrigeration in Solids: Fundamentals and Overview", *Optical Refrigeration. Science and Applications of Laser Cooling of Solids.*(2009) 1-32 [ISBN: 978-3-527-40876-4]
- [5] G.Kaur et al "Pulsed laser deposited Al-doped ZnO thin films for optical applications" *Progress in Natural Science: Materials International* (2015) 25, 1, 12-21
[doi.org/10.1016/j.pnsc.2015.01.012]
- [6] J. Fuentes et al "Using the matrix method in optics: system of lenses" *Revista Brasileira de Ensino de Fisica*, (2005) 27(3):357-361
[doi:10.1590/S0102-47442005000300009]
- [7] J. Fuentes et al "Empleo del método matricial en el curso de óptica: capas delgadas antirreflectantes" *Revista Brasileira de Ensino de Fisica*, (2005), 27(4):565-570
[doi.org/10.1590/S1806-11172005000400008]
- [8] IOFFE data base: "Si-Silicon Band Structure and carrier concentration"
[http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/Si/bandstr.html#Doping]
- [9] B. Streetman and S. Banerjee "Electrons and holes in quantum wells" *Solid state electronic devices* 7, 87-89 [ISBN-10:0-13-335603-5]
- [10] ECEE data base: "Effective mass in semiconductors",
[https://ecee.colorado.edu/~bart/book/effmass.htm]
- [11] PV Education Organization "Absorption Coefficient"
[https://www.pveducation.org/pvcdrom/pn-junctions/absorption-coefficient]
- [12] J. Tarin-Cordero et al "Low-dimensional CdS/CdTe multiple-quantum well heterostructure for optical refrigeration", *Journal of Nanophotonics*, (2015),4-6
[DOI: 10.1117/1.JNP.9.093085]

- [13] G. Smedstad, "Solar cell equations", Optoelectronics of solar cells, (2002) , 37-41
[SPIE Press \[ISBN 0-8194-4440-5\]](#)
- [14] G. L. Araujo, and A. Marti," Absolute limiting efficiencies for photovoltaic energy Conversion", *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 33 (1994) 213-240
[\[doi.org/10.1016/0927-0248\(94\)90209-7\]](#)
- [15] D. Vasileska , "Drift-Diffusion Model: Part B Solution Details",
[\[https://nanohub.org/resources/1512/supportingdocs\]](https://nanohub.org/resources/1512/supportingdocs)
- [16] L. V. Butov et al. "Towards Bose-Einstein condensation of excitons in potential traps," *Nature*.(2002); 417(6884):47-52.[[DOI:10.1038/417047a](#)]
- [17] Gauck et al., "External radiative quantum efficiency of 96% from a GaAs/GaInP heterostructure," *Appl. Phys.* 64, 143 (1997). [\[doi.org/10.1007/s003390050455\]](#)
- [18] Bahl, G. Laser cooling: Raman cooling in a semiconductor. *Nature photonics*, (2016) 10(9), 566-567. [\[doi.org/10.1038/nphoton.2016.142\]](#)

ANEXOS

Anexo A.1 Índices de refracción complejo (n, k) del Si dopado tipo P y tipo N

λ	n-Si		P-Si	
	n	k	n	k
350	5.100000	3.013668	5.202000	3.013668
360	6.000000	2.582877	6.120000	2.582877
370	6.700000	2.213666	6.834000	2.169393
380	5.441485	1.897232	5.550315	1.859288
390	5.375909	1.626031	5.483427	1.59351
400	5.311122	1.393597	5.417344	1.365725
410	5.247116	1.194388	5.352058	1.170501
420	5.183882	1.023656	5.287559	1.003183
430	5.121409	0.877329	5.223837	0.859782
440	5.05969	0.751918	5.160884	0.73688
450	4.998714	0.644435	5.098688	0.631546
460	4.938473	0.552316	5.037243	0.541269
470	4.878958	0.473364	4.976537	0.463897
480	4.820161	0.405699	4.916564	0.397585
490	4.762071	0.347706	4.857313	0.340752
500	4.704682	0.298003	4.798776	0.292043
510	4.647985	0.255405	4.740945	0.250297
520	4.591971	0.218896	4.683810	0.214518
530	4.536632	0.187606	4.627364	0.183853
540	4.48196	0.160788	4.571599	0.157572
550	4.427946	0.137804	4.516505	0.135048
560	4.374584	0.118106	4.462075	0.115744
570	4.321864	0.101223	4.408302	0.099199
580	4.26978	0.086754	4.355176	0.085019
590	4.218324	0.074353	4.302691	0.072866
600	4.167488	0.063724	4.250838	0.06245
610	4.117264	0.054615	4.199610	0.053523
620	4.067646	0.046808	4.148999	0.045872
630	4.018626	0.040117	4.098998	0.039315
640	3.970196	0.034383	4.049600	0.033695
650	3.92235	0.029468	4.000797	0.028878
660	3.875081	0.025255	3.952583	0.02475
670	3.828381	0.021645	3.904949	0.021212
680	3.782244	0.018551	3.857889	0.01818
690	3.736664	0.015899	3.811397	0.015581
700	3.691632	0.013627	3.765465	0.013354
710	3.647143	0.011679	3.720086	0.011445
720	3.60319	0.010009	3.675254	0.009809
730	3.559767	0.008579	3.630963	0.008407
740	3.516868	0.007352	3.587205	0.007205
750	3.474485	0.006301	3.543975	0.006175
760	3.432613	0.005401	3.501265	0.005293
770	3.391245	0.004629	3.459070	0.004536
780	3.350377	0.003967	3.417384	0.003888
790	3.31	0.0034	3.376200	0.003332
800	3.270111	0.002914	3.335513	0.002856

Anexo A.2 Cálculo de cargas $n(x)$ y $p(x)$ y voltaje de Poisson en la unión estimulada ópticamente

Cuando una unión semiconductor np es estimulada por medio de un campo óptico, las concentraciones de portadores iniciales (en equilibrio) en ambas regiones n y p de la unión cambian, debido al aporte de cargas que se obtienen por la generación de excitones dentro del sistema por la absorción de fotones. Debido a ello, el voltaje de la unión varía por el hecho que este depende de la densidad de cargas. Ya estimulada la unión, es necesario entonces recalcular el valor del voltaje de contacto en la unión y las nuevas densidades de carga utilizando un método iterativo conocido como método Gummel. En condiciones de equilibrio (no polarización o estimulación fotónica) solo la solución de la ecuación de Poisson es necesaria, ya que el nivel de equilibrio de Fermi es constante y coincide con ambos niveles cuasi-Fermi.

El método de Gummel resuelve el conjunto de ecuaciones acopladas para los semiconductores junto con la ecuación de Poisson a través de un procedimiento de desacoplamiento de ecuaciones. Si elegimos la formulación de nivel cuasi-Fermi, resolvemos primero una ecuación de Poisson no lineal. El potencial obtenido de esta solución es sustituido en las ecuaciones de continuidad, que ahora son lineales y se resuelven directamente para concluir el paso de iteración. El resultado en términos de niveles de casi Fermi se sustituye de nuevo en Poisson.

La ecuación y el proceso se repiten hasta alcanzar la convergencia. Para comprobar si hay convergencia, se pueden calcular los residuos obtenidos colocando todos los términos de la izquierda de las ecuaciones y sustituyendo las variables con los valores de iteración. Para la exacta solución de los residuos deben ser cero. ^[15]

Sin embargo, se concluye un nivel de convergencia cuando los residuos son más pequeños que una tolerancia establecida.

La tasa de convergencia del método Gummel es más rápida cuando hay poco acoplamiento entre las diferentes ecuaciones. El costo computacional de una iteración de Gummel es una solución matricial para cada tipo de portador más una solución iterativa para la linealización de la ecuación de Poisson.

El algoritmo iterativo de Gummel se representa en forma gráfica de la siguiente manera.:

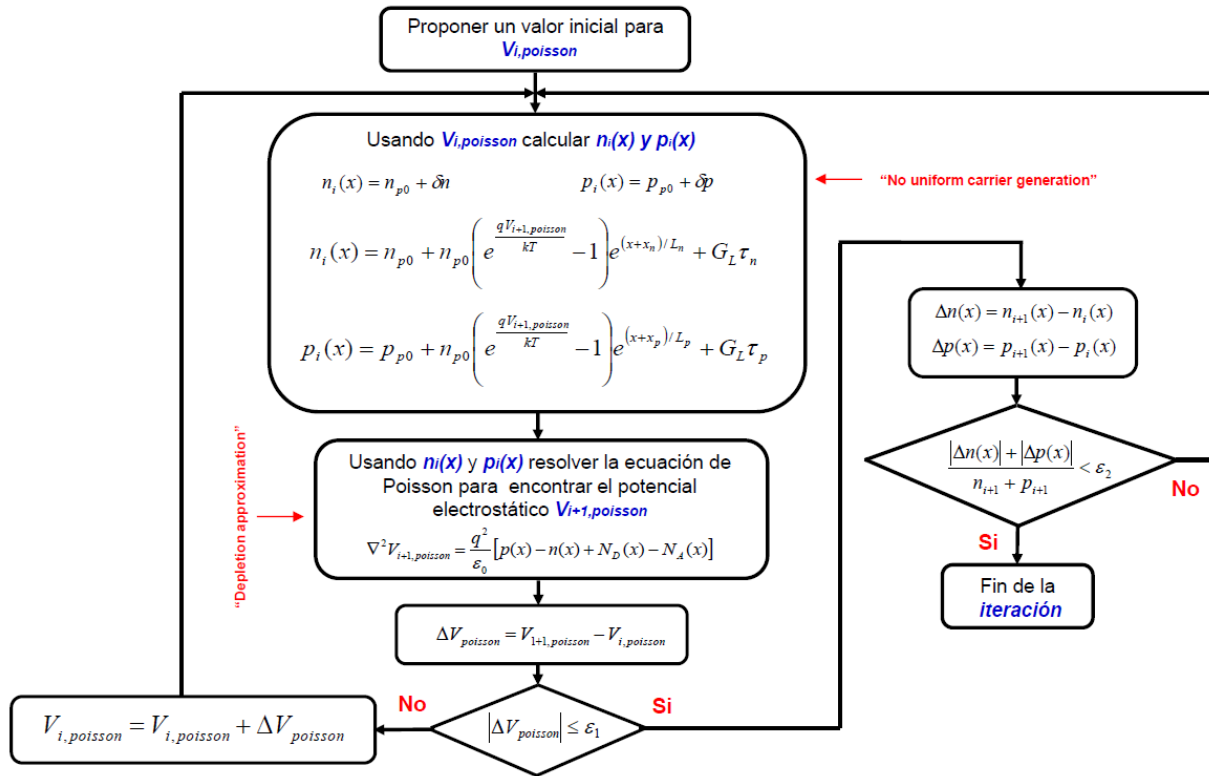


Figura A2.1: Algoritmo iterativo de Gummel

Anexo A.3 Tabla de valores obtenidos por solución auto consistente de las ecuaciones de continuidad y la ecuación de Poisson

Tabla A.3 completa de parámetros eléctricos															
Primeros dos Niveles de Energía del Pozo P_Si-Ge-P_Si (eV)					Quasifermis (eV)		Densidades de carga (cm ⁻²)		Concentracion Intrinseca (cm ⁻³)	V poisson (V)	Zona de deplecion (cm)		W (nm)	(V)	0.276
QW(Å)	En ₁	En ₂	Ep ₁	Ep ₂	E _{fn}	E _{fp}	n(x)	p(x)	ni ²	Vo	x _p	x _n	W	V _{bp}	Delta
10	0.1247	0.0000	0.1180	0.0000	0.1227	0.1327	3.58E+17	6.26E+16	2.24E+34	0.7157	1.27E-05	2.22E-06	149.35	0.1947	0.081
20	0.0626	0.2475	0.0678	0.1840	0.0626	0.0881	4.25E+17	9.79E+16	4.16E+34	0.7346	1.01E-05	2.09E-06	122.24	0.1758	0.100
30	0.0368	0.1528	0.0425	0.1599	0.0368	0.0695	2.81E+17	9.74E+16	2.73E+34	0.7209	9.40E-06	3.27E-06	126.67	0.1896	0.086
40	0.0242	0.1005	0.0287	0.1156	0.0242	0.0458	2.00E+17	7.69E+16	1.54E+34	0.7059	1.03E-05	3.96E-06	142.68	0.2045	0.072
50	0.0173	0.0724	0.0216	0.0860	0.0173	0.0732	1.78E+17	6.19E+16	1.10E+34	0.6973	1.16E-05	4.04E-06	156.32	0.2616	0.014
60	0.0108	0.0530	0.0149	0.0652	0.0108	0.0452	1.35E+17	5.19E+16	7.04E+33	0.6857	1.24E-05	4.74E-06	170.99	0.2247	0.051
70	0.0405	0.0594	0.0118	0.0511	0.0405	0.0511	9.84E+16	4.83E+16	4.75E+33	0.6756	1.22E-05	5.97E-06	181.40	0.2349	0.041
80	0.0319	0.0543	0.0064	0.0410	0.0319	0.0410	1.03E+17	4.53E+16	4.69E+33	0.6752	1.28E-05	5.62E-06	184.45	0.2352	0.041
90	0.0262	0.0439	0.0342	0.0767	0.0262	0.0520	9.67E+16	4.76E+16	4.60E+33	0.6747	1.22E-05	6.02E-06	182.66	0.2357	0.040
100	0.0218	0.0512	0.0277	0.0651	0.0218	0.0426	1.28E+17	4.49E+16	5.74E+33	0.6805	1.34E-05	4.72E-06	181.49	0.23	0.046
110	0.0144	0.0420	0.0547	0.0817	0.0144	0.0577	1.11E+17	4.04E+16	4.49E+33	0.6741	1.40E-05	5.09E-06	191.18	0.2363	0.040
120	0.0361	0.0661	0.0185	0.0542	0.0361	0.0542	1.15E+17	4.60E+16	5.30E+33	0.6784	1.30E-05	5.19E-06	181.53	0.2321	0.044
130	0.0105	0.0565	0.0141	0.0401	0.0105	0.0184	1.42E+17	3.96E+16	5.64E+33	0.6800	1.48E-05	4.12E-06	189.01	0.2305	0.046
140	0.0482	0.0585	0.0347	0.3037	0.0482	0.1423	8.70E+16	2.08E+17	1.81E+34	0.7102	3.79E-06	9.07E-06	128.53	0.2002	0.076
150	0.0240	0.0430	0.0000	0.0559	0.0240	0.0532	9.85E+16	5.85E+16	5.77E+33	0.6806	1.07E-05	6.33E-06	169.96	0.2299	0.046
160	0.0539	0.1203	0.0095	0.0495	0.0539	0.0495	1.80E+17	4.87E+16	8.79E+33	0.6915	1.35E-05	3.65E-06	171.46	0.219	0.057
170	0.0350	0.0781	0.0043	0.0444	0.0350	0.0444	1.37E+17	4.88E+16	6.69E+33	0.6844	1.29E-05	4.59E-06	174.87	0.226	0.050
180	0.0274	0.0623	0.0219	0.0393	0.0274	0.0379	1.23E+17	3.55E+16	4.37E+33	0.6734	1.55E-05	4.46E-06	199.36	0.2371	0.039
190	0.0436	0.0631	0.0165	0.0356	0.0436	0.0356	9.93E+16	3.65E+16	3.63E+33	0.6686	1.47E-05	5.39E-06	200.45	0.2419	0.034
200	0.0099	0.05662	0.0526	0.0754	0.0099	0.0633	1.43E+17	3.76E+16	5.39E+33	0.6788	1.53E-05	4.00E-06	192.93	0.2316	0.044
210	0.0052	0.01925	0.0279	0.0461	0.0052	0.0304	9.18E+16	3.58E+16	3.28E+33	0.6660	1.46E-05	5.70E-06	203.42	0.2444	0.032
220	0.0137	0.03128	0.0640	0.0862	0.0137	0.0640	9.66E+16	3.82E+16	3.69E+33	0.6690	1.42E-05	5.60E-06	197.68	0.2414	0.035
230	0.0442	0.0589	0.0386	0.0571	0.0442	0.0571	9.27E+16	3.62E+16	3.36E+33	0.6665	1.45E-05	5.68E-06	202.34	0.2439	0.032
240	0.0374	0.09317	0.0126	0.0741	0.0374	0.0638	1.60E+17	6.05E+16	9.68E+33	0.6940	1.16E-05	4.36E-06	159.17	0.2164	0.060
250	0.0495	0.06645	0.0074	0.0195	0.0495	0.0195	9.57E+16	3.30E+16	3.16E+33	0.6650	1.55E-05	5.36E-06	208.83	0.2454	0.031
260	0.0155	0.03553	0.0143	0.0309	0.0155	0.0268	1.00E+17	3.49E+16	3.49E+33	0.6675	1.51E-05	5.27E-06	203.85	0.2429	0.033
270	0.0094	0.02873	0.0256	0.0439	0.0094	0.0319	9.90E+16	3.56E+16	3.52E+33	0.6678	1.49E-05	5.35E-06	202.51	0.2426	0.033
280	0.0378	0.0548	0.0379	0.0723	0.0378	0.0635	9.58E+16	4.37E+16	4.19E+33	0.6723	1.29E-05	5.91E-06	188.35	0.2381	0.038
290	0.0477	0.06533	0.0508	0.0659	0.0477	0.0656	9.66E+16	3.45E+16	3.33E+33	0.6663	1.51E-05	5.40E-06	205.36	0.2441	0.032
300	0.0580	0.10783	0.0454	0.0797	0.0580	0.0715	1.49E+17	4.38E+16	6.52E+33	0.6838	1.40E-05	4.11E-06	181.19	0.2267	0.049

Anexo A.4 Transiciones de cargas (Selección de Momento)

Los principios de transición de cargas de la banda de valencia a la de conducción que han sido reportados por investigadores previamente y que son base para los estudios actuales. Lasher y Stern ^[14] calculan el coeficiente de absorción estimulada del pozo utilizando una longitud de onda fija mientras que W. Taylor analiza el coeficiente de absorción utilizando un concepto de densidad espectral en el flujo de fotones incidente. En ambos casos, tres diferentes criterios para la transición de cargas de la banda de valencia a la de conducción son utilizados: Selección estricta de momento (*K-selection*), sin selección de momento (*no selection*) y selección parcial de momento (*partial k-selection*).

En el criterio de *selección estricta de momento*, la tasa de transición neta es una suma de las transiciones de banda a banda evaluada para cada energía del fotón simplificadas asumiendo que el momento del electrón es significativamente mayor que el del fotón ($kn \gg k_{photon}$). De aquí que, el momento del fotón puede ser ignorado en la transición de banda a banda. Se asume que la transición de los electrones es puramente vertical, donde el estado inicial y el final tienen el mismo momento, $kn = kp$ (figura A4.1). Algunas limitaciones de este criterio es el decrecimiento de α con el incremento de la energía y el pequeño valor de α para valores de energía por encima del valor de la banda prohibida efectiva.

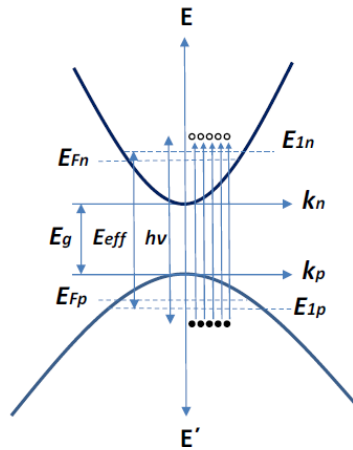


Figura A4.1: Diagrama de energía vs momento para el método de transición de selección estricta de momento.

Un criterio que considera más estados disponibles para la transición de electrones es el *criterio de no selección de momento*. En este criterio, todos los estados separados por la energía del fotón están disponibles para la transición (figura A4.2). Esto requiere la integración de las ecuaciones de las tasas de transición, las cuales incrementan el espectro de absorción para la banda prohibida efectiva debido a la densidad de estados disponibles. El espectro muestra un incremento continuo de α por encima de la banda prohibida, lo que significa la existencia de demasiados estados disponibles para las transiciones.

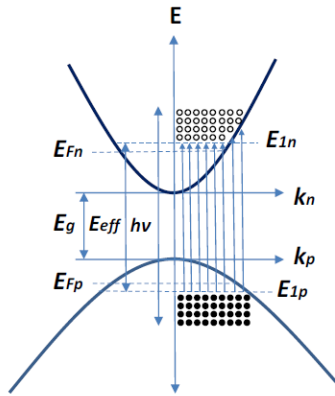


Figura A4.2: Diagrama de energía vs momento para el método de transición de no selección de momento.

En el criterio de *selección parcial de momento* un rango de estados separados por la energía del fotón puede participar en la transición para un rango de valores de momentos (figura A4.3). Esto significa la inclusión de mecanismos de *colisión intra-banda* que permiten la conservación del momento para cada transición. La colisión intra-banda creará un acotamiento en energía (colisiones inelásticas) y en momento (colisiones elásticas). Una función de peso es introducida en las ecuaciones de las tasas de transición. Esta función de peso selecciona el rango de transiciones con más probabilidad para cada energía de transición. Idealmente, la implementación del criterio de selección parcial de momento es lo más cercano a la realidad dado que este se aproxima al criterio de selección estricta de momento para un rango infinitamente delgado de transiciones disponibles, y se aproxima al criterio de sin selección de momento para un rango infinitamente ancho de transiciones disponibles.

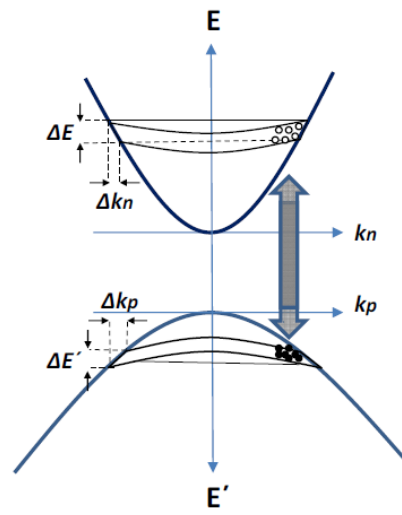


Figura A4.3: Diagrama de energía vs momento para el método de transición de selección parcial de momento.

Anexo A.5 Longitud de onda de De Broglie

De Broglie estableció que cualquier partícula que lleva una determinada velocidad, se comporta como una onda y relacionó la longitud de onda de esta y su momento lineal (cantidad de movimiento) con la expresión:

$$\lambda = \left(\frac{h}{p} \right) = \frac{h}{mv} \quad (\text{A5.1})$$

siendo h la constante de Planck, m la masa y v la velocidad.

La energía cinética de un electrón en función de su momento esta expresada por la ecuación:

$$E_c = \frac{p^2}{2m} \quad (\text{A5.2})$$

Y el momento de un fotón se obtiene mediante la ecuación:

$$P = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{A5.3})$$

Al combinar estas dos expresiones (A5.2 y A5.3) obtenemos la longitud de onda de De Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad (\text{A5.4})$$

Esto significa, que el comportamiento de un electrón puede ser estudiado a partir de asociar su movimiento en un medio con una onda. Este movimiento ondulatorio se le conoce como *Longitud de Onda De Broglie*.