



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

INSTITUTO DE INGENIERÍA

“DESARROLLO DE UNA BASE
TEÓRICA – PRACTICA PARA EL DISEÑO E
IMPLEMENTACIÓN DE CELDAS SOLARES
CON CAPA ACTIVA NANOESTRUCTURADA
CON CALCOGENUROS DE CADMIO”

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS

PRESENTA:
M. I. VIANEY ARACELY CANDELAS URREA

DIRECTOR DE TESIS:
DR. CARLOS VILLA ANGULO

MEXICALI, B.C.

AGOSTO DEL 2024

ÍNDICE

DEDICATORIA	I
AGRADECIMIENTOS	II
LISTA DE ECUACIONES	III
LISTA DE FIGURAS	V
LISTA DE GRAFICAS	VII
LISTA DE TABLAS	VIII
NOMENCLATURA	IX
RESUMEN	X
ABSTRACT	XI
CAPÍTULO I. Técnica de crecimiento por electrodeposición	1
CAPÍTULO II. Introducción	6
2.1. Justificación del problema	6
2.2. Objetivos del proyecto	6
2.2.1. Objetivo general	6
2.2.2. Objetivos específicos	7
2.3. Hipótesis	7
CAPITULO III. Diseño y análisis teórico	9
3.1. Diseño teórico de una celda solar unitaria	9
3.1.1. Estructura básica de una celda solar unitaria	10
3.1.2. Propagación de campos electromagnéticos en estructuras multicapa	11
3.1.3. Concentración de cargas, potencial electroestático y dimensionamiento de la zona de depleción	18
3.1.4. Características de desempeño en una celda solar unitaria	19
3.1.5. Diseño y caracterización de una celda solar unitaria de tipo: Vidrio/CdS/CdTe/Ag	21
3.2. Diseño teórico de una celda solar unitaria con inserción de un Qw en la estructura: Vidrio/ ITO/CdS/CdTe/Ag	30
3.2.1. Estructura de una celda solar con la inserción de un Qw	30
3.2.2. Absorción actual del dispositivo	31
3.2.3. Selección del material para el Qw	32
3.2.4. Ancho óptimo del dispositivo	34
3.2.5. Longitud de onda central del Qw	35
3.2.6. Coeficiente de absorción del Qw	35

3.2.7. Estructura de una celda solar unitaria con la inclusión de un Qw: vidrio soda - lima/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe/Ag	37
3.3. Propagación de campos electromagnéticos en estructuras multicapa con Qw	37
3.3.1. Interfaces en la estructura	37
3.3.1.1. Interface entre ITO/ CdS	38
3.3.1.2. Interface entre CdS/ CdTe	38
3.3.1.3. Interface entre CdTe/ CdHgTe	39
3.3.1.4. Interface entre CdHgTe/ CdTe	40
3.3.1.5. Interface entre CdTe/ Ag	40
3.3.2. Matrices de interface en la estructura	41
3.3.2.1. Matriz de interface en ITO/ CdS	41
3.3.2.2. Matriz de interface en CdS/ CdTe	41
3.3.2.3. Matriz de interface en CdTe/ CdHgTe	42
3.3.2.4. Matriz de interface en CdHgTe/ CdTe	42
3.3.2.5. Matriz de interface en CdTe/ Ag	42
3.3.3. Matrices de propagación en la estructura	43
3.3.3.1. Matriz de propagación en ITO	43
3.3.3.2. Matriz de propagación en CdS	43
3.3.3.3. Matriz de propagación en CdTe a la izquierda del Qw	44
3.3.3.4. Matriz de propagación en CdTe a la derecha del Qw	44
3.3.3.5. Matriz de propagación en Ag	44
3.3.4. Matrices de Scattering	45
3.3.4.1. Matrices de Scattering para capas anteriores al Qw: ITO/ CdS/ CdTe	45
3.3.4.2. Matrices de Scattering para capas posteriores al Qw: CdTe/ Ag	46
3.3.5. Coeficientes de reflexión y transmisión	47
3.3.5.1. Para capas anteriores al Qw: ITO/ CdS/ CdTe	47
3.3.5.2. Para capas posteriores al Qw: CdTe/ Ag	47
3.3.6. Coeficiente de transmisión en el Qw: CdHgTe	48
3.3.7. Campo eléctrico	48
3.3.8. Energía promedio disipada	49
3.3.9. Tasa de generación de excitones	49
3.4. Algoritmo iterativo de Gummel	50
3.5. Características de desempeño teórico de la celda solar unitaria:	
Vidrio/ITO/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe/Ag	51
3.5.1. Voltaje de circuito abierto	51
3.5.2. Densidad de corriente de corto circuito	52
3.5.3. Curva de desempeño de la celda solar unitaria	52
3.5.4. Ancho del dispositivo	54
3.5.5. Corriente máxima deseada	54
3.5.6. Factor de llenado	54

3.5.7. Eficiencia de conversión	55
3.5.8. Resistencia máxima deseada	55
3.5.9. Potencia máxima deseada	55
3.6. Resultados teóricos en el diseño de la celda solar unitaria con inclusión de un Qw	56
3.7. Panel solar teórico diseñado	56
3.7.1. Fotodiodos requeridos	57
3.7.2. Mallas requeridas	57
CAPITULO IV. Implementación y caracterización de una celda solar multicapa: Vidrio/ITO/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe/Ag	
4.1. Fabricación de la celda solar unitaria	58
4.1.1. Materiales y métodos	58
4.1.2. Preparación del electrolito y electrodeposición	
4.1.2.1. Sulfuro de cadmio	59
4.1.2.2. Telurio de cadmio – Telurio de mercurio y cadmio	60
4.1.2.3. Plata	61
4.2. Cableado de la celda solar unitaria	62
4.3. Caracterización de la celda solar	63
CAPITULO V. Comparación de resultados	
5.1. Resultados teóricos y resultados prácticos de una celda solar con Qw	65
5.2. Resultados teóricos y prácticos de una celda solar con Qw - Resultados teóricos y prácticos de una celda solar sin Qw	66
5.3. Correlación entre los resultados teóricos y prácticos de una celda solar con y sin Qw	67
CAPITULO VI. Conclusión	
Referencias	71
Anexos	72
Anexo I. Algoritmo de Gummel	72
Anexo II. Constancia de participación en CI2T	73
Anexo III. Artículo “Optical Absorption and Conversion Efficiency Improvement by a QW Insertion in the Active Layer of PN Solar Cell”	74
Anexo IV. Artículo “All-Layer Electrodeposition of CdTe/Hg _{0.1} Cd _{0.9} Te/CdTe Photodetector for Mid-Wavelength Infrared Detection”	79



PARA:

Damián y Emma

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Carlos Villa, quiero expresar mi más profundo agradecimiento por brindarme la oportunidad de formar parte de su laboratorio. Su generosidad al compartir su conocimiento y su paciencia al resolver cada una de mis dudas a lo largo de este trabajo han sido invaluable. Gracias por creer en mí y por su constante apoyo, sin el cual no habría podido alcanzar esta meta. Su guía y confianza han sido una fuente de inspiración y motivación en todo momento.

Al Dr. Ricardo Morales y a mis compañeros de laboratorio M. C. Daniel Báez, M. C. Monserrat Vargas y M. C. Carolina Tarín: Deseo expresar mi más sincero agradecimiento por su invaluable apoyo y amistad durante estos años. Su compañía y colaboración han sido fundamentales para mi desarrollo académico y personal.

Asimismo, agradezco a la Universidad Autónoma de Baja California y al Instituto de Ingeniería por brindarme la oportunidad de continuar con mi formación académica. Su respaldo ha sido esencial para alcanzar mis metas y avanzar en mi carrera.

Al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT) por el apoyo económico que me otorgó durante estos cuatro años y permitió que pudiera dedicar todo mi tiempo a la realización de esta Tesis.

LISTA DE ECUACIONES

Ecuación 1. Coeficiente de reflexión

Ecuación 2. Coeficiente de transmisión

Ecuación 3. Coeficiente de reflexión en la posición 1,1

Ecuación 4. Coeficiente de reflexión en la posición 2,1

Ecuación 5. Coeficiente de reflexión en la posición 1,2

Ecuación 6. Coeficiente de reflexión en la posición 2,2

Ecuación 7. Matriz de interface

Ecuación 8. Matriz de propagación

Ecuación 9. Constante de propagación

Ecuación 10. Equivalente de Euler

Ecuación 11. Capas anteriores

Ecuación 12. Capas posteriores

Ecuación 13. Matriz de Scattering (representación a)

Ecuación 14. Matriz de Scattering (representación b)

Ecuación 15. Matriz de Scattering (representación c)

Ecuación 16. Coeficiente de reflexión complejo para capas anteriores

Ecuación 17. Coeficiente de transmisión complejo para capas anteriores

Ecuación 18. Coeficiente de reflexión complejo para capas posteriores

Ecuación 19. Coeficiente de transmisión complejo para capas posteriores

Ecuación 20. Coeficiente de transmisión en la capa activa

Ecuación 21. Campo eléctrico

Ecuación 22. Energía promedio disipada

Ecuación 23. Tasa de generación de excitones para una celda solar sin Qw

Ecuación 24. Tasa de generación de excitones para una celda solar con Qw

Ecuación 25. Derivada parcial del potencial electrostático

Ecuación 26. Derivada parcial de la densidad de corriente de electrones

Ecuación 27. Derivada parcial de la densidad de corriente de huecos

Ecuación 28. Densidad de corriente de electrones

Ecuación 29. Densidad de corriente de huecos

Ecuación 30. Voltaje de circuito abierto

Ecuación 31. Densidad de corriente de corto circuito

Ecuación 32. Curva de desempeño JV

Ecuación 33. Ancho del dispositivo

Ecuación 34. Corriente a máxima potencia deseada

Ecuación 35. Factor de llenado

Ecuación 36. Eficiencia de conversión

Ecuación 37. Resistencia a máxima potencia

Ecuación 38. Potencia máxima deseada

Ecuación 39. Absorción del dispositivo

Ecuación 40. Aproximación de band gap para el material del Qw

Ecuación 41. Band gap para CdHgTe

Ecuación 42. Discontinuidad en la banda de conducción

Ecuación 43. Discontinuidad en la banda de valencia

Ecuación 44. Longitud de onda central del Qw

Ecuación 45. Coeficiente de absorción del Qw

Ecuación 46. Mallas requeridas

Ecuación 47. Coeficiente de correlación de Pearson

Ecuación 48. Covarianza

Ecuación 49. Varianza

Ecuación 50. Media aritmética de la variable x

Ecuación 51. Media aritmética de la variable y

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1. Diagrama esquemático de un sistema de electrodeposición
- Figura 3.1.1.1. Estructura de una celda solar formada con heterounión pn
- Figura 3.1.2.1. Estructura multicapa típica crecida en un sustrato
- Figura 3.1.2.2. Transmisión y reflexión en una interface entre dos medios diferentes
- Figura 3.1.2.3. Interface entre dos capas delgadas
- Figura 3.1.2.4. Incidencia oblicua con ángulo de transmisión en cada capa de la estructura
- Figura 3.1.2.5. División de la estructura multicapa: capas anteriores, capa a analizar y capas posteriores
- Figura 3.1.5.1. Celda solar formada por heterounión pn de tipo: vidrio soda-lima/ITO/CdS/CdTe/Ag
- Figura 3.1.5.2. Estructura final de la celda solar unitaria
- Figura 3.1.5.3. Aerógrafo y sus principales componentes
- Figura 3.1.5.4. Sulfuro de cadmio depositado por aerografía
- Figura 3.1.5.5. Pruebas en la celda solar unitaria
- Figura 3.2.1.1. Estructura de una celda solar formada con heterounión pn con inserción de un Qw
- Figura 3.2.3.2. Estructura del pozo cuántico
- Figura 3.2.4.1. Estructura del pozo cuántico con valores definidos de niveles de energía y ancho óptimo
- Figura 3.2.7.1. Estructura de la celda solar con la inclusión de un Qw de CdHgTe
- Figura 3.3.1.1.1. Interface entre ITO y CdS
- Figura 3.3.1.2.1. Interface entre CdS y CdTe
- Figura 3.3.1.3.1. Interface entre CdTe y CdHgTe
- Figura 3.3.1.4.1. Interface entre CdHgTe y CdTe
- Figura 3.3.1.5.1. Interface entre CdTe y Ag
- Figura 3.3.4.1.1. Representación de las capas anteriores (ITO/CdS/CdTe) a la capa a analizar (CdHgTe)
- Figura 3.3.4.2.1. Representación de las capas posteriores (CdTe/Ag) a la capa a analizar (CdHgTe)

Figura 3.6.1. Estructura final de la una celda solar unitaria

Figura 3.7.1. Estructura esperada del módulo

Figura 4.1.1. Equipo montado y listo para el proceso de electrodeposición

Figura 4.1.2.1. Electrodeposición de CdS: a) Estructura inmersa en el electrolito; b) Sustrato con CdS después de la limpieza ultrasónica; c) Sustrato con CdS recubierto con cinta térmica para la siguiente electrodeposición

Figura 4.1.2.2. Electrodeposición de CdTe/CdHgTe/CdTe: a) Estructura sumergida en la solución electrolítica; b) Tratamiento térmico post-electrodeposición; c) Sustrato con las películas electrodepositadas de CdTe/CdHgTe/CdTe

Figura 4.1.2.3. Electrodeposición de Ag: a) Preparación de la solución electrolítica; b) Sustrato con la película electrodepositada de Ag

Figura 4.2. a) Primer contacto ITO/Cu, b) Segundo contacto Ag/Cu, C) Celda solar lista para caracterizar

LISTA DE GRÁFICAS

Gráfica 3.1.5.1. Distribución del campo eléctrico total de 350 nm a 800 nm

Gráfica 3.1.5.2. Energía promedio disipada por segundo en la capa activa

Gráfica 3.1.5.3. Tasa de generación de excitones en la capa activa para $\lambda=600$ nm

Gráfica 3.1.5.4. Curva J-V

Gráfica 3.1.5.5. Curva característica de la celda solar unitaria; valores de I vs V; FF

Gráfica 3.2.3.1. Constante de red vs Band gap

Gráfica 3.2.6.1. a) Coeficiente de absorción vs Energía del fotón; b) Coeficiente de absorción vs Longitud de onda del fotón

Gráfica 3.5.3.1. Curva J-V en la caracterización teórica

Gráfica 4.3.1.1. Curva J-V en la caracterización práctica

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Electrodeposición de CdS, CdTe, CdHgTe bajo diferentes condiciones de trabajo

Tabla 3.1.5.1. Propiedades de los materiales que conforman la unión pn

Tabla 3.1.5.2. Resultados obtenidos en la convergencia del algoritmo iterativo de Gummel

Tabla 3.1.5.3. Resultados teóricos del desempeño de la celda solar unitaria diseñada

Tabla 3.1.5.4. Características de desempeño en la celda solar unitaria

Tabla 3.2.4.1. Ancho óptimo del pozo cuántico

Tabla 3.4.1. Parámetros de entrada para correr el algoritmo

Tabla 3.4.2. Resultados obtenidos en el algoritmo

Tabla 3.5.3.1. Resultados obtenidos de la curva J-V

Tabla 3.6.1. Resultados teóricos del desempeño de la celda solar con Qw

Tabla 4.3.2.1. Valores de voltaje y corriente en la celda solar unitaria

Tabla 4.3.2.2. Valores significativos de voltaje y corriente en la celda solar unitaria

Tabla 4.3.2.3. Características de desempeño en la celda solar unitaria

Tabla 5.1.1. Resultados teóricos de las características de desempeño

Tabla 5.1.2. Resultados prácticos de las características de desempeño

Tabla 5.2.1. Resultados teóricos de las celdas solares con y sin Qw

Tabla 5.2.2. Resultados prácticos de las celdas solares con y sin Qw

Tabla 5.3.1. Correlación entre los parámetros de desempeño teórico y n_{power} en celdas solares con y sin Qw

Tabla 5.3.2. Correlación entre los parámetros de desempeño práctico y n_{power} en celdas solares con y sin Qw

NOMENCLATURA

Ag	Plata
AgNO ₃	Nitrato de plata
CdCl ₂	Cloruro de cadmio
CdHgTe	Telururo de mercurio y cadmio
CdSe	Seleniuro de cadmio
CdSO ₄	Sulfato de cadmio
CdTe	Telurio de cadmio
CH ₃ CN	Acetonitrilo
Cu	Cobre
EG	Etilenglicol
GaAs	Arseniuro de galio
H ₂ O	Agua
HgCl ₂	Cloruro de mercurio
HNO ₃	Ácido nítrico
ITO	óxido de indio estaño
InP	Fosfuro de indio
KI	Yoduro de potasio
Na ₂ S ₂ O ₃	Tiosulfato de Sodio
NaNO ₃	Nitrato de sodio
Pt	Platino
S	Azufre
SeO ₂	Óxido de selenio
TeCl ₄	Cloruro de telurio
TeO ₂	Óxido de telurio

RESUMEN

En este trabajo, se describe de manera detallada el diseño teórico e implementación práctica de una celda solar con la inclusión de un pozo cuántico (QW) en la zona de depleción de la unión PN. Así mismo se realiza un estudio teórico de la selección del material más adecuado para colocarse como QW en una celda solar con estructura vidrio/ITO/CdS/CdTe/Ag para formar una estructura vidrio/ITO/CdS/CdTe/CdHg_{1-x}Te_x/CdTe/Ag. Se presentan y discuten para ambos casos los valores calculados de la tasa de generación de excitones, así como los parámetros de desempeño que incluyen el voltaje de circuito abierto (V_{oc}), la corriente de corto circuito (I_{sc}), el factor de llenado (FF) y la eficacia de conversión (PCE).

La implementación práctica se realizó a través del depósito de múltiples capas sobre un sustrato de vidrio soda-lima recubierto con ITO utilizando la técnica de electrodeposición secuencial. La preferencia de esta técnica se debe a debe al elevado nivel de control alcanzado sobre la composición, morfología y propiedades físicas de las películas resultantes, además es una técnica relativamente sencilla y económica.

En el **capítulo uno** se encuentra una descripción general de la técnica de crecimiento por electrodeposición y el equipo utilizado para implementar dicha técnica, así como una tabla comparativa de las diferentes condiciones de trabajo para la electrodeposición de CdS, CdTe, CdHgTe.

En el **capítulo dos** se describe la justificación técnica para la realización de este trabajo de tesis, la descripción del objetivo general, los objetivos específicos y la hipótesis planteada.

En el **capítulo tres** se describe detalladamente el proceso que se llevó a cabo para el diseño teórico de una celda solar con la inclusión de un pozo cuántico, desde la selección de los materiales hasta el cálculo de sus características de desempeño como los son el voltaje de circuito abierto (V_{oc}), la densidad de corriente (J_{sc}), el factor de llenado (FF) y la eficiencia de conversión (PCE)

En el **capítulo cuatro** se describe el proceso utilizado para la implementación y caracterización de una celda solar multicapa de tipo Vidrio/ITO/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe/Ag. Se describe el proceso de deposición de cada una de las películas.

En el **capítulo cinco** se presenta un análisis comparativo entre los resultados obtenidos en la caracterización de las celdas solares diseñadas y fabricadas.

En el **capítulo seis** se describe las conclusiones de la realización de esta tesis, así como los logros más destacados alcanzados en el marco de este proyecto. Por último, se encuentran las referencias, así como los anexos con información utilizada durante este trabajo de tesis.

ABSTRACT

In this work, a detailed description is provided of the theoretical design and practical implementation of a solar cell with the inclusion of a quantum well (QW) in the depletion region of the PN junction. Likewise, a theoretical study is conducted on the selection of the most suitable material to be placed as a QW in a solar cell with a glass/ITO/CdS/CdTe/Ag structure to form a glass/ITO/CdS/CdTe/CdHg_{1-x}Te/CdTe/Ag structure. Calculated values of the exciton generation rate are presented and discussed for both cases, as well as performance parameters such as open-circuit voltage (Voc), short-circuit current (Isc), fill factor (FF), and conversion efficiency (PCE).

The practical implementation was carried out through the deposition of multiple layers on a soda-lime glass substrate coated with ITO using the sequential electrodeposition technique. The preference for this technique is due to the high level of control achieved over the composition, morphology, and physical properties of the resulting films, besides being a relatively simple and economical technique.

Chapter one provides an overview of the electrodeposition growth technique and the equipment used to implement it, as well as a comparative table of different working conditions for the electrodeposition of CdS, CdTe, and CdHgTe.

Chapter two describes the technical justification for the completion of this thesis work, the description of the general objective, specific objectives, and the hypothesis formulated.

Chapter three provides a detailed description of the process carried out for the theoretical design of a solar cell with the inclusion of a quantum well, from the selection of materials to the calculation of their performance characteristics such as open-circuit voltage (VOC), current density (JSC), fill factor (FF), and conversion efficiency (PCE).

Chapter four describes the process used for the implementation and characterization of a multilayer solar cell of the type Glass/ITO/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe/Ag. The deposition process of each of the films is described.

Chapter five presents a comparative analysis between the results obtained in the characterization of the designed and manufactured solar cells.

Chapter six describes the conclusions of this thesis work, as well as the most significant achievements made within this project. Finally, references and annexes with information used during the completion of this thesis work are provided.

CAPÍTULO I. TÉCNICA DE CRECIMIENTO POR ELECTRODEPOSICIÓN

En la actualidad, los semiconductores pertenecientes a los grupos II-VI de la tabla periódica, particularmente sulfuro de cadmio (CdS), seleniuro de cadmio (CdSe) y telurio de cadmio (CdTe), han sido objeto de un creciente interés en el área de la nanotecnología. Esto se debe a su relevancia en la fabricación de celdas solares de película delgada y otros dispositivos optoelectrónicos. A diferencia de otros semiconductores, los calcogenuros de cadmio cuando se reducen a escala nanométrica generan nanoestructuras con bandas de energía discretas, alto coeficiente de extinción, posible generación de múltiples excitones y propiedades electrónicas y de transporte cuántico [1]. Existen varios métodos que se pueden utilizar para desarrollar películas delgadas con este tipo de calcogenuros, algunos de estos son deposición por evaporación al vacío (PVD), deposición química de vapor (CVD), deposición de baño químico (CBD), absorción y reacción sucesiva de capas iónicas (SILAR), método de reacción en estado sólido, pirolisis por pulverización y electrodeposición. De todas estas técnicas o métodos de depósito se encontró que la electrodeposición es una técnica ampliamente utilizada en el campo de la nanotecnología para depositar películas delgadas de calcogenuros de cadmio en la fabricación de dispositivos fotovoltaicos. Esta preferencia se debe al elevado nivel de control alcanzado sobre la composición, morfología y propiedades físicas de las películas resultantes. El nivel de control mencionado permite la obtención de materiales con propiedades ópticas y eléctricas óptimas, en contraste con aquellos obtenidos mediante técnicas considerablemente más costosas y complejas. Además, la electrodeposición se destaca como una técnica relativamente sencilla y económica en comparación con otros métodos de síntesis de calcogenuros [2].

La técnica de electrodeposición es un proceso electroquímico mediante el cual se deposita un material, generalmente un metal o un compuesto, sobre un sustrato cuando se aplica una corriente eléctrica a través de una celda electroquímica. Dependiendo de la aplicación esta técnica se puede implementar en modo potencioestático o en modo galvanostático. La deposición galvanostática resulta útil en aplicaciones donde no es necesario ningún control sobre la morfología del depósito resultante, mientras que la deposición potencioestática se utiliza principalmente para controlar la deposición y la formación de la morfología. En el caso de la deposición de películas delgadas de calcogenuros de cadmio para aplicaciones en dispositivos fotovoltaicos se utiliza la electrodeposición potencioestática por la necesidad de un alto control en la morfología de la película además de permitir el depósito de múltiples elementos simultáneamente [3].

El equipo requerido para llevar a cabo este proceso es relativamente simple. Dentro de los componentes básicos se encuentran el electrodo de trabajo (cátodo), el contraelectrodo o pieza a recubrir (ánodo), el

electrodo de referencia (termómetro), la solución electrolítica, la fuente de poder y una plancha calefactora con agitación magnética. El diagrama esquemático que muestra el proceso de electrodeposición, así como sus componentes básicos se observa en la Figura 1.

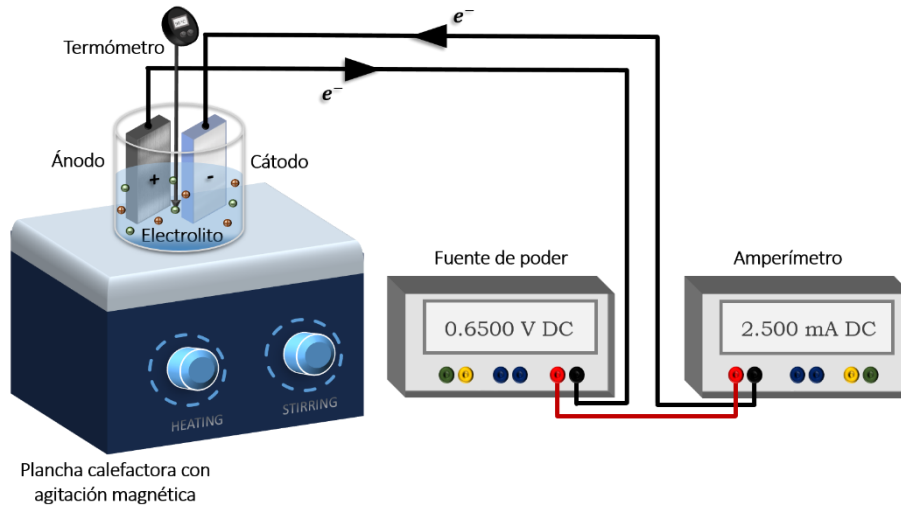


Figura 1. Diagrama esquemático de un sistema de electrodeposición.

Para comenzar con el proceso de electrodeposición, el cátodo se sumerge en el electrolito contenido en un recipiente (celda) junto con el ánodo. Para permitir que la corriente eléctrica fluya en el circuito, los dos electrodos están conectados a la fuente de poder. El cátodo está conectado al terminal negativo de la fuente, mientras que el ánodo está conectado al terminal positivo para que los iones metálicos o del compuesto se reduzcan a átomos metálicos o compuestos, que eventualmente forman el depósito en la superficie del sustrato o pieza a recubrir [4]. Los parámetros del proceso, como la composición de la solución, la temperatura, la densidad de corriente y la duración de la deposición, se optimizan para obtener películas de alta calidad con las propiedades deseadas. El grosor de la capa electrodepositada en el sustrato se determina por la duración del tiempo del baño químico. Cuanto más tiempo permanezca el objeto en el baño químico, más gruesa será la capa depositada [5].

Las películas obtenidas por electrodeposición se caracterizan mediante técnicas como microscopía electrónica de barrido (SEM), espectroscopia de absorción óptica, difracción de rayos X (XRD), espectroscopia de fotoluminiscencia (PL), fluorescencia de rayos x (XRF), microscopia de fuerza atómica (AFM), espectroscopia Raman y estudios fotoelectroquímicos para evaluar su morfología, estructura cristalina, propiedades ópticas y eléctricas [6]. Se ha demostrado que las películas de CdS, CdSe y CdTe depositadas por electrodeposición tienen una alta pureza, una estructura cristalina bien definida y una buena adherencia a los sustratos.

En este sentido, en los últimos años, se ha llevado a cabo una amplia investigación para comprender en detalle los mecanismos de nucleación y crecimiento de los cristales de calcogenuros de cadmio durante la electrodeposición, así como a la identificación de factores que inciden en la calidad de las películas depositadas. Paralelamente, se han desarrollado diversas estrategias con el fin de mejorar la eficiencia del proceso de electrodeposición y obtener películas de estos semiconductores con propiedades optimizadas para su implementación en dispositivos electrónicos, fotónicos y optoelectrónicos.

En este contexto, Kamal Premaratne y colaboradores, estudiaron la técnica de electrodeposición de películas delgadas de calcogenuros de cadmio (CdS y $\text{CdS}_x\text{Se}_{1-x}$) sobre vidrios conductores de óxido de indio-estaño (ITO) a partir de soluciones no acuosas y bajo condiciones galvanostáticas con el propósito de conocer las características estructurales de las películas depositadas y realizar experimentos fotoelectroquímicos para observar el comportamiento de las películas como electrodos de trabajo. La solución electrolítica para las películas de CdS se preparó a partir de 6.7 g/l de cloruro de cadmio (CdCl_2) y 3.3 g/l de azufre (S) en etilenglicol (EG). Para las películas de $\text{CdS}_x\text{Se}_{1-x}$ se agregaron diferentes cantidades de dióxido de selenio (SeO_2) a la solución para controlar el valor de x ($0 < x < 1$). El proceso de deposición se realizó a 170°C con una densidad de corriente constante de 20 mA/cm^2 durante 30 minutos [7]. Entre los resultados más relevantes de este trabajo se encuentra la observación de una mejora en la fotorespuesta del material a medida que varía la composición de CdS a CdSe . Los datos de reflexión de rayos X para las películas delgadas de CdS , $\text{CdS}_{0.5}\text{Se}_{0.5}$ y CdSe muestran diferencias en las intensidades y posiciones de los picos, lo que indica cambios en la estructura del material. El recocido de las películas a temperaturas de hasta 500°C resultó en un aumento de 2 a 6 veces en la fotorespuesta de las células fotoelectroquímicas. El intervalo de banda prohibida "band gap" del material varió con la composición de azufre, quedando CdS con un valor de banda de 2.40 eV y CdSe de 1.70 eV. Los espectros de difracción de rayos X de las películas delgadas mostraron diferencias en las intensidades y posiciones de los picos, lo que refleja cambios en la estructura del material. El uso de solventes no acuosos a temperaturas elevadas (170°C) permitió la producción de materiales semiconductores altamente cristalinos.

En la revisión de la literatura, se identificaron otros estudios que también documentan la deposición de películas delgadas de calcogenuros mediante electrodeposición desde soluciones no acuosas a elevadas temperaturas, como se evidencia en el trabajo presentado por Dipmala P. Sali y colaboradores [8]. Este estudio se enfocó en la electrodeposición de películas delgadas de CdTe sobre sustratos flexibles, empleando un electrolito no acuoso a 140°C . Dicho electrolito fue preparado a partir de una solución compuesta por 1 M de cloruro de cadmio (CdCl_2), 0.16 M de yoduro de potasio (KI) y 0.01 M de cloruro de telurio (TeCl_4) en etilenglicol (EG). A partir de esta formulación, se logró depositar películas con una composición rica en telurio, presentando concentraciones porcentuales atómicas de cadmio del 36.02% y de telurio del 63.98%. El análisis

morfológico reveló un crecimiento compacto y uniforme, con una estructura policristalina que incluía fases mixtas (cúbicas y hexagonales), sin necesidad de tratamiento térmico posterior a la deposición. Se determinaron valores de concentración de portadores de $4.6 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ y un ancho de banda de energía óptica de 1.52 eV. Además, las mediciones de capacitancia-voltaje respaldaron la alta concentración de portadores y el potencial de la banda plana de las películas. En conjunto, estos hallazgos sugieren que las películas delgadas de CdTe tienen el potencial para ser utilizadas en una amplia gama de aplicaciones que abarcan desde la energía solar hasta la detección de radiación y la electrónica.

En los últimos años, ha surgido un interés significativo en la comprensión integral de los procesos de nucleación y crecimiento de los cristales de calcogenuros de cadmio durante la fase de electrodeposición, junto con la identificación de los determinantes que influyen en la calidad inherente de las películas resultantes. La Tabla 1 se elaboró con el propósito de proporcionar una comparación meticulosa de los procedimientos de electrodeposición aplicados a los compuestos de CdS, CdTe y CdHgTe, considerando diversas variables operativas como la composición de la solución electrolítica, la temperatura, el pH, los electrodos empleados, las condiciones experimentales y el tratamiento térmico. Este análisis comparativo es una herramienta esencial para comprender el impacto diferencial de estos factores en las propiedades y eficacia de las películas delgadas derivadas de dichos materiales. Su comprensión profunda ha sido de ayuda en el desarrollo de estrategias destinadas a potenciar tanto la calidad como la eficiencia de estas películas en contextos de aplicación específicos.

Tabla 1. Electrodeposición de CdS, CdTe, CdHgTe bajo diferentes condiciones de trabajo.

Electrodeposición de calcogenuros de cadmio										
Material depositado		CdS			CdTe			CdHgTe		
Solución electrolítica	Solvente	H ₂ O	H ₂ O	EG	H ₂ O	EG	EG	CH ₃ CN	EG	EG
	Precursores	CdSO ₄ y Na ₂ S ₂ O ₃	CdCl ₂ y Na ₂ S ₂ O ₃	CdCl ₂ y S	CdCl ₂ , CdSO ₄ y TeO ₂	CdCl ₂ , KI y TeCl ₄	CdCl ₂ , KI y TeCl ₄	CdCl ₂ , HNO ₃ y HgCl ₂	CdCl ₂ , KI, TeCl ₄ y HgCl ₂	CdCl ₂ , KI, TeCl ₄ y HgCl ₂
	Temperatura	25 °C	90 °C	140 °C	70 °C	140 °C	90 °C	80 °C	160 °C	90 °C
	pH	2.5	4 - 5	-	2	-	-	-	-	-
Electrodos	Ánodo	Grafito	Pt	Pt	Grafito	Pt	Pt	Pt	Pt	Pt
	Cátodo	vidrio/FTO	vidrio/ITO	vidrio/ITO	vidrio/FTO	vidrio/FTO	vidrio/ITO	vidrio/SnO ₂	vidrio/ITO	vidrio/ITO
	Referencia	SCE	Ag/AgCl	-	SCE	Ag/AgCl	-	SCE	Te	-
Condiciones de experimentación	Voltaje	1.1 V	0.6 V		0.650 V	0.625 V		0.65 V	0.75 V	
	Densidad de corriente	-	-	15 mA/cm ²	-	-	2.5 mA/cm ²	-	-	2.5 mA/cm ²
	Tiempo	20 min	45 min	35 min	5 hrs	2 hrs	20 min	1 hr y 25 min	1 hr y 45 min	20 min

Tratamiento térmico	Temperatura	200 °C	-	-	400 °C	-	180 °C	300 °C	400 °C	180 °C
	Tiempo	10 min	-	-	10 min		5 min	30 min	10 min	10 s
Grosor de la película		0.07 μm	0.124 – 0.108 μm	-	1.6 μm	1-2 μm	-	1 μm	-	-
Referencia		[9]	[10]	[En este trabajo]	[11]	[8]	[En este trabajo]	[12]	[13]	[En este trabajo]

Los hallazgos de estas investigaciones han evidenciado el potencial de estos materiales en diversas aplicaciones, como celdas solares de alta eficiencia, sensores para la detección de gases y dispositivos fotoelectroquímicos, lo que ha impulsado un creciente interés en la continua optimización de los procesos de electrodeposición y en la exploración de nuevos campos de aplicación.

Paralelamente, se han logrado avances significativos en la optimización de los electrolitos empleados en la electrodeposición de calcogenuros de cadmio. Estos avances tienen como objetivo mejorar la uniformidad y la adherencia de las películas depositadas, así como controlar su composición química y su tensión interna. La comprensión de cómo la concentración de los electrolitos y la temperatura influyen en el proceso de electrodeposición ha sido esencial para el desarrollo de estrategias encaminadas a obtener películas con las propiedades ópticas y eléctricas deseadas. En el presente trabajo de tesis, nos adentraremos minuciosamente en los procesos y mecanismos inherentes a la fabricación mediante electrodeposición secuencial de una celda solar de tipo vidrio/ITO/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe.

2.1. Justificación del problema

Los semiconductores inorgánicos son comúnmente empleados en la fabricación de materiales fotovoltaicos (PV), los cuales se ensamblan en homouniones o heterouniones para crear estructuras de dispositivo positivo-negativo (PN) o positivo-intrínseco-negativo (PIN). Estas estructuras permiten la generación de portadores libres al ser expuestas a la luz. De entre los numerosos semiconductores, solo unos pocos cumplen con las condiciones ideales para la absorción de luz solar. Se busca un semiconductor con banda prohibida de 1 a 1.5 eV, alto coeficiente de absorción óptica en la región de 350 a 1000 nm, larga longitud de difusión y baja velocidad de recombinación. Aunque el silicio domina el mercado, no es ideal para celdas solares de película delgada debido a su banda prohibida indirecta. Materiales compuestos como el arseniuro de galio (GaAs) y el fosforo de indio (InP) son ideales, pero poco viables comercialmente a gran escala debido al alto costo de los precursores necesarios utilizados para su deposición. En cambio, materiales compuestos de los grupos II-VI como telurio de cadmio (CdTe), seleniuro de cadmio (CdSe) y sulfuro de cadmio (CdS), depositados económicamente a baja temperatura, son utilizados para construir estructuras de uniones múltiples, mejorando la recolección de portadores y el rendimiento de las celdas solares. Aunque las celdas PN de CdS/CdTe y CdS/CdSe tienen eficiencias superiores al 17%, su limitada capacidad de absorción de energías menores que la de su banda prohibida reduce su eficiencia cuántica. En este contexto, se propone un estudio teórico para seleccionar el material óptimo como pozo cuántico (QW) en una celda solar con estructura vidrio/ITO/CdS/CdSe/Ag. El objetivo es desarrollar una estructura vidrio/ITO/CdS/CdTe/CdHg_{1-x}Te_x/CdTe/Ag para ampliar el espectro de absorción. El diseño teórico se basará en el cálculo de la tasa de generación de excitones $G(x)$, el ancho de la zona de agotamiento en la unión pn fuera de equilibrio y las concentraciones de carga $n(x)$ y $p(x)$ en cada material de la unión. Se considera la técnica de crecimiento por electrodeposición para fabricar los dispositivos fotovoltaicos formados por capas de material semiconductor sobre un sustrato de vidrio soda-lima. El interés sobre esta técnica es debido a que permite obtener de manera controlada películas delgadas y uniformes, además de ser una técnica con facilidad de implementación a bajo costo.

2.2. Objetivos del proyecto

2.2.1. Objetivo general

El objetivo general de este proyecto es desarrollar una base teórica - práctica para el diseño e implementación de celdas solares con capa activa nanoestructurada con calcogenuros de cadmio utilizando la técnica de crecimiento por electrodeposición secuencial.

2.2.2. Objetivos específicos

Para el logro del objetivo general de este trabajo de tesis se plantean los siguientes objetivos específicos:

1. Desarrollar algoritmos teóricos de diseño que incluyan los siguientes puntos:
 - a. Calcular de manera teórica la tasa de generación de excitones $G(x)$ en la capa activa nanoestructurada de los dispositivos diseñados utilizando la técnica de la matriz lineal de transferencia óptica.
 - b. Calcular las concentraciones de carga $n(x)$ y $p(x)$ y las dimensiones de la zona de depleción en la capa activa del dispositivo fuera de equilibrio a través del cálculo de autoconsistencia entre la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de cargas.
 - c. Calcular de manera teórica los parámetros que caracterizan el desempeño del dispositivo mediante el cálculo de la curva de densidad de corriente-voltaje (JV), el voltaje de circuito abierto (V_{OC}), la densidad de corriente de corto circuito (J_{sc}), el factor de llenado (FF) y la eficiencia de conversión (PCE) utilizando las ecuaciones básicas para dispositivos de unión pn con una irradiación solar promedio de 100 mW/cm^2 .
2. Desarrollar algoritmos prácticos de implementación que incluyan los siguientes puntos:
 - a. Implementar de manera práctica sobre un sustrato de vidrio soda-lima los dispositivos diseñados utilizando la técnica de crecimiento por electrodeposición.
 - b. Medir de manera práctica los parámetros que caracterizan el desempeño del dispositivo implementado (JV, V_{OC} , J_{sc} , FF y PCE).
 - c. Realizar la correlación teórica-práctica de la curva JV, el V_{OC} , la J_{sc} , el FF y la PCE obtenidas en el diseño teórico con las obtenidas en las mediciones prácticas.
 - d. Calcular de manera teórica el porcentaje en la tasa de generación de excitones que ajuste la eficiencia obtenida de manera teórica con la medida en la implementación práctica.

2.3. Hipótesis

La técnica de la matriz lineal de transferencia óptica puede ser utilizada para analizar la propagación y disipación del campo eléctrico óptico en un apilado de capas de diferentes materiales, la solución de autoconsistencia entre la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de cargas puede ser utilizada para calcular las concentraciones de carga $n(x)$ y $p(x)$ en la capa activa de la estructura multicapa absorbidora de fotones y las ecuaciones básicas de desempeño en el dispositivo de unión pn pueden ser utilizadas para caracterizar los parámetros que son base para el cálculo de eficiencias de conversión en dispositivos detectores de luz. Adicionalmente, la técnica de electrodeposición es una técnica sencilla y económica que ha

demostrado su gran utilidad en el crecimiento de películas delgadas de material orgánico en sustrato de vidrio soda-lima.

Por tal motivo, la hipótesis de este trabajo de tesis se establece de la siguiente manera: utilizando la técnica de la matriz lineal de transferencia óptica, la solución autoconsistencia entre la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de cargas, las ecuaciones básicas para caracterizar el desempeño de dispositivos de unión pn así como la técnica de crecimiento por electrodeposición secuencial se pueden diseñar teóricamente e implementar prácticamente dispositivos fotovoltaicos con capas activas nanoestructuradas con calcogenuros de cadmio que den una correlación cercana entre las características de desempeño obtenidas en el diseño teórico y las medidas en la implementación práctica.

CAPÍTULO III. DISEÑO Y ANÁLISIS TEÓRICO

En este capítulo, se abordará el diseño teórico de una celda solar fotovoltaica, dividiéndose en dos aspectos fundamentales. En primer lugar, el análisis óptico se basará en la teoría de la matriz de transferencia óptica. Por otro lado, la parte eléctrica se fundamentará en la solución autoconsistente de las ecuaciones de Poisson y Schrödinger. Esta última incluirá la densidad de corriente en corto circuito, el factor de llenado, la eficiencia de conversión, entre otros parámetros eléctricos clave. En síntesis, este capítulo abordará aspectos cruciales que desempeñan un papel fundamental en el desarrollo y caracterización del rendimiento de una celda solar.

3.1. Diseño teórico de una celda solar unitaria

La finalidad de diseñar teóricamente una celda solar es estructurar y dimensionar el dispositivo de acuerdo a los criterios de diseño y necesidades del diseñador. Dentro de los criterios de diseño se encuentran: el espectro de radiación incidente, el voltaje, la corriente y la potencia que deberá entregar la celda solar.

Para determinar la estructura del dispositivo se debe definir qué material formara cada capa, así como el orden o posición de estas en el dispositivo. El proceso de dimensionamiento consiste en determinar las dimensiones físicas del dispositivo, es decir que ancho, largo y grosor tendrá cada capa.

El procedimiento de diseño teórico de una celda solar unitaria está constituido de tres procesos, los cuales se mencionan a continuación:

- El primero es un análisis óptico que consiste en determinar la propagación del campo electromagnético óptico en la estructura multicapa que forma el dispositivo, para obtener la tasa de generación de excitones (G_t) en la capa activa.
- El tercero es un análisis eléctrico que consiste en determinar las concentraciones de cargas, el potencial electrostático y el dimensionamiento de la zona de depleción de la unión pn (fuera de equilibrio térmico) que forma el dispositivo.
- El cuarto consiste en calcular las características de desempeño teórico del dispositivo incluyendo la curva JV, el V_{OC} , la J_{sc} , el FF y la PCE.

En las siguientes secciones se verá a detalle cada uno de los puntos antes mencionados.

3.1.1. Estructura básica de una celda solar unitaria

Las celdas solares suelen componerse de heterouniones pn, donde los distintos elementos que conforman la estructura se depositan uno sobre otro, como se ilustra en la Figura 3.1.1.1. Estos elementos incluyen el contacto frontal, el contacto inferior, la capa ventana, la capa activa y el sustrato sobre el cual se depositan dichos componentes. A continuación, se proporciona una breve descripción de cada uno de ellos:

- **Contacto inferior**

Este componente, generalmente de metal conductor, actúa como electrodo tipo n o p, dependiendo de la configuración de la estructura. Debe tener una alta función de trabajo para lograr un buen contacto óhmico con la capa activa.

- **Capa activa**

Esta capa es responsable de generar excitones (pares electrón-hueco generados por la absorción de fotones), principalmente. Se denomina capa activa debido a su función en la unión pn, que consiste en absorber la mayor cantidad posible de radiación solar para generar fotocorriente.

- **Material ventana**

Este material transporta huecos y se caracteriza por su alta conductividad fotoeléctrica. Su función es permitir el paso de la mayor cantidad posible de radiación solar a la capa activa. Junto con la capa activa, forma la unión pn. Es crucial que esta capa sea delgada para cumplir su función correctamente.

- **Contacto frontal**

Se trata de un óxido conductor transparente que actúa como contacto frontal. Debe ser transparente para evitar la absorción de la luz incidente en la celda solar.

- **Sustrato**

Este componente debe ser altamente transparente, poseer suficiente resistencia térmica y rigidez para soportar las demás capas de la estructura.



Figura 3.1.1.1. Estructura de una celda solar formada con heterounión pn.

3.1.2. Propagación de campos electromagnéticos en estructuras multicapa

Para analizar la propagación de ondas electromagnéticas en estructuras multicapa, se recurre a modelos matemáticos, como la teoría de la matriz de transferencia óptica. Esta teoría considera la configuración convencional de los dispositivos fotovoltaicos y emplea los coeficientes de Fresnel para describir la transmisión y reflexión de la luz incidente en las interfaces de la estructura. Bajo la suposición de linealidad en los procesos del campo eléctrico óptico y la homogeneidad del medio, se estima que una porción de la luz incidente se transmite a través de la estructura mientras que otra parte se refleja.

La estructura del dispositivo se compone de un apilado de m capas, cada una caracterizada por su índice de refracción complejo $\tilde{n}(\lambda) = \tilde{n}(\lambda) + ik(\lambda)$ y su espesor d . En la Figura 3.1.2.1 se observa cómo la estructura se divide en dos partes, numeradas comenzando con cero para el sustrato, uno para la primera capa y así sucesivamente. La figura también ilustra cómo la luz incide en el sustrato y se propaga a lo largo del eje x , transmitiéndose (T) y reflejándose (R) entre las interfaces, generando una onda de luz en dirección opuesta (E^-) a la original (E^+). Es fundamental destacar que $\tilde{n}(\lambda) = \tilde{n}(\lambda) + ik(\lambda)$ depende tanto de la longitud de onda como del espesor d .

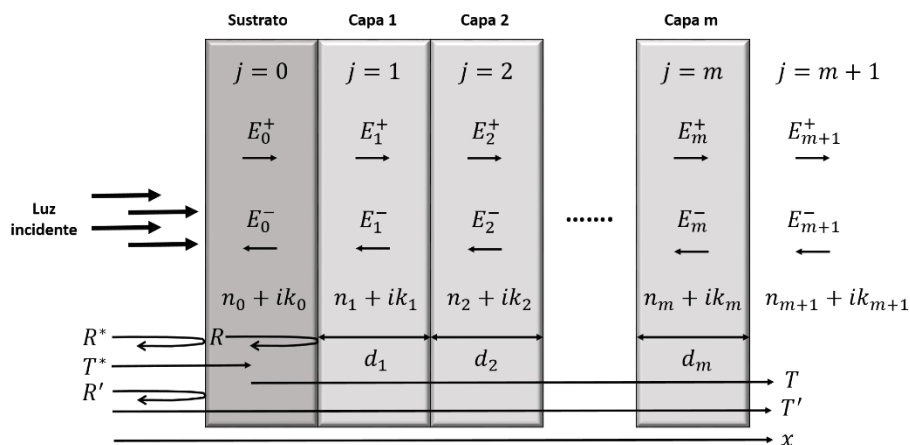


Figura 3.1.2.1. Estructura multicapa típica crecida en un sustrato.

- Interfaces

Una interfaz se define como la superficie límite o de separación entre dos medios, representados por capas delgadas, cada uno con su propio valor de índice de refracción complejo $\tilde{n} = n + ik$. Al considerar estos índices de refracción complejos para cada material, se puede calcular los coeficientes de reflexión (r_{ij}) y transmisión (t_{ij}) complejos en las interfaces. Estos coeficientes miden la relación entre los campos eléctricos transmitidos y reflejados cuando una onda experimenta un cambio en las propiedades del medio por el que se propaga.

En la Figura 3.1.2.2, se observa cómo la luz incidente entra desde el lado izquierdo de la estructura en dirección al eje z, reflejándose en la interfaz y formando una onda de luz en dirección opuesta a la original. Es relevante señalar que la transmisión y reflexión dependen de la polaridad de la onda, influenciada por la interacción de la onda plana con la interfaz y la orientación de propagación de la onda plana al atravesar el medio. Para calcular r_{ij} y t_{ij} , se emplean las ecuaciones siguientes:

$$r_{ij} = \frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \quad (1)$$

$$t_{ij} = 1 + r_{ij} \quad (2)$$

Donde n_1 y n_2 son el índice de refracción del primer y segundo medio, respectivamente; k_1 y k_2 son el coeficiente de extinción del primer y segundo medio, respectivamente.

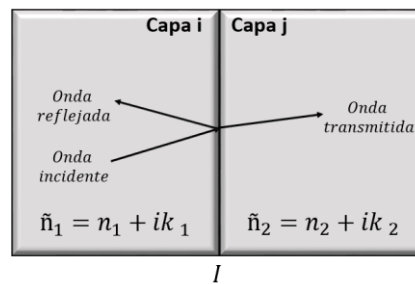


Figura 3.1.2.2. Transmisión y reflexión en una interface entre dos medios diferentes.

- Matriz de interface

La matriz de interfaz describe el efecto del campo electromagnético incidente al impactar en la interfaz entre dos capas delgadas. Para deducir la ecuación que representará esta matriz, es necesario primero encontrar la matriz característica a partir de los coeficientes S_{11} , S_{12} , S_{21} y S_{22} . Estos coeficientes se deducen de los siguientes casos:

- Caso #1:

Si la onda electromagnética impacta de izquierda a derecha (Fig. 3.1.2.3a), aplicando la condición de la interfaz:

$$\text{Campos incidentes } (E_i^+) + \text{Campos reflejados } (r_{ij}E_i^+) = \text{Campo transmitido } (t_{ij}E_i^+)$$

En el medio j no habrá onda reflejada, ya que es una interfaz simple. Entonces:

$$S_{11} = \frac{1}{t_{ij}} \quad (3)$$

$$S_{21} = \frac{r_{ij}}{t_{ij}} \quad (4)$$

- Caso #2:

Si la onda electromagnética impacta de derecha a izquierda (Fig. 3.1.2.3b), aplicando la condición de la interfaz:

$$\text{Campos incidentes } (E_j^+) + \text{Campos reflejados } (r_{ji}E_j^+) = \text{Campo transmitido } (t_{ij}E_j^+)$$

En el medio j no habrá onda reflejada, dado que es una interfaz simple. Entonces:

$$S_{12} = \frac{r_{ij}}{t_{ij}} \quad (5)$$

$$S_{22} = \frac{1}{t_{ij}} \quad (6)$$

Teniendo los coeficientes S_{11} , S_{12} , S_{21} y S_{22} la matriz característica ahora se convierte en la matriz de interface, tomando $I_{11} = S_{11}$, $I_{12} = S_{12}$, $I_{21} = S_{21}$ y $I_{22} = S_{22}$. Por lo tanto, la ecuación de la matriz de interface puede representarse por cualquiera de las siguientes opciones:

$$I = \begin{pmatrix} I_{11} & I_{12} \\ I_{21} & I_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_{ij}} & \frac{r_{ij}}{t_{ij}} \\ \frac{r_{ij}}{t_{ij}} & \frac{1}{t_{ij}} \end{pmatrix} = \frac{1}{t_{ij}} \begin{pmatrix} 1 & r_{ij} \\ r_{ij} & 1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

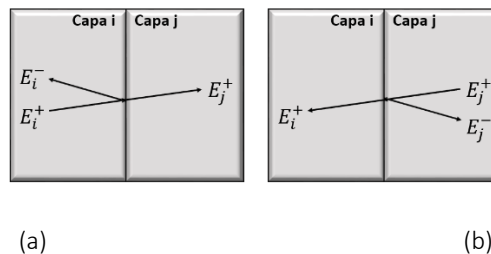


Figura 3.1.2.3. Interface entre dos capas delgadas (capa i y capa j).

- **Matriz de propagación**

La matriz de propagación describe el efecto del campo electromagnético al propagarse a través de las capas que forman la estructura, excepto en la capa absorbente. Esta matriz considera la distancia dentro de las capas (Fig. 3.1.2.4). Por lo tanto, podemos expresar la matriz de propagación como:

$$P = \begin{pmatrix} e^{-i\beta_j * d_j} & 0 \\ 0 & e^{+i\beta_j * d_j} \end{pmatrix} \quad (8)$$

Donde d_j representa el ancho de la capa y β_j es la constante de propagación, también conocida como el espesor en fase de la capa. Esta constante refleja el cambio de fase de la onda al propagarse a través de la capa, y puede expresarse como:

$$\beta_j = \frac{2\pi d_z}{\lambda} n_j \cos\phi \quad (9)$$

Donde n_j es el índice de refracción de la capa, ϕ es el ángulo de transmisión, d_z es el ancho de la capa y λ es la longitud de onda. Además, $e^{-i\beta_j}$ indica la disminución de la amplitud a medida que la onda se propaga en el interior de la capa. Para incorporar esta expresión en la matriz de propagación, es necesario convertirla a su forma polar mediante el equivalente de Euler:

$$e^{\pm i\beta_j} = e^{\beta_j} \cos(\phi) \pm j \text{sen}(\phi) \quad (10)$$

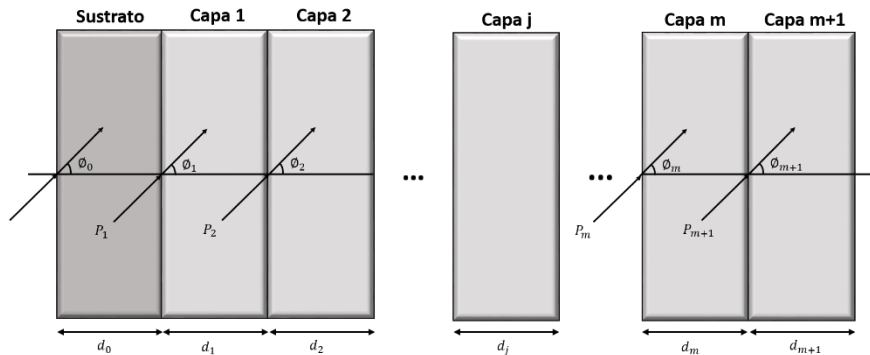


Figura 3.1.2.4. Incidencia oblicua con un ángulo de transmisión (ϕ) en cada capa de la estructura.

- **Matriz de Scattering**

La matriz de Scattering es fundamental en problemas de dispersión tridimensional. No obstante, en este contexto, se adaptó esta matriz para derivar modelos matemáticos que permitieran calcular coeficientes de transmisión y reflexión. La estructura, como se observa en la Figura 3.1.2.5, se divide en tres partes: capas anteriores (M_j' - izquierda), capa a analizar (j) y capas posteriores (M_j'' - derecha). Esto facilita la comprensión

de la relación entre los campos de entrada y salida en la estructura multicapa. Así, podemos expresar la matriz de Scattering como:

$$M = M'_j M''_j \quad (11)$$

$$M'_j = P_0 I_0 P_1 I_1 P_2 I_2 \quad (12)$$

$$M''_j = I_m P_m I_{m+1} P_{m+1} \quad (13)$$

Donde I es la matriz de interface entre dos medios y P es la matriz de propagación en el medio. Este sistema de ecuaciones también puede representarse de la siguiente manera:

$$M'_j = \begin{pmatrix} e^{-i\beta_{j0} * d_{j0}} & 0 \\ 0 & e^{+i\beta_{j0} * d_{j0}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{t_{ij0}} & \frac{r_{ij0}}{t_{ij0}} \\ \frac{r_{ij0}}{t_{ij0}} & \frac{1}{t_{ij0}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\beta_{j1} * d_{j1}} & 0 \\ 0 & e^{+i\beta_{j1} * d_{j1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{t_{ij1}} & \frac{r_{ij1}}{t_{ij1}} \\ \frac{r_{ij1}}{t_{ij1}} & \frac{1}{t_{ij1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\beta_{j2} * d_{j2}} & 0 \\ 0 & e^{+i\beta_{j2} * d_{j2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{t_{ij2}} & \frac{r_{ij2}}{t_{ij2}} \\ \frac{r_{ij2}}{t_{ij2}} & \frac{1}{t_{ij2}} \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$M''_j = \begin{pmatrix} e^{-i\beta_{jm} * d_{jm}} & 0 \\ 0 & e^{+i\beta_{jm} * d_{jm}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{t_{ijm}} & \frac{r_{ijm}}{t_{ijm}} \\ \frac{r_{ijm}}{t_{ijm}} & \frac{1}{t_{ijm}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\beta_{j_{m+1}} * d_{j_{m+1}}} & 0 \\ 0 & e^{+i\beta_{j_{m+1}} * d_{j_{m+1}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{t_{ij_{m+1}}} & \frac{r_{ij_{m+1}}}{t_{ij_{m+1}}} \\ \frac{r_{ij_{m+1}}}{t_{ij_{m+1}}} & \frac{1}{t_{ij_{m+1}}} \end{pmatrix} \quad (15)$$

Es relevante destacar que al contar con las matrices de propagación (P) e interfaz (I), se simplifica el estudio del comportamiento del campo eléctrico ($E_j(z)$) en cualquier capa de la estructura.

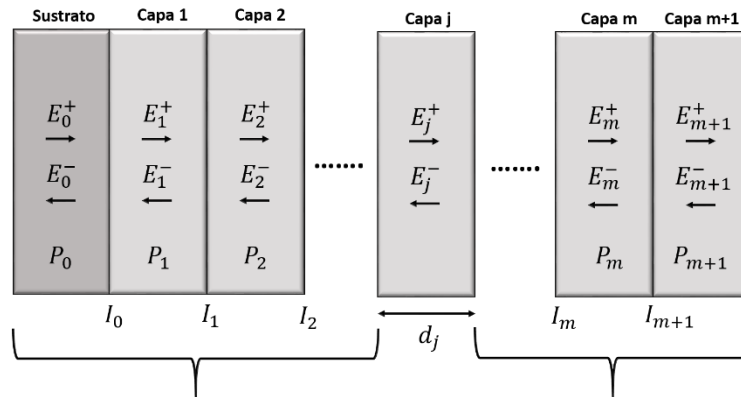


Figura 3.1.2.5. División de la estructura multicapa: capas anteriores (M'_j), capa a analizar (j) y capas posteriores (M''_j).

- **Coefficientes de reflexión y transmisión**

Los coeficientes de reflexión (r_{ij}) y transmisión (t_{ij}) complejos se definen como la relación entre los vectores reflejados y transmitidos, respectivamente, en relación con el vector incidente en la interfaz. En términos sencillos, r_{ij} representa la proporción de flujo de energía reflejado por la interfaz con respecto al flujo incidente, mientras que t_{ij} es la relación entre la intensidad de la luz transmitida entre las interfaces de la estructura y la intensidad de la luz incidente. Estos coeficientes se expresan mediante las siguientes fórmulas:

- Para capas anteriores (es decir las capas que se encuentran a la izquierda de la capa activa):

$$r_j' = -\frac{M'_{j,21}}{M'_{j,11}} \quad (16)$$

$$t_j' = \frac{1}{M'_{j,11}} \quad (17)$$

- Para capas posteriores (es decir las capas que se encuentran a la derecha de la capa activa):

$$r_j'' = \frac{M''_{j,21}}{M''_{j,11}} \quad (18)$$

$$t_j'' = \frac{1}{M''_{j,11}} \quad (19)$$

Estos coeficientes se calculan mediante la aplicación de las matrices de Scattering. Se extraen los valores tanto de M' como de M'' y se introducen en las fórmulas correspondientes. Al final, los valores obtenidos de estos coeficientes se utilizan para determinar el coeficiente de transmisión (t_j^+) en la capa activa.

- **Coeficiente de transmisión en la capa activa de la unión PN**

Cuando se busca determinar la probabilidad de que una partícula atraviese varias interfaces y alcance la capa activa de la estructura, es fundamental aplicar y resolver el coeficiente de transmisión (t_j^+). Este coeficiente establece la relación entre el flujo de onda incidente en la interfaz y la cantidad de luz (onda electromagnética) que se transmite a través de ella. Se expresa de la siguiente manera:

$$t_j^+ = \frac{t_j'}{1 - r_j' - r_j'' * e^{2i * \beta_j * d_j}} \quad (20)$$

Donde t_j' y r_j' son los coeficientes de transmisión y reflexión para capas anteriores, respectivamente; r_j'' es el coeficiente de reflexión para capas posteriores, β_j es la constante de propagación, y d_j es el ancho de la capa j (capa activa). Es relevante señalar que este coeficiente está influenciado por el espesor de la capa, es decir, a menor ancho del material, mayor será la transmitancia. El valor del espesor de la capa se sustituye en el término exponencial ($e^{2i * \beta_j * d_j}$). Como se mencionó previamente, para trabajar con un exponencial, es necesario convertirlo a su forma polar mediante el equivalente de Euler.

- **Campo eléctrico**

El cálculo del campo eléctrico es crucial para este estudio, ya que proporciona información sobre el comportamiento de la propagación de ondas electromagnéticas a través de la capa activa de la estructura.

Una vez que se han determinado los valores de los coeficientes de reflexión (r_j'') y transmisión (t_j^+) de la capa activa, se puede calcular $E_j(x)$ en la capa j en dirección de z a la derecha mediante la siguiente ecuación:

$$E_j(x) = t_j^+ \left[e^{i\beta_j z} + r_j'' \times e^{i\beta_j(2d_j - x)} \right] E_0^+ \quad (21)$$

Donde t_j^+ es el coeficiente de transmisión de la capa activa, r_j'' es el coeficiente de reflexión para capas posteriores, E_0^+ es el espectro de irradiancia el cual debe ser multiplicado por el coeficiente de transmitancia del sustrato además de depender de la longitud de onda en la que se esté trabajando, $d_j \approx z$ es el ancho de la película y β_j es la constante de propagación.

- **Energía promedio disipada**

El flujo de energía disipado por unidad de tiempo en una posición específica, es decir, el promedio de energía disipada por segundo en la capa j (capa activa de la unión pn) en la posición z para incidencia normal, se denota como $Q_j(z)$. Este flujo de energía, que también puede interpretarse como la conservación de energía según el teorema de Poynting, se calcula a partir del campo eléctrico total ($E_j(z)$) que se propaga en la estructura multicapa. La expresión para $Q_j(z)$ se obtiene mediante la aplicación de las ecuaciones de Maxwell:

$$Q_j(z) = \frac{1}{2} c \varepsilon_0 \alpha_j n_j |E_j(z)|^2 \quad (22)$$

Donde c es la velocidad de la luz en el vacío, ε_0 es la permitividad en el vacío, α_j es el coeficiente de absorción, n_j es el índice de refracción, y $E_j(z)$ es el campo eléctrico total en la posición z . El factor $\frac{1}{2}$ se introduce debido al promedio de las variaciones rápidas de frecuencia.

- **Tasa de generación de excitones**

La tasa de generación de excitones es esencial para evaluar la eficiencia de conversión de energía de un dispositivo, ya que impacta directamente en su rendimiento para generar corriente eléctrica.

Matemáticamente, se expresa mediante la integral de la densidad de flujo de fotones incidentes, considerando la probabilidad de absorción del material en función de la longitud de onda. En celdas sin pozos cuánticos, esta integral abarca el espectro de longitudes de onda relevantes para la absorción en el material del dispositivo, tal y como se muestra en la siguiente expresión:

$$G(x) = n \int_{350}^{800} \frac{\lambda}{hc} Q(z, \lambda) d\lambda \quad (23)$$

En el caso de celdas con pozos cuánticos, donde se incorpora un material específico en la capa activa del dispositivo, la tasa de generación de excitones se calcula de manera similar, pero se agrega un término que

representa la contribución de los excitones generados en el material del pozo cuántico. Este enfoque permite evaluar la eficiencia de conversión de manera más completa al considerar las propiedades específicas de los materiales utilizados en la estructura del dispositivo.

$$G(x) = n \int_{350}^{800} \frac{\lambda}{hc} Q(z, \lambda) d\lambda + n \int_{800}^{1000} G_{QW} = G_{pn} + G_{QW} \quad (24)$$

Donde G_{pn} es la tasa de generación de excitones en el material burdo de la unión pn y G_{QW} es la tasa de generación de excitones en el material insertado en la capa activa de la unión pn.

3.1.3. Concentración de cargas, potencial electrostático y dimensionamiento de la zona de depleción

Para determinar la corriente de corto circuito en un dispositivo fotovoltaico en estado estacionario, es necesario resolver simultáneamente las ecuaciones de Poisson y continuidad de carga (ecuaciones 25, 26 y 27). Esto implica establecer valores iniciales para el potencial electrostático y las densidades de carga, calcular la corrección del potencial electrostático $\delta\psi$ utilizando la ecuación de Poisson y actualizar las densidades de carga mediante la resolución de las ecuaciones de continuidad hasta lograr la convergencia. Este proceso iterativo garantiza una solución autoconsistente que permite determinar la corriente de corto circuito del dispositivo.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = \frac{q}{\epsilon_r \epsilon_0} [n(x) - p(x)] \quad (25)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} J_n(x) = qU(x) \quad (26)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} J_p(x) = qU(x) \quad (27)$$

Donde $\psi(x)$ es el potencial electrostático, q es la carga del electrón, $n(x)$ y $p(x)$ es la concentración de electrones y huecos, respectivamente; $J_n(x)$ y $J_p(x)$ es la densidad de corriente de electrones y huecos, respectivamente; ϵ_r es la constante dieléctrica del material y $U(x)$ es la tasa de generación de cargas libres.

A continuación, se exponen las ecuaciones de difusión y de corriente de carga, que establecen la relación entre la densidad de corriente, la concentración de carga y el potencial eléctrico. Estas ecuaciones son fundamentales para obtener una solución de las ecuaciones 25, 26 y 27:

$$J_n = qn\mu_n \frac{\partial}{\partial x} \psi + qD_n \frac{\partial}{\partial x} n \quad (28)$$

$$J_p = qp\mu_p \frac{\partial}{\partial x} \psi + qD_p \frac{\partial}{\partial x} p \quad (29)$$

Donde, D_p y D_n es el coeficiente de difusión en huecos y electrones, respectivamente; q es la carga del electrón, μ_p y μ_n es la movilidad de huecos y electrones, respectivamente; $\psi(x)$ es el potencial electrostático, $n(x)$ y $p(x)$ es la concentración de electrones y huecos, respectivamente. Cabe mencionar que en altas concentraciones de carga los coeficientes de difusión incrementan.

3.1.4. Características de desempeño en una celda solar unitaria

Una vez completado el diseño teórico, se procede al cálculo de las características de desempeño del dispositivo. Estas características incluyen el voltaje de circuito abierto (V_{OC}), la densidad de corriente de corto circuito (J_{SC}), la curva de desempeño de la celda solar (JV), factor de llenado (FF), eficiencia de conversión (PCE), resistencia (R_{MaxPot}) y potencia máxima (P_{MaxPot}).

- **Voltaje de circuito abierto**

El voltaje de circuito abierto es el máximo voltaje disponible en la celda solar cuando la corriente es igual a cero y se determina utilizando la siguiente ecuación:

$$V_{OC} = \frac{kT}{q} \ln \left\{ \frac{qG_L(L_p + L_n)}{q \left[\frac{D_p}{L_p} p_{n0} + \frac{D_n}{L_n} n_{p0} \right]} + 1 \right\} \quad (30)$$

Donde kT es el ruido térmico, L_p y L_n es la distancia de difusión de cargas en huecos y electrones, respectivamente; G_L es la tasa de generación de excitones en el Qw, D_p y D_n es el coeficiente de difusión en huecos y electrones, respectivamente; n_{p0} y p_{n0} es la concentración de cargas minoritarias en equilibrio para electrones y huecos, respectivamente; y q es la carga del electrón en el vacío.

- **Densidad de corriente de corto circuito**

La densidad de corriente de corto circuito se determina utilizando la siguiente ecuación:

$$J_{SC} = -qG_L(L_p + L_n) \quad (31)$$

Donde L_p y L_n es la distancia de difusión de cargas en huecos y electrones, G_L es la tasa de generación de excitones en el Qw y q es la carga del electrón en el vacío.

- **Curva de desempeño JV de la celda solar unitaria**

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

$$J = \left[q \frac{D_p}{L_p} P_{n0} + q \frac{D_n}{L_n} n_{p0} \right] e^{\left(\frac{qV}{kT} - 1 \right)} - qG_L(L_p + L_n) \quad (32)$$

Donde D_p y D_n es el coeficiente de difusión en huecos y electrones, respectivamente; L_p y L_n es la distancia de difusión de cargas en huecos y electrones; n_{p0} y P_{n0} es la concentración de cargas minoritarias en equilibrio para electrones y huecos, respectivamente; V es el voltaje, kT es el ruido térmico, q es la carga del electrón en el vacío y G_L es la tasa de generación de excitones en el Qw.

Los valores de los parámetros mencionados anteriormente se insertan en la Ecuación (13), lo que permite expresar la ecuación en función de V , variando desde 0 hasta el valor de V_{OC} . Esto nos proporciona los valores para J y nos permite graficar (V vs J).

- **Ancho del dispositivo**

Para encontrar el ancho de la celda solar unitaria diseñada se utiliza la siguiente ecuación:

$$W = \frac{x\% \times I_{MaxPot}}{L \times J_{MaxPot}} \quad (33)$$

Donde $x\%$ es la variable en porcentaje, I_{MaxPot} es la corriente máxima deseada, L es el largo del dispositivo y J_{MaxPot} es la densidad de corriente a máxima potencia.

- **Corriente a máxima potencia deseada (real)**

Es la corriente máxima que se desea obtener en la celda solar y para encontrarla se utiliza la siguiente ecuación:

$$I_{MaxPotD} = J_{MaxPot} \times A \quad (34)$$

Donde J_{MaxPot} es la densidad de corriente a máxima potencia y A es el área transversal del dispositivo.

- **Factor de llenado**

El factor de llenado es el parámetro que determina la máxima densidad de potencia proveniente de la celda solar. Puede ser determinado empíricamente por medio de la siguiente ecuación:

$$FF = \frac{V_{MaxPot} \times I_{MaxPotD}}{V_{OC} \times I_{SC}} \quad (35)$$

Donde V_{MaxPot} es el voltaje máximo deseado, $I_{MaxPotD}$ es la corriente a máxima potencia deseada, V_{OC} es el voltaje de circuito abierto y I_{SC} es la corriente de corto circuito.

- **Eficiencia de conversión**

La eficiencia de conversión es un parámetro fundamental que proporciona información sobre el rendimiento de una celda solar. Esta eficiencia depende tanto de la intensidad de la luz solar incidente en la celda como de la temperatura a la que opera. Se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$PCE = \frac{V_{MaxPot} \times J_{MaxPot}}{P_{incidente}} \quad (36)$$

Donde V_{MaxPot} es el voltaje máximo deseado, J_{MaxPot} es la densidad de corriente a máxima potencia y $P_{incidente}$ es la potencia incidente sobre la tierra.

- **Resistencia a máxima potencia**

Es definida como la resistencia de la celda en el punto de potencia máximo y se encuentra mediante la siguiente ecuación:

$$R_{MaxPot} = \frac{V_{MaxPot}}{I_{MaxPotD}} \quad (37)$$

Donde V_{MaxPot} es el voltaje máximo deseado y $I_{MaxPotD}$ es la corriente a máxima potencia deseada.

- **Potencia máxima deseada**

Es la potencia máxima que se desea obtener en la celda solar y se determina a partir de la siguiente ecuación:

$$P_{MaxPot} = JP_{MaxPot} \times A \quad (38)$$

Donde JP_{MaxPot} es la densidad de potencia a máxima potencia y A es el área transversal del dispositivo.

3.1.5. Diseño y caracterización de una celda solar unitaria de tipo: Vidrio/CdS/CdTe/Ag

En la tesis de maestría previa, se abordó exhaustivamente el diseño teórico y la implementación práctica de una celda solar de unión pn con una estructura específica: Vidrio soda-lima/ITO/CdS/CdTe/Ag (Fig. 3.1.5.1). Para el diseño teórico, se consideró el análisis descrito en las secciones anteriores (3.1.2 a 3.1.4). En cuanto a la implementación práctica, se empleó la técnica de aspersión pirolítica, que facilita el depósito de múltiples capas sobre el sustrato de vidrio de manera eficiente. Los requisitos de diseño establecidos fueron los siguientes: el dispositivo debía tener un espectro de irradiación incidente de 350 nm a 800 nm, conforme al estándar AM1.5 global. Además, se requería que la celda fuera capaz de suministrar una corriente de máxima potencia de 500 mA y generar un voltaje de máxima potencia de 3V.

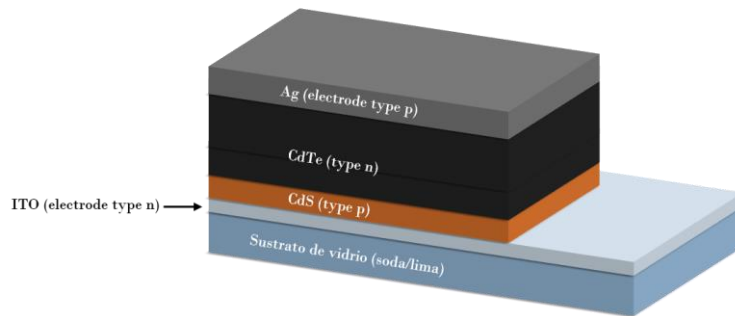


Figura 3.1.5.1. Celda solar formada por heterounión pn de tipo: Vidrio soda- lima/ITO/CdS/CdTe/Ag.

Mediante la aplicación de la Ecuación 21 en el análisis de la matriz de transferencia óptica, se logró obtener la Gráfica 3.1.5.1, que ofrece información sobre la propagación del campo eléctrico en la capa activa (CdTe) de la estructura multicapa. En la gráfica, se observa que las ondas electromagnéticas aumentan su intensidad desde 350 nm hasta 650 nm, momento en el cual el CdTe alcanza su máximo de absorción de la radiación incidente. Posteriormente, a partir de los 650 nm, la absorción comienza a disminuir hasta los 800 nm, siguiendo el mismo patrón que el espectro incidente. A continuación, se presenta el resultado del cálculo de $E_j(x)$ para una longitud de onda de 600 nm en la posición $x = 1$ del ancho de la capa de CdTe, junto con los parámetros empleados en el cálculo:

$$t_j^+ = 1.0041 - 0.1506j$$

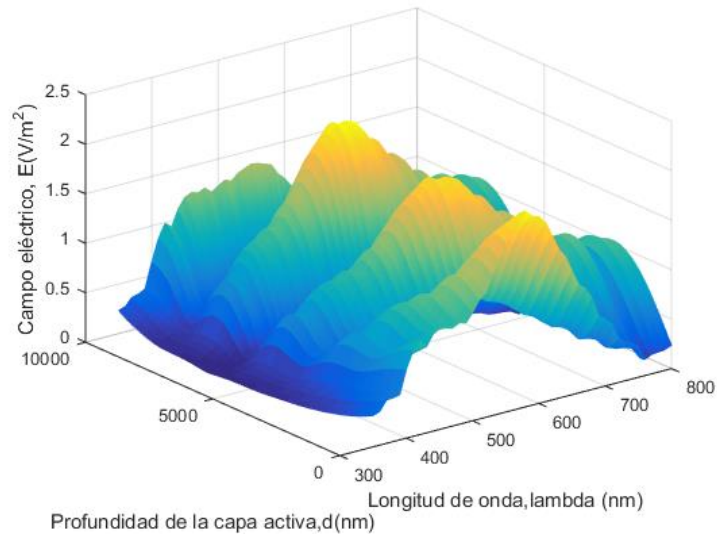
$$r_j'' = 0.2688 + 0.8537j$$

$$E_0^+ = 1.1866 W^{-2} nm^{-1}$$

$$d_j \approx z = 10000 nm$$

$$\beta_j = 5.4006 * 10^{-4} + 5.6232 \cdot 10^{-5}j$$

$$E_j = 1.5214 v/m^2$$



Gráfica 3.1.5.1. Distribución del campo eléctrico total de 350 nm a 800 nm.

Además, mediante la aplicación de la Ecuación 22, se generó la Gráfica 3.1.5.2, que ilustra el comportamiento de la energía promedio disipada del campo eléctrico por segundo en la capa de CdTe en función de su profundidad. Se observa una mayor disipación de energía a 650 nm, ya que esta longitud de onda corresponde al punto de máxima absorción de la radiación incidente. A continuación, se presenta el resultado del cálculo de $Q_j(z)$ para una longitud de onda de 600 nm en la posición $z = 1$ del ancho de la capa de CdTe, junto con los parámetros empleados en el cálculo:

$$c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

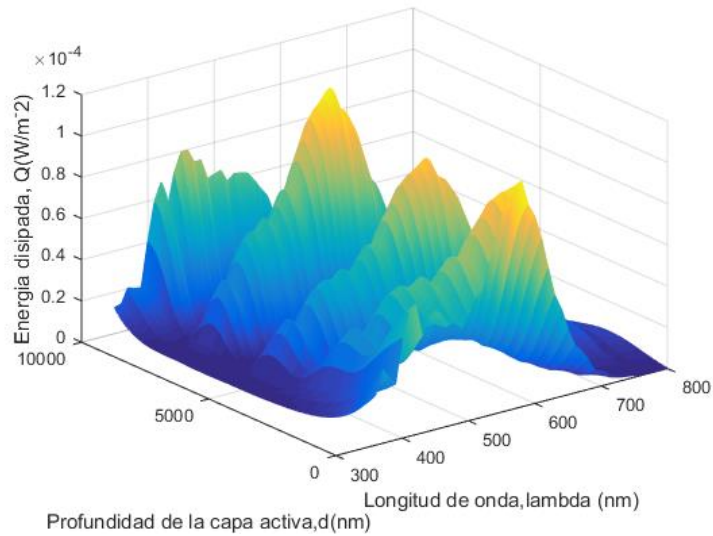
$$\varepsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$$

$$\alpha_j = 6.44 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$$

$$n_j = 2.9549 + 0.30767i$$

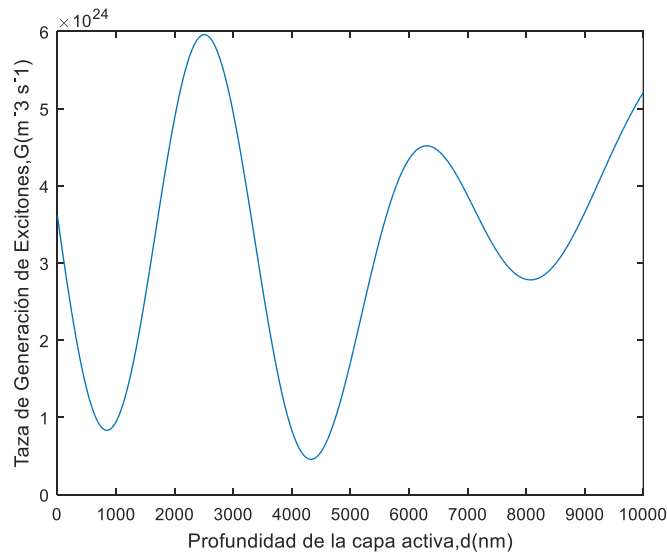
$$E_j(z) = 1.5214 \text{ v/m}^2$$

$$Q_j(z) = 5.8812 \times 10^{-5} \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$$



Gráfica 3.1.5.2. Energía promedio disipada por segundo en la capa activa (CdTe).

El propósito de determinar el campo eléctrico y la disipación promedio de energía es utilizar estos valores en la Ecuación 23 para calcular la tasa de generación de excitones (G). Como resultado de este proceso, se generó la Gráfica 3.1.5.3. En dicha gráfica, se destaca que la máxima tasa de generación de excitones es de $6 \times 10^{24} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, alcanzándose a una profundidad aproximada de 2500 nm. Además, se observa cómo el campo eléctrico óptico se disipa y su amplitud disminuye a medida que penetra en la capa de CdTe.



Gráfica 3.1.5.3. Tasa de generación de excitones en la capa activa (CdTe) para $\lambda=600 \text{ nm}$.

Una vez obtenida la tasa de generación de excitones en la capa activa, se procede al cálculo del potencial electrostático de Poisson ($V_{poisson}$), así como las concentraciones de carga ($n(x)$ y $p(x)$) y la dimensión de la zona de depleción en la unión pn de la estructura. Es crucial que los resultados obtenidos satisfagan

simultáneamente la ecuación de Poisson (25) y las ecuaciones de continuidad de cargas (26 y 27). Para esta tarea, se empleó el algoritmo iterativo de Gummel modificado (Anexo I). La Tabla 3.1.5.1 presenta los parámetros fundamentales de los materiales que componen la unión pn (CdS/CdTe), los cuales fueron utilizados en los cálculos.

Tabla 3.1.5.1. Propiedades de los materiales que conforman la unión pn.

Datos	CdS (Material p)	CdTe (Material n)
Band gap	2.42 eV	1.58 eV
Masa electrón	0.20 m_0	0.10 m_0
Masa hueco	0.70 m_0	0.40 m_0
Constante dieléctrica	8.9 ϵ_0	10.2 ϵ_0
Concentración intrínseca	$1 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$	$1 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$
Movilidad hueco/electrón	$5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$4.3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Coefficiente difusión e/h	6.475 cm^2/s	2.59 cm^2/s
Tiempo de vida e/h	$2 \times 10^{-10} \text{ s}$	$1.6 \times 10^{-8} \text{ s}$
Masa del electrón en el vacío	$m_0 = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$	
Carga del electrón en el vacío	$q = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$	
Permitividad en el vacío	$\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-14} \text{ C}^2/\text{Ncm}^2$	
Constante de Boltzmann	$k_B = 8.617 \times 10^{-5} \text{ eV}$	

Para iniciar la ejecución del algoritmo, se establece un valor inicial para $V_{poisson}$ y se determinan las distancias de difusión de cargas minoritarias. Posteriormente, el algoritmo se ejecuta de manera iterativa hasta que se satisfaga alguna de las siguientes condiciones:

- La diferencia entre el $V_{poisson}$ de la iteración actual y el $V_{poisson}$ de la iteración anterior es menor que un umbral previamente definido.
- La suma de los valores absolutos de las diferencias entre las concentraciones de cargas de la iteración actual y la iteración anterior, dividida por la suma de las concentraciones de cargas en la iteración actual, es menor que un umbral predefinido.

En caso de que ninguna de estas condiciones se cumpla, se propone un nuevo valor para V_0 y se vuelve a ejecutar el algoritmo. Se desarrolló un programa en Matlab para llevar a cabo el algoritmo en el diseño de la

celda unitaria. Después de 134 iteraciones, se alcanzó la condición establecida, obteniendo los datos que se presentan en la siguiente tabla:

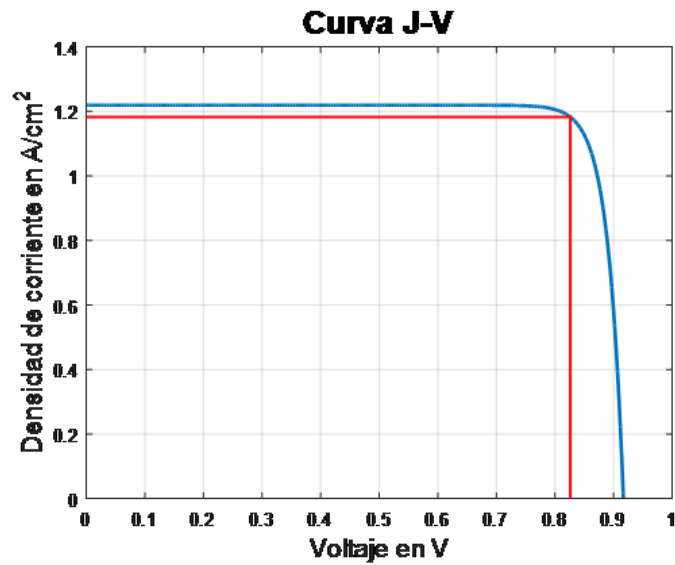
Tabla 3.1.5.2. Resultados obtenidos en la convergencia del algoritmo iterativo de Gummel.

Datos	CdS (Material p)	CdTe (Material n)
Distancia de difusión de cargas	$L_n = 3.5986 \times 10^{-5} \text{ cm}$	$L_p = 2.0356 \times 10^{-4} \text{ cm}$
Concentración de cargas minoritarias en equilibrio	$n_{p0} = 2 \times 10^2 \text{ cm}^{-3}$	$p_{n0} = 1 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$
Límite de la zona de depleción	$x_p = 1.4837 \times 10^{-5} \text{ cm}$	$x_n = 7.4185 \times 10^{-5} \text{ cm}$
Límite total de la zona de depleción	$w = 4.9 \times 10^{-9} \text{ cm}$	
Concentración de donadores	$N_d = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	
Concentración de aceptores	$N_a = 4.3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	
Concentración de cargas	$p_i(x) = 5.2119 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$	$n_i(x) = 2.4440 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$
Nivel Quasi – Fermi	$F_p - E_{CP} = 0.2649 \text{ eV}$	$E_{CN} - F_N = 0.2685 \text{ eV}$
Potencial electrostático	$V_{poisson} = 0.6018 \text{ V}$	
Potencial de contacto	$V_{contacto} = 2.358 \text{ V}$	

Para analizar las características de desempeño de la celda solar unitaria, se generó la curva JV utilizando la ecuación (32), representada en la Gráfica 3.1.5.4. Los resultados de las características de desempeño teóricas para la celda con estructura de Vidrio/ITO/CdS/CdTe/Ag se detallan en la Tabla 3.1.5.3.

Para el cálculo del V_{OC} se empleó la ecuación (30), para la J_{SC} se utilizó la ecuación (31), para la I_{MaxPot} se aplicó la ecuación (34), para el FF se empleó la ecuación (35), para la PCE se usó la ecuación (36), para la R_{MaxPot} se recurrió a la ecuación (37), y para la P_{MaxPot} se aplicó la ecuación (38).

Además, en la Figura 3.1.5.2 se presenta la estructura final de la celda solar unitaria resultante del diseño teórico, con todas sus dimensiones correspondientes.



Gráfica 3.1.5.4. Curva J-V (Densidad de corriente vs voltaje).

Tabla 3.1.5.3. Resultados teóricos del desempeño de la celda solar unitaria diseñada.

Resumen de resultados				
V_{OC}	JSC	V_{MaxPot}	J_{MaxPot}	P_{Max}
0.9167 V	1.219 A/cm^2	0.8263 V	1.182 A/cm^2	$9.9155 \times 10^{-5} W$
PCE	FF	R_{Max}	I_{Max}	A_{Trans}
10.85 %	0.8740	6885.83 Ω	$1.2 \times 10^{-4} A$	9983 μm^2

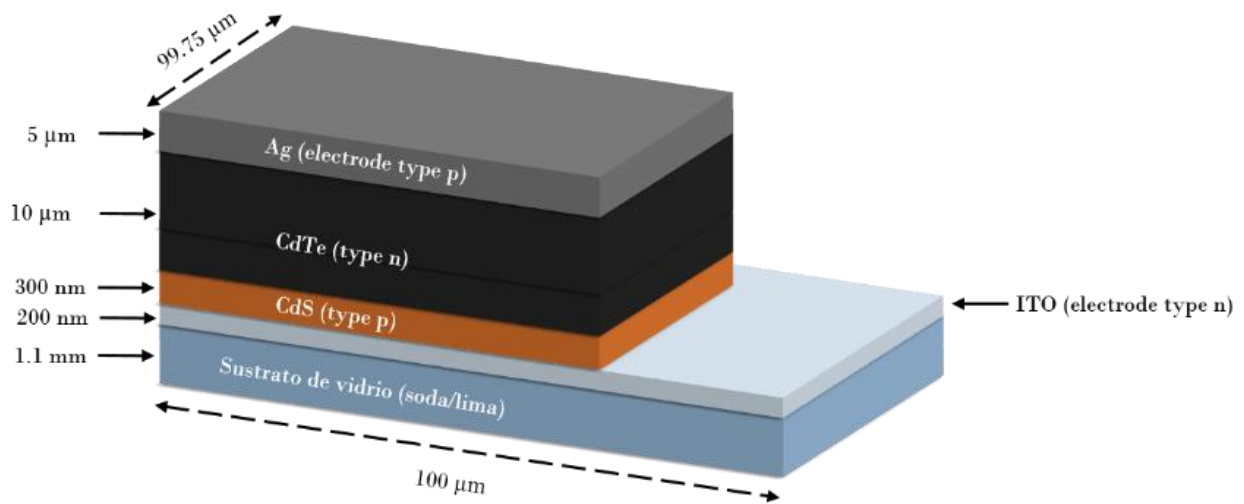


Figura 3.1.5.2. Estructura final de la celda solar unitaria

Una vez completado el diseño teórico de la celda solar, se avanzó con su implementación práctica. Los procedimientos empleados en esta etapa surgieron de un proceso previo de experimentación destinado a perfeccionar la técnica de deposición. El objetivo era fabricar celdas duraderas y funcionales, cuyos resultados de caracterización se aproximasen a los cálculos teóricos.

Conforme a lo mencionado previamente, se optó por la técnica de aspersión pirolítica para la fabricación de las películas delgadas de material semiconductor. Esta elección se basó en su facilidad, economía y eficiencia en la deposición. El aerógrafo empleado en el proceso de fabricación (Figura 3.1.5.3) utiliza una aspersión por aire presurizado de doble acción con una boquilla de 0.35 mm. Esta característica posibilitó la deposición de películas uniformes en todo el sustrato (Figura 3.1.5.4).

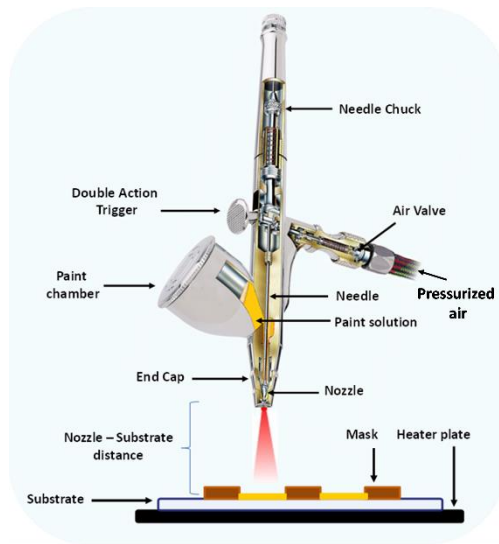


Figura 3.1.5.3. Aerógrafo y sus principales componentes.



Figura 3.1.5.4. Sulfuro de cadmio depositado por aerografía.

Por otro lado, el proceso de caracterización de la celda solar fabricada incluyó pruebas de voltaje y corriente (Figura 3.1.5.5), con el objetivo de obtener la curva *IV* (Gráfica 3.1.5.5). A partir de esta curva, se obtuvieron

los valores de rendimiento de la celda solar unitaria de tipo vidrio soda-lima/ITO/CdS/CdTe/Ag, como se muestra en la Tabla 3.1.5.4.

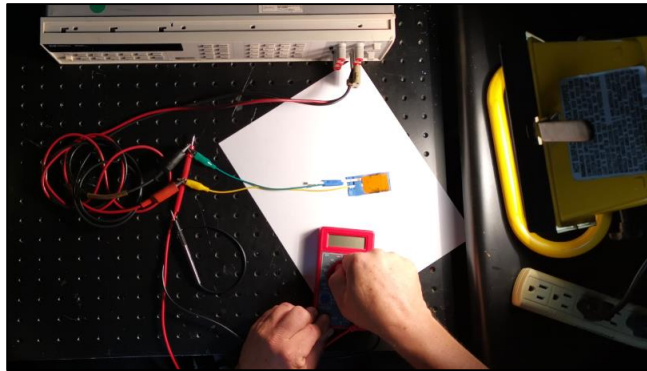
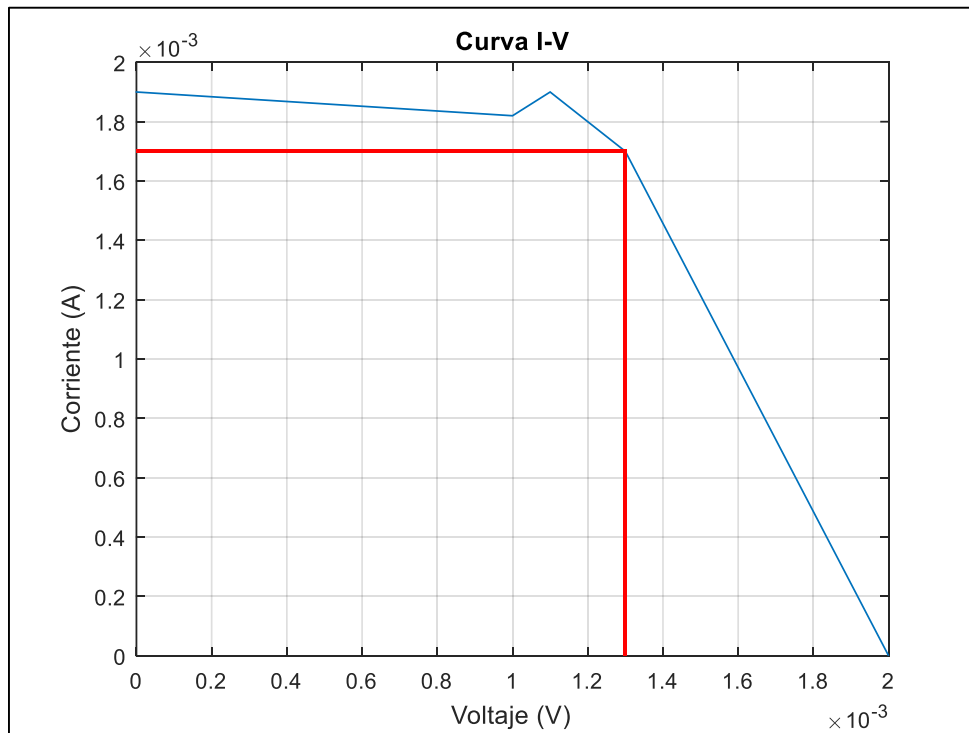


Figura 3.1.5.5. Pruebas en la celda solar unitaria (Caracterización).



Gráfica 3.1.5.5. Curva característica de la celda solar unitaria; valores de I vs V (línea azul); FF (línea roja).

Tabla 3.1.5.4. Características de desempeño en la celda solar unitaria.

Características de desempeño							
V_{OC}	I_{SC}	P_{MaxPot}	V_{MaxPot}	I_{MaxPot}	R_{MaxPot}	FF	PCE
0.002 V	0.0019 A	$2.21 \times 10^{-6} W$	0.0013 V	0.0017 A	0.7647Ω	0.5816	$5.6 \times 10^{-3} \%$

3.2. Diseño teórico de una celda solar unitaria con inserción de un Qw en la estructura: Vidrio/ ITO/CdS/CdTe/Ag

La inserción de pozos cuánticos en las celdas solares ha suscitado un gran interés en la investigación, tanto teórica como experimental, en los últimos años. Se ha demostrado que la adición de pozos cuánticos a la estructura de una celda solar puede aumentar la absorción de fotones (energía solar), mejorar la probabilidad de recombinación de portadores y ampliar la respuesta espectral, lo que puede conducir a un aumento en las características de rendimiento de la celda.

Para desarrollar una celda solar verdaderamente eficiente, es crucial considerar los siguientes aspectos: comprender la absorción actual del dispositivo sin pozos cuánticos para seleccionar un material adecuado para la estructura y determinar un ancho óptimo y una longitud efectiva para los pozos cuánticos, de modo que se aumente el coeficiente de absorción en la celda. Estos aspectos se abordarán en las siguientes secciones (3.2.1 a 3.2.7). Es importante destacar que en este trabajo de tesis se busca insertar pozos cuánticos compuestos por CdHgTe en la capa activa formada por CdTe, con el objetivo de mejorar la eficiencia en la celda de tipo vidrio soda-lima/CdS/CdTe/Ag.

3.2.1. Estructura de una celda solar con la inserción de un QW

La estructura de una celda solar con pozos cuánticos es esencialmente similar a la estructura descrita en la sección 3.1.1 (sustrato/electrodo tipo n/material tipo p/material tipo n/electrodo tipo p), con la diferencia de que se introducen uno o varios pozos cuánticos en la región intrínseca de la unión pn (sustrato/electrodo tipo n/material tipo p/material tipo n/Qw/material tipo n/electrodo tipo p). Esto se hace con el propósito de mejorar la absorción en la capa activa de la celda solar y, por consiguiente, aumentar su eficiencia. La Figura 3.2.1.1 ilustra la estructura de la celda solar con la inserción de un Qw en la capa activa de la unión pn, que se utilizará para el estudio en esta tesis:



Figura 3.2.1.1. Estructura de una celda solar formada con heterounión pn con inserción de un Qw.

3.2.2. Absorción actual del dispositivo

Antes de incorporar un Qw en la estructura, es necesario determinar la absorción actual de la capa activa del dispositivo (λ) sin Qw, utilizando la siguiente ecuación:

$$\lambda = \frac{1.24}{E_{g(\text{barrera})}} \quad (39)$$

Donde $E_{g(\text{barrera})}$ representa la brecha de energía de la capa activa que servirá como barrera en el Qw.

El objetivo de conocer la longitud central de la barrera es establecer la longitud de onda que el Qw deberá absorber, y así identificar el material adecuado que cumpla con los parámetros definidos. En este caso, la barrera del Qw está compuesta de CdTe, cuya brecha de energía es de 1.58 eV y su máxima absorción ocurre en torno a los 833 nm aproximadamente. Por lo tanto, se busca centrar la absorción del Qw en 980 nm.

Al establecer la absorción central del Qw en 980 nm, se necesita un material con un band gap más pequeño que la barrera de CdTe para que pueda absorber la longitud de onda que CdTe no absorbe. Para determinar el valor aproximado del band gap que debe tener el material del Qw, se utiliza la siguiente ecuación:

$$E_{g(\text{Qw})} = \frac{1.24}{\lambda_{(\text{propuesta})}} \quad (40)$$

Donde $\lambda_{(\text{propuesta})}$ es longitud de onda propuesta para la absorción del Qw. A continuación, se muestran los resultados obtenidos de λ y $E_{g(\text{Qw})}$, así como los parámetros utilizados en cada uno de los cálculos:

- Absorción actual del dispositivo

$$\lambda = 0.7848 \mu\text{m} \approx 785 \text{ nm}$$

$$E_{g(\text{barrera})} = 1.58 \text{ eV}$$

- Band gap aproximado para el Qw

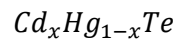
$$E_{g(\text{Qw})} = 1.26 \text{ eV}$$

$$\lambda_{(\text{propuesta})} = 980 \text{ nm} = 0.980 \mu\text{m}$$

3.2.3. Selección del material para el Qw

La selección del material para la integración de un Qw implica no solo encontrar un material compatible con la capa activa de la celda solar, sino también asegurar que tenga un band gap menor y una constante de red igual o menor a la de dicha capa, con el fin de evitar la recombinación en las interfaces de la estructura.

Dado que la capa activa de la estructura es de CdTe, se busca un material que tenga afinidad de red con la barrera de CdTe. Utilizando la Gráfica 3.2.3.1, se concluye que el material adecuado para el Qw es un compuesto ternario con las siguientes proporciones:



Donde x representa la fracción molar.

Este compuesto es atractivo para ser utilizado como Qw en celdas solares de CdTe con confinamiento cuántico debido a que la cantidad de cadmio (Cd) en la aleación permite ajustar la absorción óptica del material a la longitud de onda deseada. Para aproximarse al valor de band gap establecido anteriormente para el Qw, se define una concentración de cadmio del 90 %. Se emplea la siguiente ecuación desarrollada por G. L. Hansen et Al. [14]:

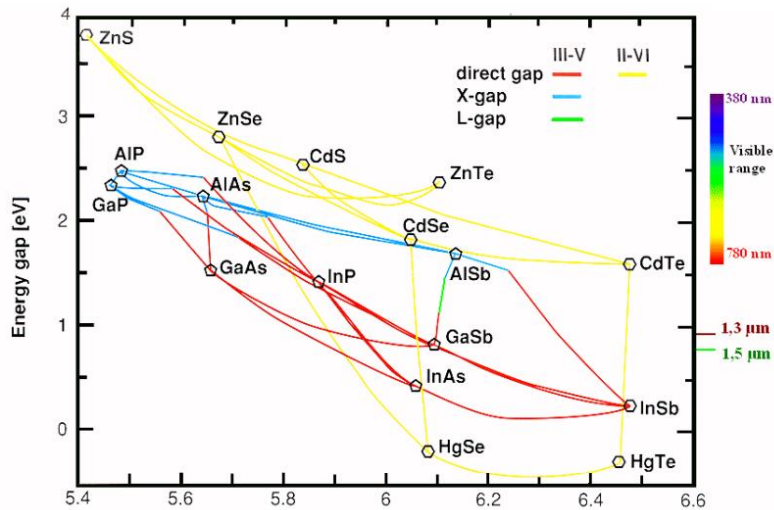
$$E_{g(Qw)} = -0.302 + 1.93x + 5.35(10^{-4})T(1 - 2x) - 0.810x^2 + 0.832x^3 \quad (41)$$

Donde x es la concentración molar y T es la temperatura en grados Kelvin. A continuación, se muestra el resultado obtenido de $E_{g(Qw)}$, así como los parámetros utilizados en el cálculo:

$$E_{g(Qw)} = 1.257 \approx 1.26 \text{ eV}$$

$$x = 0.9$$

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



Gráfica 3.2.3.1. Constante de red vs Band gap.

Una vez definido el material que formará la capa activa del Qw, se elaboró un diagrama de la estructura (Fig. 3.2.3.2), que presenta los valores de band gap para la barrera y el Qw, además de los valores de discontinuidad en las bandas de conducción y valencia. Para obtener estos últimos valores, se emplearon las siguientes ecuaciones:

- Banda de conducción

$$\Delta E_C = 0.6(E_{g(barrera)} - E_{g(Qw)}) \quad (42)$$

- Banda de valencia

$$\Delta E_V = 0.4(E_{g(barrera)} - E_{g(Qw)}) \quad (43)$$

Donde $E_{g(barrera)}$ y $E_{g(Qw)}$ es el band gap de la barrera y del Qw, respectivamente. A continuación, se muestran los resultados obtenidos de ΔE_C y ΔE_V , así como los parámetros utilizados en cada uno de los cálculos:

- Banda de conducción

$$\Delta E_C = 0.192 \text{ eV} = 192 \text{ meV}$$

$$E_{g(barrera)} = 1.58 \text{ eV}$$

$$E_{g(Qw)} = 1.26 \text{ eV}$$

- Banda de valencia

$$\Delta E_V = 0.128 \text{ eV} = 128 \text{ meV}$$

$$E_{g(\text{barrera})} = 1.58 \text{ eV}$$

$$E_{g(\text{Qw})} = 1.26 \text{ eV}$$

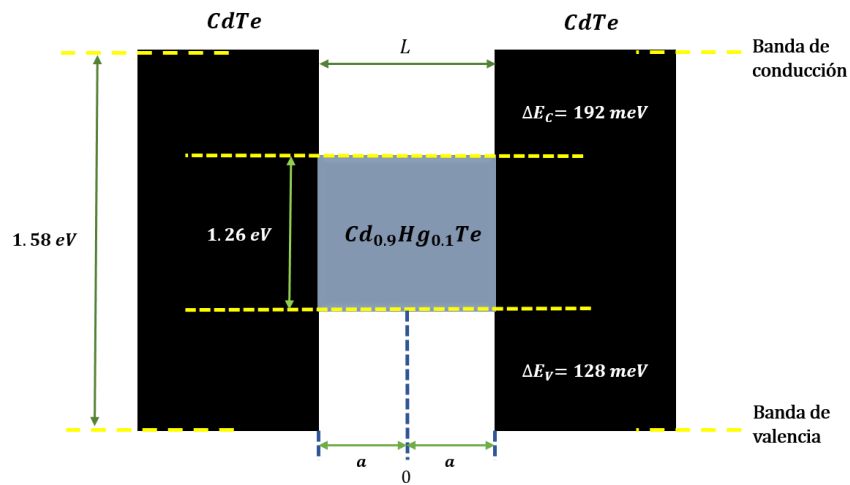


Figura 3.2.3.2. Estructura del pozo cuántico.

3.2.4. Ancho óptimo del dispositivo

Para determinar el ancho óptimo de la capa activa del Qw, se resolvieron de manera autoconsistente las ecuaciones de Schrödinger-Poisson mediante un programa desarrollado en Matlab. Al resolver la ecuación de Schrödinger, se determinaron los niveles energéticos en cada banda (de conducción y de valencia) del Qw, de los cuales solo se consideraron los dos primeros niveles, donde se concentra la mayor cantidad de cargas (huecos y electrones).

Por otro lado, al resolver la ecuación de Poisson, se obtuvo el valor del potencial electrostático utilizando la aproximación de la función envolvente y la aproximación de masas efectivas. Los resultados se encuentran detallados en el Anexo II. A partir de estos valores, se concluyó que el ancho óptimo para la capa activa del Qw es de 60 Å, ya que este valor abarca la zona de depleción, donde ocurre la absorción de fotones. En la Figura 3.2.4.1 se presenta nuevamente la estructura del Qw, ahora con los valores de los dos primeros niveles de energía en cada banda y el ancho óptimo señalado.

Tabla 3.2.4.1. Ancho óptimo del pozo cuántico.

Ancho óptimo para la capa activa del Qw										
Å	E_{n_1}	E_{n_2}	E_{p_1}	E_{p_2}	E_{fn}	E_{fp}	$N \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	$P \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	$n_1^2 \text{ (cm}^{-6}\text{)}$	$V_{bp} \text{ (mV)}$
60	23.45	89.19	12.88	49.88	47.101	18.616	3.786E+16	4.386E+16	1.660E+33	193.872

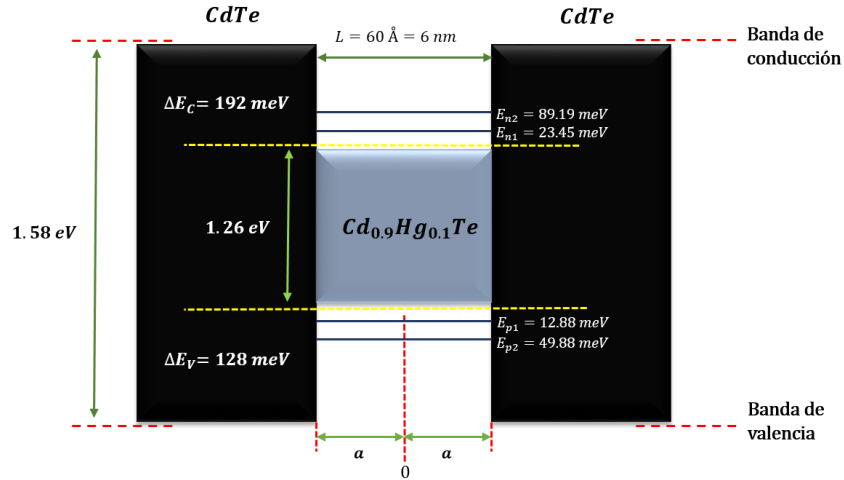


Figura 3.2.4.1. Estructura del pozo cuántico con valores definidos de niveles de energía y ancho óptimo.

3.2.5. Longitud de onda central del Qw

Una vez que se determinan los dos primeros niveles de energía en las bandas de conducción y valencia, se calcula la longitud de onda central de absorción del Qw utilizando la siguiente ecuación:

$$\lambda_{eff} = \frac{1.24}{E_{g(Qw)} + E_{n1} + E_{p1}} \quad (44)$$

Donde $E_{g(Qw)}$ es el band gap del Qw, E_{n1} y E_{p1} es el primer nivel de energía en la banda de conducción y valencia, respectivamente. A continuación, se muestra el resultado obtenido de λ_{eff} , así como los parámetros utilizados en el cálculo:

$$E_{g(Qw)} = 1.26 \text{ eV}$$

$$E_{n1} = 0.023455 \text{ eV}$$

$$E_{p1} = 0.012889 \text{ eV}$$

$$\lambda_{eff} = 0.9565 \mu\text{m} \approx 957 \text{ nm}$$

El resultado del cálculo de la longitud efectiva cumple con las expectativas para la ubicación del Qw, dado que los 957 nm se sitúan por encima de la longitud de absorción de la barrera de CdTe (785 nm).

3.2.6. Coeficiente de absorción del Qw

Para el cálculo del coeficiente de absorción en la estructura CdTe/CdHgTe/CdTe con un ancho de 60 Å se aplicó la selección parcial de momento mediante la siguiente ecuación:

$$\alpha(\nu) = \frac{1}{V_g} \left[\bar{B}(\nu) h I_{abs}(E) + \frac{1}{\tau_{loss}} \right] \quad (45)$$

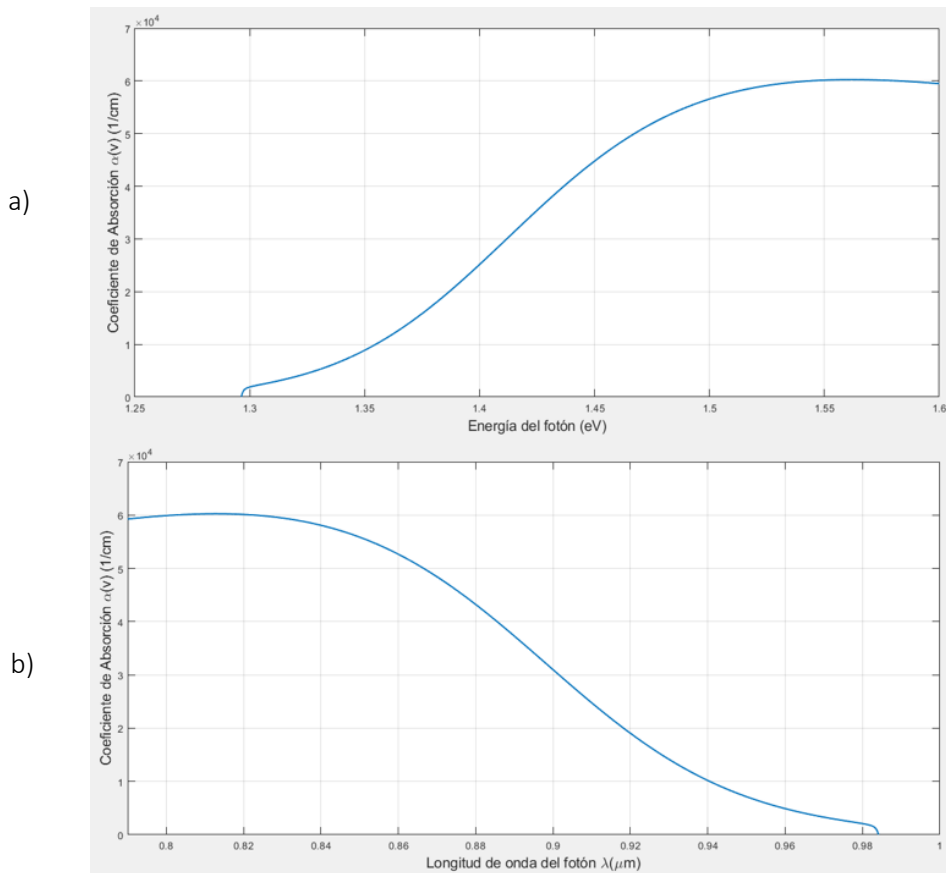
Donde V_g es la velocidad de grupo de los fotones en el material, $\bar{B}(\nu)$ es el coeficiente de Einstein para la probabilidad de absorción estimulada, h es constante de Planck, $I_{abs}(E)$ es la tasa total de absorción y τ_{loss} vida útil de los portadores. A continuación, se muestran los resultados obtenidos de $\alpha(\nu)$, así como los parámetros utilizados en el cálculo:

$$V_g = 9.3656 \times 10^9 \text{ cm/s}$$

$$h = 6.63 \times 10^{-30} \frac{\text{cm}^2 \cdot \text{kg}}{\text{s}}$$

$$\tau_{loss} = 2.5 \times 10^{-11} \text{ s}$$

Es importante destacar que, para obtener el valor del coeficiente de Einstein, la tasa total de absorción estimulada y el coeficiente de absorción en un rango de longitud de onda de 800 a 1000 nm, se desarrolló un programa en Matlab. A partir de este programa, se generaron las siguientes gráficas:



Gráfica 3.2.6.1. a) Coeficiente de absorción vs Energía del fotón; b) Coeficiente de absorción vs Longitud de onda del fotón.

3.2.7. Estructura de una celda solar unitaria con la inclusión de un Qw: vidrio soda - lima/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe/Ag

En la Figura 3.2.7.1 se presenta el diseño definitivo de la estructura en la celda solar con la incorporación de un pozo cuántico de CdHgTe. Además, esta figura proporciona información sobre el grosor de cada una de las capas. Es relevante destacar que esta configuración será la considerada para la fabricación del dispositivo.

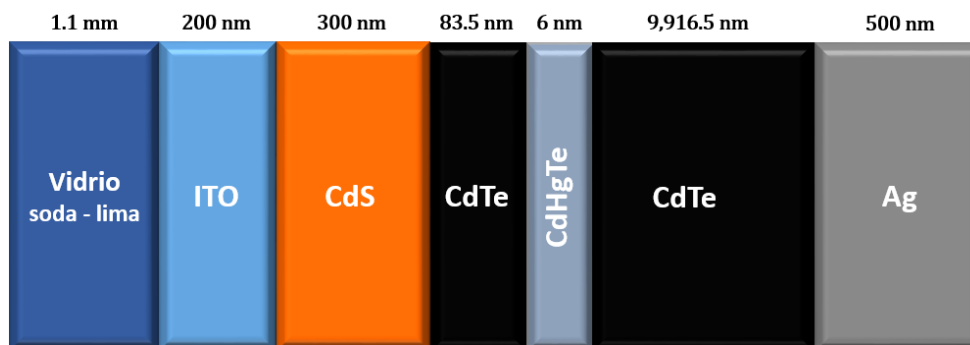


Figura 3.2.7.1. Estructura de la celda solar con la inclusión de un Qw de CdHgTe.

3.3. Propagación de campos electromagnéticos en estructuras multicapa con Qw

Determinar la contribución del pozo cuántico (Qw) en la celda solar puede plantear un desafío, dado que requiere un modelado óptico que relacione la absorción total con la de cada capa individual. El enfoque más preciso para este tipo de análisis es la matriz de transferencia óptica, como se detalla en la Sección 3.1.2, la cual calcula la interferencia de ondas coherentes reflejadas y transmitidas en cada interfaz de la heteroestructura. A partir de la Sección 3.3.1 hasta la 3.3.9, se abordará el análisis óptico en la estructura de vidrio soda-lima/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe/Ag.

3.3.1. Interfaces en la estructura

En las secciones 3.3.1.1 a 3.3.1.5 se llevará a cabo el análisis de los campos eléctricos transmitidos y reflejados entre las interfaces de la estructura multicapa tipo vidrio soda-lima/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe/Ag. Este análisis se centra en el comportamiento de las ondas cuando experimentan un cambio en las propiedades del medio por el que se propagan, utilizando las ecuaciones (1) y (2). Es importante destacar que los valores de los parámetros se calcularon para una longitud de onda de 850 nm.

3.3.1.1. Interface entre ITO/ CdS

En la primera interfaz de la estructura, ubicada entre ITO y CdS (Fig. 3.3.1.1.1), se presentan los parámetros empleados en el cálculo junto con los resultados obtenidos:

- Parámetros para ITO

$$n_1 = 1.5362$$
$$k_1 = 0.006936$$

- Parámetros para CdS

$$n_2 = 2.1489$$
$$k_2 = 0.0283$$

- Resultados

$$r_{ij} = 0.1662 + 4.2058 \times 10^{-3} i$$
$$t_{ij} = 1.1662 + 4.2058 \times 10^{-3} i$$

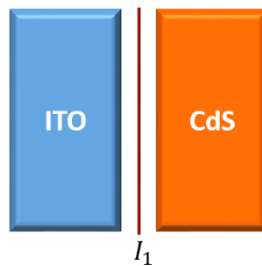


Figura 3.3.1.1.1. Interface entre ITO y CdS.

3.3.1.2. Interface entre CdS/ CdTe

En la segunda interfaz de la estructura, ubicada entre CdS y CdTe (Fig. 3.3.1.2.1), se presentan los parámetros empleados en el cálculo junto con los resultados obtenidos:

- Parámetros para CdS

$$n_1 = 2.1489$$
$$k_1 = 0.0283$$

- Parámetros para CdTe

$$n_2 = 2.8802$$
$$k_2 = 0.01081$$

- Resultados

$$r_{ij} = 0.1453 - 4.6059 \times 10^{-3} i$$

$$t_{ij} = 1.1453 - 4.6059 \times 10^{-3} i$$

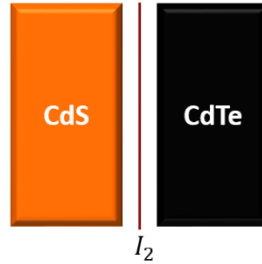


Figura 3.3.1.2.1. Interface entre CdS y CdTe.

3.3.1.3. Interface entre CdTe/ CdHgTe

En la tercera interfaz de la estructura, ubicada entre CdTe y CdHgTe (Fig. 3.3.1.3.1), se presentan los parámetros empleados en el cálculo junto con los resultados obtenidos:

- Parámetros para CdTe

$$n_1 = 2.8802$$

$$k_1 = 0.01081$$

- Parámetros para CdHgTe

$$n_2 = 2.7943$$

$$k_2 = 0.3778$$

- Resultados

$$r_{ij} = -0.01066 + 0.06538 i$$

$$t_{ij} = 0.9893 + 0.06538 i$$

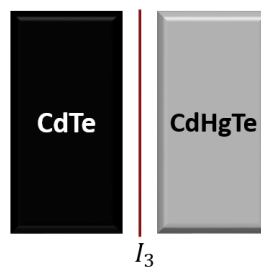


Figura 3.3.1.3.1. Interface entre CdTe y CdHgTe.

3.3.1.4. Interface entre CdHgTe/ CdTe

En la cuarta interfaz de la estructura, ubicada entre CdHgTe y CdTe (Fig. 3.3.1.4.1), se presentan los parámetros empleados en el cálculo junto con los resultados obtenidos:

- Parámetros para CdHgTe

$$n_1 = 2.7943$$

$$k_1 = 0.3778$$

- Parámetros para CdTe

$$n_2 = 2.8802$$

$$k_2 = 0.01081$$

- Resultados

$$r_{ij} = 0.01066 - 0.06538 i$$

$$t_{ij} = 1.01066 - 0.06538 i$$

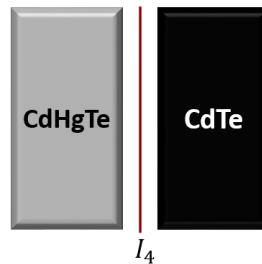


Figura 3.3.1.4.1. Interface entre CdHgTe y CdTe.

3.3.1.5. Interface entre CdTe/ Ag

La quinta y última interfaz de la estructura se ubica entre CdTe y Ag (Fig. 3.3.1.5.1). A continuación, se presentan los parámetros empleados en el cálculo junto con los resultados obtenidos:

- Parámetros para CdTe

$$n_1 = 2.8802$$

$$k_1 = 0.01081$$

- Parámetros para Ag

$$n_2 = 0.0980$$

$$k_2 = 5.6310$$

- Resultados

$$r_{ij} = 0.5754 + 0.7969 i$$

$$t_{ij} = 1.5754 + 0.7969 i$$

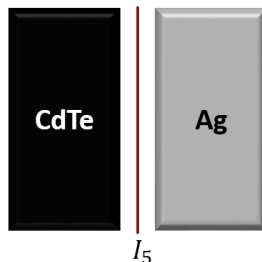


Figura 3.3.1.5.1. Interface entre CdTe y Ag.

3.3.2. Matrices de interface en la estructura

En la sección 3.3.2.1 a la 3.3.2.5 se llevará a cabo el análisis del efecto que experimenta el campo electromagnético incidente al llegar a la interfaz ubicada entre dos capas delgadas. Para este propósito, se empleará la ecuación (7).

3.3.2.1. Matriz de interface en ITO/ CdS

La primera matriz de interfaz se caracteriza por los coeficientes r_{ij} y t_{ij} calculados en la interfaz entre ITO y CdS. A continuación, se presentan los parámetros empleados en el cálculo y se muestra la interfaz obtenida:

$$r_{ij} = 0.1662 + 4.2058 * 10^{-3} i$$

$$t_{ij} = 1.1662 + 4.2058 * 10^{-3} i$$

$$I_1 = \begin{pmatrix} 0.8574 - 3.09 \times 10^{-3} i & 0.1425 + 3.09 \times 10^{-3} i \\ 0.1425 + 3.09 \times 10^{-3} i & 0.8574 - 3.09 \times 10^{-3} i \end{pmatrix}$$

3.3.2.2. Matriz de interface en CdS/ CdTe

La segunda matriz de interfaz se caracteriza por los coeficientes r_{ij} y t_{ij} calculados en la interfaz entre CdS y CdTe. A continuación, se presentan los parámetros empleados en el cálculo y se muestra la interfaz obtenida:

$$r_{ij} = 0.1453 - 4.6059 \times 10^{-3} i$$

$$t_{ij} = 1.1453 - 4.6059 \times 10^{-3} i$$

$$I_2 = \begin{pmatrix} 0.8731 + 3.51 \times 10^{-3} i & 0.1268 - 3.51 \times 10^{-3} i \\ 0.1268 - 3.51 \times 10^{-3} i & 0.8731 + 3.51 \times 10^{-3} i \end{pmatrix}$$

3.3.2.3. Matriz de interface en CdTe/ CdHgTe

La tercera matriz de interfaz se caracteriza por los coeficientes r_{ij} y t_{ij} calculados en la interfaz entre CdTe y CdHgTe. A continuación, se presentan los parámetros empleados en el cálculo y se muestra la interfaz obtenida:

$$r_{ij} = -0.01066 + 0.06538 i$$

$$t_{ij} = 0.9893 + 0.06538 i$$

$$I_3 = \begin{pmatrix} 1.00642 - 0.06651 i & -6.37 \times 10^{-3} + 0.06651 i \\ -6.37 \times 10^{-3} + 0.06651 i & 1.00642 - 0.06651 i \end{pmatrix}$$

3.3.2.4. Matriz de interface en CdHgTe/ CdTe

La cuarta matriz de interfaz se caracteriza por los coeficientes r_{ij} y t_{ij} calculados en la interfaz entre CdHgTe y CdTe. A continuación, se presentan los parámetros empleados en el cálculo y se muestra la interfaz obtenida:

$$r_{ij} = 0.01066 - 0.06538 i$$

$$t_{ij} = 1.01066 - 0.06538 i$$

$$I_4 = \begin{pmatrix} 0.9853 + 0.06374 i & 0.01467 - 0.06374 i \\ 0.01467 - 0.06374 i & 0.9853 + 0.06374 i \end{pmatrix}$$

3.3.2.5. Matriz de interface en CdTe/ Ag

La quinta matriz de interfaz se caracteriza por los coeficientes r_{ij} y t_{ij} calculados en la interfaz entre CdTe y Ag. A continuación, se presentan los parámetros empleados en el cálculo y se muestra la interfaz obtenida:

$$r_{ij} = 0.5754 + 0.7969 i$$

$$t_{ij} = 1.5754 + 0.7969 i$$

$$I_5 = \begin{pmatrix} 0.5054 - 0.2556 i & 0.4945 + 0.2556 i \\ 0.4945 + 0.2556 i & 0.5054 - 0.2556 i \end{pmatrix}$$

3.3.3. Matrices de propagación en la estructura

De la sección 3.3.3.1 a la 3.3.3.5 se llevará a cabo el análisis del efecto del campo electromagnético al propagarse a través de las capas que componen la estructura (a excepción de la capa de CdHgTe, cuya propagación se considera en el cálculo del campo eléctrico), teniendo en cuenta la distancia dentro de estas capas. En primer lugar, se calcula β_j utilizando la ecuación (9), y luego se sustituye el resultado en la ecuación de Euler (10) para su representación en forma polar. Finalmente, para hacer la representación matricial de la propagación en el material de estudio se utiliza la ecuación (8).

3.3.3.1. Matriz de propagación en ITO

La primera matriz de propagación describe el comportamiento del campo electromagnético al atravesar la capa de ITO, con un ancho de 200 nm, en una longitud de onda de 850 nm. A continuación se presentan los parámetros empleados en los cálculos, junto con el resultado de P_1 :

$$n_j = 1.5362 + 0.006936 i$$

$$\phi_1 = 0$$

$$\beta_j = 1.9828 \times 10^{-4} + 8.9483 \times 10^{-7} i$$

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1.0402 - 1.8618 \times 10^{-4} i & 0 \\ 0 & 1.0402 + 1.8618 \times 10^{-4} i \end{pmatrix}$$

3.3.3.2. Matriz de propagación en CdS

La segunda matriz de propagación describe el comportamiento del campo electromagnético al atravesar la capa de CdS, con un ancho de 300 nm, en una longitud de onda de 850 nm. A continuación se presentan los parámetros empleados en los cálculos, junto con el resultado de P_2 :

$$n_j = 2.1489 + 0.0283 i$$

$$\phi_1 = 0$$

$$\beta_j = 2.7724 \times 10^{-4} + 3.6511 \times 10^{-6} i$$

$$P_2 = \begin{pmatrix} 1.0867 - 0.001190 i & 0 \\ 0 & 1.0867 + 0.001190 i \end{pmatrix}$$

3.3.3.3. Matriz de propagación en CdTe (a la izquierda del Qw)

La tercera matriz de propagación describe el comportamiento del campo electromagnético al atravesar la capa de CdTe, con un ancho de 84 nm, en una longitud de onda de 850 nm. A continuación se presentan los parámetros empleados en los cálculos, junto con el resultado de P_3 :

$$\begin{aligned}n_j &= 2.8802 + 0.01081 i \\ \phi_1 &= 0 \\ \beta_j &= 3.7159 \times 10^{-4} + 1.3946 \times 10^{-6} i \\ P_3 &= \begin{pmatrix} 1.0317 - 1.2086 \times 10^{-4} i & 0 \\ 0 & 1.0317 + 1.2086 \times 10^{-4} i \end{pmatrix}\end{aligned}$$

3.3.3.4. Matriz de propagación en CdTe (a la derecha del Qw)

La cuarta matriz de propagación describe el comportamiento del campo electromagnético al atravesar la capa de CdTe, con un ancho de 9916 nm, en una longitud de onda de 850 nm. A continuación se presentan los parámetros empleados en los cálculos, junto con el resultado de P_4 :

$$\begin{aligned}n_j &= 2.8802 + 0.01081 i \\ \phi_1 &= 0 \\ \beta_j &= 3.7159 \times 10^{-4} + 1.3946 \times 10^{-6} i \\ P_4 &= \begin{pmatrix} 39.835 - 0.55086 i & 0 \\ 0 & 39.835 + 0.55086 i \end{pmatrix}\end{aligned}$$

3.3.3.5. Matriz de propagación en Ag

La quinta y última matriz de propagación describe el comportamiento del campo electromagnético al atravesar la capa de Ag, con un ancho de 500 nm, en una longitud de onda de 850 nm. A continuación se presentan los parámetros empleados en los cálculos, junto con el resultado de P_5 :

$$\begin{aligned}n_j &= 0.0980 + 5.6310 i \\ \phi_1 &= 0 \\ \beta_j &= 1.2643 \times 10^{-5} + 7.2648 \times 10^{-4} i \\ P_5 &= \begin{pmatrix} 1.0735 - 0.37364 i & 0 \\ 0 & 1.0735 + 0.37364 i \end{pmatrix}\end{aligned}$$

3.3.4. Matrices de Scattering

De la sección 3.3.4.1 a la 3.3.4.2 se llevará a cabo el análisis de los coeficientes de transmisión y reflexión para las capas antes y después de la capa de CdHgTe. El objetivo es comprender la relación entre los campos de entrada y salida en la estructura de vidrio soda-lima/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe/Ag. Este análisis se realiza utilizando las ecuaciones (14) y (15).

3.3.4.1. Matrices de Scattering para capas anteriores al Qw: ITO/CdS/CdTe

La obtención de esta matriz nos proporciona información crucial para comprender el efecto que experimentará el campo electromagnético al ingresar y propagarse a través de la capa de CdHgTe, después de haber atravesado las capas de ITO, CdS y CdTe (Fig. 3.3.4.1.1). A continuación, se presentan los parámetros empleados en los cálculos, junto con el resultado de la matriz M'_j :

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1.0402 - 1.8618 \times 10^{-4} i & 0 \\ 0 & 1.0402 + 1.8618 \times 10^{-4} i \end{pmatrix}$$

$$I_1 = \begin{pmatrix} 0.8574 - 3.09 \times 10^{-3} i & 0.1425 + 3.09 \times 10^{-3} i \\ 0.1425 + 3.09 \times 10^{-3} i & 0.8574 - 3.09 \times 10^{-3} i \end{pmatrix}$$

$$P_2 = \begin{pmatrix} 1.0867 - 0.001190 i & 0 \\ 0 & 1.0867 + 0.001190 i \end{pmatrix}$$

$$I_2 = \begin{pmatrix} 0.8731 + 3.51 \times 10^{-3} i & 0.1268 - 3.51 \times 10^{-3} i \\ 0.1268 - 3.51 \times 10^{-3} i & 0.8731 + 3.51 \times 10^{-3} i \end{pmatrix}$$

$$P_3 = \begin{pmatrix} 1.0317 - 1.2086 \times 10^{-4} i & 0 \\ 0 & 1.0317 + 1.2086 \times 10^{-4} i \end{pmatrix}$$

$$I_3 = \begin{pmatrix} 1.00642 - 0.06651 i & -6.37 \times 10^{-3} + 0.06651 i \\ -6.37 \times 10^{-3} + 0.06651 i & 1.00642 - 0.06651 i \end{pmatrix}$$

$$M'_j = \begin{bmatrix} 0.8983 - 0.0424 i & 0.2682 + 0.0412 i \\ 0.2681 + 0.0411 i & 0.8984 - 0.0399 i \end{bmatrix}$$

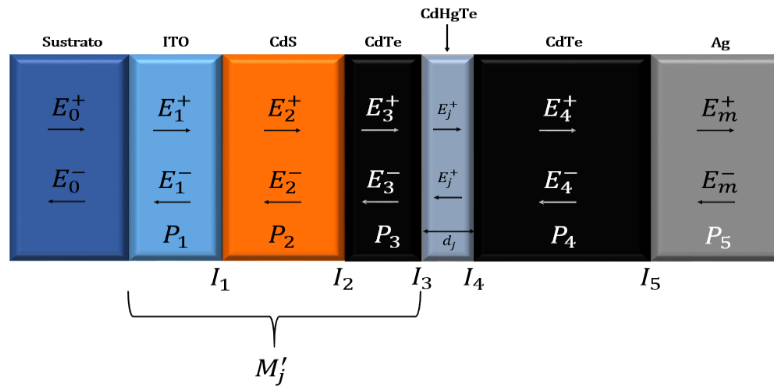


Figura 3.3.4.1.1. Representación de las capas anteriores (ITO/CdS/CdTe) a la capa a analizar (CdHgTe).

3.3.4.2. Matrices de Scattering para capas posteriores al Qw: CdTe/Ag

La obtención de esta matriz nos proporciona información crucial para comprender el efecto que experimentará el campo electromagnético al ingresar y propagarse a través de la capa de CdTe y Ag, después de haber atravesado la capa de CdHgTe (Fig. 3.3.4.2.1). A continuación, se presentan los parámetros empleados en los cálculos, junto con el resultado de la matriz M_j'' :

$$I_4 = \begin{pmatrix} 0.9853 + 0.06374 i & 0.01467 - 0.06374 i \\ 0.01467 - 0.06374 i & 0.9853 + 0.06374 i \end{pmatrix}$$

$$P_4 = \begin{pmatrix} 39.835 - 0.55086 i & 0 \\ 0 & 39.835 + 0.55086 i \end{pmatrix}$$

$$P_5 = \begin{pmatrix} 1.0735 - 0.37364 i & 0 \\ 0 & 1.0735 + 0.37364 i \end{pmatrix}$$

$$I_5 = \begin{pmatrix} 0.5054 - 0.2556 i & 0.4945 + 0.2556 i \\ 0.4945 + 0.2556 i & 0.5054 - 0.2556 i \end{pmatrix}$$

$$M_j'' = \begin{bmatrix} 19.1020 - 18.8379 i & 16.3668 + 17.2423 i \\ 23.3553 + 4.0528 i & 26.6952 - 2.2468 i \end{bmatrix}$$

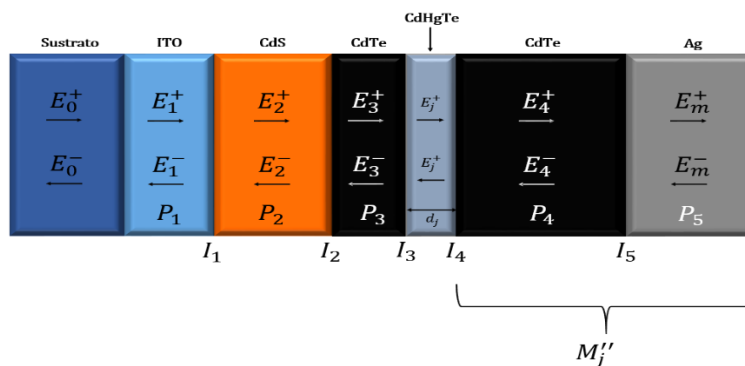


Figura 3.3.4.2.1. Representación de las capas posteriores (CdTe/Ag) a la capa a analizar (CdHgTe).

3.3.5. Coeficientes de reflexión y transmisión

De la sección 3.3.5.1 a la 3.3.5.2 se llevará a cabo el análisis del flujo de energía reflejado por la interfaz en relación con el flujo incidente, así como la relación entre la intensidad de la luz transmitida entre las interfaces de la estructura y la intensidad de la luz incidente en las capas anteriores y posteriores a la capa de CdHgTe.

3.3.5.1. Para capas anteriores al Qw: ITO/CdS/CdTe

Para determinar los vectores reflejados y transmitidos a través de las interfaces entre las capas de ITO/CdS/CdTe, antes de alcanzar la capa de CdHgTe, se calcularon los coeficientes r'_j y t'_j utilizando las ecuaciones (16) y (17). A continuación, se presentan los resultados del cálculo de r'_j y t'_j , junto con los parámetros empleados en dicho cálculo:

$$M'_{j,11} = 0.8983 - 0.0424 i$$

$$M'_{j,21} = 0.2681 + 0.0411 i$$

$$r'_j = -0.2956 - 0.0597 i$$

$$t'_j = 1.1108 + 0.0524 i$$

3.3.5.2. Para capas posteriores al Qw: CdTe/Ag

Para determinar los vectores reflejados y transmitidos a través de las interfaces entre las capas de CdTe/Ag, después de haber atravesado la capa de CdHgTe, se calcularon los coeficientes r''_j y t''_j utilizando las ecuaciones (18) y (19). A continuación, se presentan los resultados del cálculo de r''_j y t''_j , junto con los parámetros empleados en dicho cálculo:

$$M''_{j,11} = 19.1020 - 18.8379 i$$

$$M''_{j,21} = 23.3553 + 4.0528 i$$

$$r''_j = 0.5138 + 0.7188 i$$

$$t''_j = 0.0265 + 0.0262 i$$

3.3.6. Coeficiente de transmisión en el Qw: CdHgTe

En esta sección se realizará el análisis del flujo de onda que incide sobre la interfaz CdTe/CdHgTe y la cantidad de luz (onda electromagnética) transmitida a través de CdHgTe. Este análisis se llevó a cabo utilizando la ecuación (20). A continuación, se presenta el resultado del cálculo de t_j^+ para la capa de CdHgTe con un ancho de 6 nm, junto con los parámetros utilizados en el cálculo:

$$r_j' = -0.2956 - 0.0597 i$$

$$t_j' = 1.1108 + 0.0524 i$$

$$r_j'' = 0.5138 + 0.7188 i$$

$$\beta_j = 0.0022 + 0.0003i$$

$$t_j^+ = 0.7862 + 0.7450 i$$

3.3.7. Campo eléctrico

El cálculo del campo eléctrico es fundamental para el desarrollo de este trabajo, ya que proporciona información sobre el comportamiento de la propagación de las ondas electromagnéticas a través de la capa de CdHgTe. Una vez que se conocen los valores de los coeficientes de reflexión (r_j'') y transmisión (t_j^+) de la capa de CdHgTe, se puede calcular $E_j(z)$ en la capa j en dirección z hacia la derecha, utilizando la Ecuación (21).

A continuación, se presenta el resultado del cálculo de $E_j(z)$ para una longitud de onda de 850 nm en la posición $x = 1$ del ancho de la capa de CdHgTe, junto con los parámetros utilizados:

$$t_j^+ = 0.7862 + 0.7450 i$$

$$r_j'' = 0.5138 + 0.7188 i$$

$$E_0^+ = 0.829 \text{ W} \times \text{m}^{-2} \cdot \text{nm}^{-1}$$

$$d_j = z = 6 \text{ nm}$$

$$\beta_j = 0.0022 + 0.0003i$$

$$E_j(z) = 1.3713 \text{ v/m}^2$$

3.3.8. Energía promedio disipada

El flujo de energía disipado por unidad de tiempo en una posición determinada representa el promedio de energía disipada por segundo en la capa j (correspondiente al Qw en la capa activa de la unión pn) en la posición z para incidencia normal $Q_j(z)$. De acuerdo con el teorema de Poynting, este flujo también puede interpretarse como la conservación de energía. Una vez que se conoce el campo eléctrico total ($E_j(z)$) que se propaga en la estructura multicapa, se puede calcular $Q_j(z)$ utilizando la Ecuación (22).

A continuación, se presenta el resultado del cálculo de $Q_j(z)$ para una longitud de onda de 850 nm en la posición $z = 1$ del ancho de la capa de CdHgTe, junto con los parámetros utilizados:

$$c = 299792458 \text{ m/s}$$

$$\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$$

$$\alpha_j = 558.53 \text{ cm}^{-1}$$

$$n_j = 2.7943 + 0.3778 i$$

$$E_j(z) = 1.3713 \text{ v/m}^2$$

$$Q_j(z) = 3.9336 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$$

3.3.9. Tasa de generación de excitones

Para conocer la proporción de generación de excitones en un Qw insertado en la capa activa de la celda se utiliza la ecuación (24). Para una longitud de onda de 850 nm el valor resultante es:

$$G_{Qw}(x) = 1.6820 \times 10^{26} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$$

A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de G_L en el rango de 800 a 1000 nm, así como los parámetros utilizados:

$$G_{pn} = 3.1801 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$G_{Qw} = 1.1732 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$G_L = 4.3533 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$$

El propósito fundamental de obtener el resultado de la tasa de generación de excitones en la celda con la inserción del pozo cuántico (Qw) radica en la determinación de la corriente fotogenerada en el dispositivo. Si este valor supera la corriente obtenida en la celda sin Qw, se concluye que el material seleccionado es idóneo para la estructura.

3.4 Algoritmo iterativo de Gummel (Algoritmo de la solución autoconsistente de las ecuaciones de Poisson y Schrödinger)

El Algoritmo de Solución Autoconsistente de las Ecuaciones de Poisson y Schrödinger se utiliza para resolver simultáneamente las ecuaciones que describen el potencial electrostático y la distribución de electrones en un semiconductor. Este proceso implica iterar entre las ecuaciones de Poisson y Schrödinger hasta alcanzar una solución que satisfaga ambas. En cada iteración, se actualiza el potencial electrostático basado en la distribución de electrones calculada y viceversa, repitiendo este ciclo hasta que la solución converja a un estado estable. Este algoritmo es esencial para comprender y predecir el comportamiento de dispositivos semiconductores a escala nanométrica, lo que facilita la optimización de su diseño y mejora de su rendimiento. En el Anexo I se detallan los pasos del algoritmo, mientras que la Tabla 3.4.1 contiene los parámetros de entrada necesarios para su ejecución. Adicionalmente, en la Tabla 3.4.2 se presenta un resumen de los resultados obtenidos mediante su aplicación.

Tabla 3.4.1. Parámetros de entrada para correr el algoritmo.

Datos	CdS (Material p)	CdTe (Material n)
Band gap	2.42 eV	1.58 eV
Masa electrón	0.20 m_0	0.10 m_0
Masa hueco	0.70 m_0	0.40 m_0
Constante dieléctrica	8.9 ϵ_0	10.2 ϵ_0
Concentración intrínseca	$1 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$	$1 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$
Movilidad hueco/electrón	$5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$4.3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Coefficiente difusión e/h	6.475 cm^2/s	2.59 cm^2/s
Tiempo de vida e/h	$2 \times 10^{-10} \text{ s}$	$1.6 \times 10^{-8} \text{ s}$
Distancia de difusión de cargas	$L_n = 3.5986 \times 10^{-5} \text{ cm}$	$L_p = 2.0356 \times 10^{-4} \text{ cm}$
Concentración de cargas minoritarias en equilibrio	$n_{p0} = 2 \times 10^2 \text{ cm}^{-3}$	$p_{n0} = 1 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$

Límite de la zona de depleción	$x_p = 1.4837 \times 10^{-5} \text{ cm}$	$x_n = 7.4185 \times 10^{-5} \text{ cm}$
Concentración de cargas	$p_i(x) = 5.2119 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$	$n_i(x) = 2.4440 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$
Nivel Quasi – Fermi	$F_p - E_{CP} = 0.2649 \text{ eV}$	$E_{CN} - F_N = 0.2685 \text{ eV}$
Discontinuidad	$\Delta E_C = 0.504 \text{ eV} = \text{meV}$	
Potencial de contacto	$V_0 = 2.3906 \text{ V}$	
Tasa de generación de excitones en la celda solar sin Qw	$G_{pn} = 3.1801 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$	
Masa del electrón en el vacío	$m_0 = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$	
Carga del electrón en el vacío	$q = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$	
Permitividad en el vacío	$\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-14} \text{ C}^2 / \text{Ncm}^2$	
Constante de Boltzmann	$k_B = 8.617 \times 10^{-5} \text{ eV}$	

Tabla 3.4.2. Resultados obtenidos en el algoritmo.

Resumen de resultados				
L_p	L_n	$P_n(x)$	$n_p(x)$	N_a
$2.03 \times 10^{-4} \text{ cm}$	$3.59 \times 10^{-5} \text{ cm}$	$5.20 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$	$7.07 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$	$4.3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
N_d	x_p	x_n	V_{Poisson}	V_{Contacto}
$1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	$1.13 \times 10^{-12} \text{ cm}$	$4.89 \times 10^{-9} \text{ cm}$	0.6018 V	2.358 V
w				
$4.9 \times 10^{-9} \text{ cm}$				

3.5 Características de desempeño teórico de la celda solar unitaria:

Vidrio/ITO/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe/Ag

En esta sección, se presentarán los resultados de las características de desempeño de la celda solar diseñada teóricamente. Estas características incluyen la curva JV, la potencia máxima de salida, el factor de llenado y la eficiencia máxima.

3.5.1. Voltaje de circuito abierto

A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de V_{OC} aplicando la ecuación (30), así como los parámetros utilizados:

$$kT = 0.025 \text{ eV}$$

$$L_p = 2.0338 \times 10^{-4} \text{ cm}$$

$$L_n = 3.5952 \times 10^{-5} \text{ cm}$$

$$G_L = 4.3533 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}/\text{s}$$

$$D_p = 6.475 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$D_n = 6.475 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$n_{p0} = 0.0168 \text{ cm}^{-3}$$

$$P_{n0} = 1 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-3}$$

$$q = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$V_{OC} = 0.9167 \text{ V}$$

3.5.2. Densidad de corriente de corto circuito

A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de J_{SC} aplicando la ecuación (31), así como los parámetros utilizados:

$$L_p = 2.0338 \times 10^{-4} \text{ cm}$$

$$L_n = 3.5952 \times 10^{-5} \text{ cm}$$

$$G_L = 4.3533 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}/\text{s}$$

$$q = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$J_{SC} = 1.669 \text{ A}/\text{cm}^2$$

3.5.3. Curva de desempeño de la celda solar unitaria

A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de J aplicando la ecuación (32), así como los parámetros utilizados:

$$D_p = 6.475 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$D_n = 6.475 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$L_p = 2.0338 \times 10^{-4} \text{ cm}$$

$$L_n = 3.5952 \times 10^{-5} \text{ cm}$$

$$P_{n0} = 1 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-3}$$

$$n_{p0} = 0.0168 \text{ cm}^{-3}$$

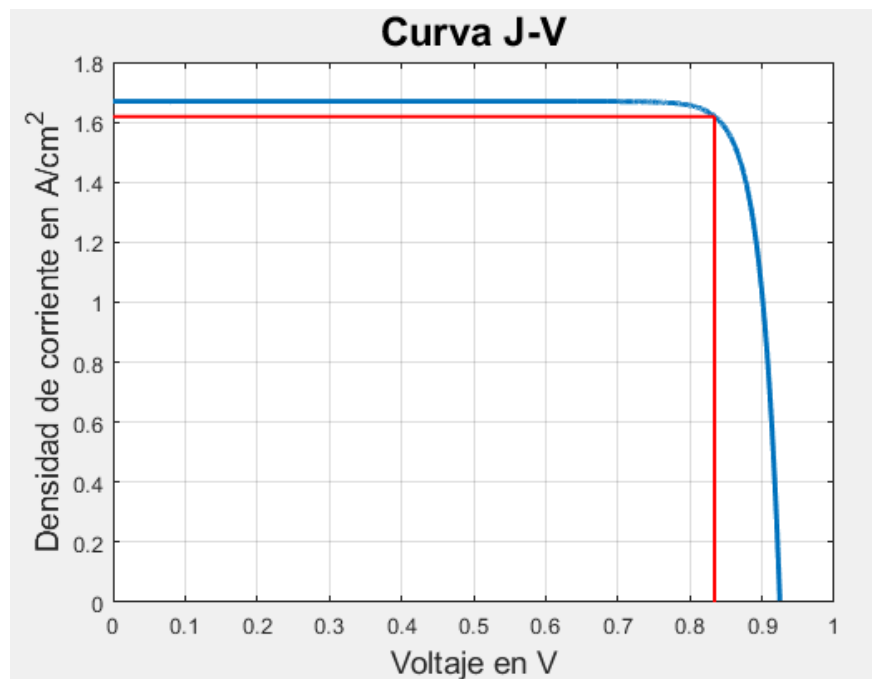
$$V = 1$$

$$kT = 0.025 \text{ eV}$$

$$q = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$G_L = 4.3533 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}/\text{s}$$

En la Gráfica 3.5.3.1 se muestra la gráfica obtenida y en la Tabla 3.5.3.1 el resumen de resultados.



Gráfica 3.5.3.1. Curva J-V en la caracterización teórica (Densidad de corriente vs voltaje).

Tabla 3.5.3.1. Resultados obtenidos de la curva J-V.

Resumen de resultados		
V_{MaxPot}	J_{MaxPot}	J^P_{MaxPot}
0.8342 V	1.619 A/cm ²	1.35 W/cm ²

3.5.4. Ancho del dispositivo

A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de W aplicando la ecuación (33), así como los parámetros utilizados:

$$x = 3.23 \%$$

$$I_{MaxPot} = 5 * 10^{-3} A$$

$$J_{MaxPot} = 1.619 A/cm^2$$

$$W = 99.75 \mu m$$

Es importante destacar que el área disponible para el crecimiento de la celda solar es de $100 \mu m \times 100 \mu m$. Por lo tanto, en la ecuación anterior, la variable $x\%$ deberá tomar distintos valores hasta encontrar un ancho igual o menor a $100 \mu m$. En este diseño teórico, se determinó que el ancho máximo que puede tener el dispositivo es de $99.75 \mu m$, lo que corresponde al 3.23% del área total disponible.

3.5.5. Corriente máxima deseada

A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de $I_{MaxPotD}$ aplicando la ecuación (34), así como los parámetros utilizados:

$$J_{MaxPot} = 1.619 A/cm^2$$

$$A = 9,975 \mu m^2 = 9.975 \times 10^{-5} cm^2$$

$$I_{MaxPotD} = 1.61 \times 10^{-4} A$$

3.5.6. Factor de llenado

A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de FF aplicando la ecuación (35), así como los parámetros utilizados:

$$V_{MaxPot} = 0.8342 V$$

$$I_{MaxPotD} = 1.61 \times 10^{-4} A$$

$$V_{OC} = 0.9248 V$$

$$I_{SC} = 1.664 \times 10^{-4} A$$

$$FF = 0.8749$$

3.5.7. Eficiencia de conversión

A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de PCE aplicando la ecuación (36), así como los parámetros utilizados:

$$V_{MaxPot} = 0.8342 V$$

$$JP_{MaxPot} = 1.35 W/cm^2$$

$$P_{incidente} = 0.09 W/cm^2$$

$$PCE = 15\%$$

3.5.8. Resistencia máxima deseada

A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de R_{MaxPot} aplicando la ecuación (37), así como los parámetros utilizados:

$$V_{MaxPot} = 0.8342 V$$

$$I_{MaxPotD} = 1.61 \times 10^{-4} A$$

$$R_{MaxPot} = 5181.36 \Omega$$

3.5.9. Potencia máxima deseada

A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de P_{MaxPot} aplicando la ecuación (38), así como los parámetros utilizados:

$$JP_{MaxPot} = 1.35 W/cm^2$$

$$A = 9,975 \mu m^2 = 9.975 \times 10^{-5} cm^2$$

$$P_{MaxPot} = 1.34 \times 10^{-4} W$$

3.6. Resultados teóricos en el diseño de la celda solar unitaria con inclusión de un Qw

En la Tabla 3.6.1 se presenta un resumen de los resultados derivados del desempeño teórico de la celda solar, considerando la inclusión de un Qw. Además, la Figura 3.6.1 exhibe la estructura final de la celda solar. Es importante destacar que esta misma configuración será adoptada en el diseño práctico, junto con todas sus dimensiones correspondientes.

Tabla 3.6.1. Resultados teóricos del desempeño de la celda solar con Qw.

Resumen de resultados				
V_{oc}	J_{sc}	V_{MaxPot}	J_{MaxPot}	P_{MaxPot}
0.9248 V	1.669 A/cm ²	0.8342 V	1.619 A/cm ²	1.34 × 10 ⁻⁴ W
PCE	FF	R_{MaxPot}	I_{MaxPot}	A_{Trans}
15 %	0.8749	5181.36 Ω	1.61 × 10 ⁻⁴ A	9975 μm ²

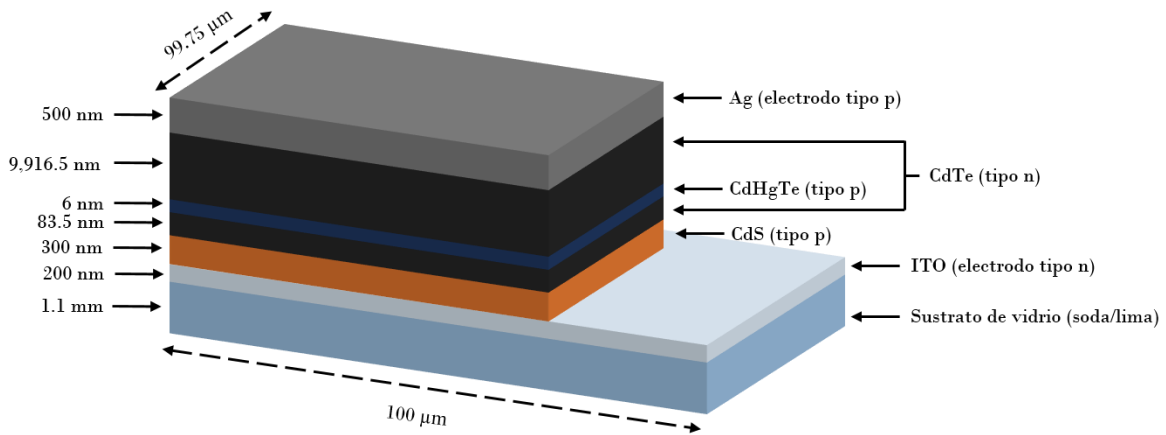


Figura 3.6.1. Estructura final de la celda solar unitaria.

3.7. Panel solar teórico diseñado

Una vez finalizado el diseño teórico, es necesario calcular el número de fotodiodos requeridos para conectar en un determinado número de mallas y alcanzar los valores predefinidos de voltaje y corriente. En este trabajo de tesis, se planteó alcanzar una corriente máxima de 5 mA y un voltaje máximo de 3 V. En la Figura 3.7.1 se presenta un ejemplo de la conexión en serie y en paralelo de los dispositivos unitarios.

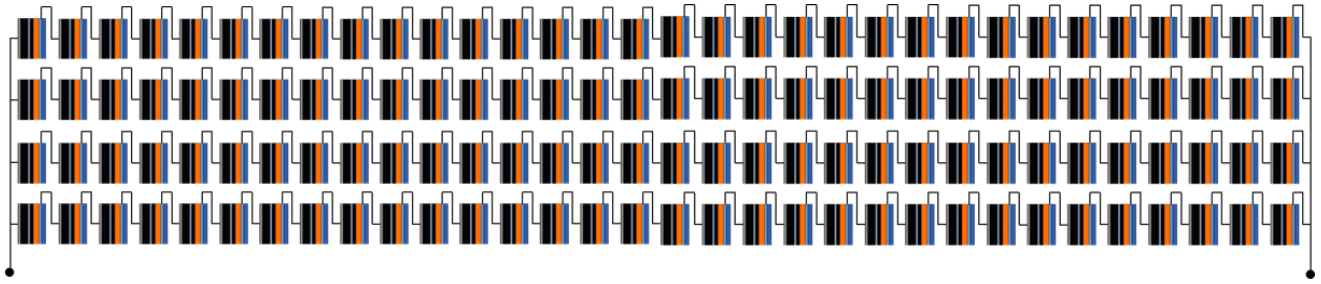


Figura 3.7.1. Estructura esperada del módulo.

3.7.1. Fotodiodos requeridos

Para calcular el número de celdas unitarias requeridas para satisfacer una demanda de voltaje de 3V se utiliza la siguiente ecuación:

$$\text{número } CU = \frac{V_{MaxPot}(\text{requerido})}{V_{MaxPot}(\text{generado})} \quad (45)$$

Donde $V_{MaxPot}(\text{requerido})$ es el voltaje a máxima potencia requerido y $V_{MaxPot}(\text{generado})$ es el voltaje a máxima potencia generado. A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de *número CU*, así como los parámetros utilizados:

$$V_{MaxPot}(\text{requerido}) = 3 \text{ V}$$

$$V_{MaxPot}(\text{generado}) = 0.8342 \text{ V}$$

$$\text{número } CU = 4 \text{ celdas}$$

3.7.2. Mallas requeridas

Para calcular el número de mallas requeridas para satisfacer una demanda de corriente de 5 mA se utiliza la siguiente ecuación:

$$\text{número mallas} = \frac{I_{MaxPot}(\text{requerida})}{I_{MaxPotD}(\text{generada})} \quad (46)$$

Donde $I_{MaxPot}(\text{requerida})$ es la corriente a máxima potencia requerida y $I_{MaxPotD}(\text{generada})$ es la corriente a máxima potencia generada. A continuación, se muestra el resultado en el cálculo de *número mallas*, así como los parámetros utilizados:

$$I_{MaxPot}(\text{requerida}) = 5 \text{ mA}$$

$$I_{MaxPotD}(\text{generada}) = 0.16 \text{ mA}$$

$$\text{número mallas} = 32 \text{ mallas}$$

CAPÍTULO IV. IMPLEMENTACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE UNA CELDA SOLAR MULTICAPA DE TIPO VIDRIO/ITO/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe/Ag

4.1. Fabricación de la celda solar unitaria

En esta sección se describen los aspectos más importantes relacionados con la fabricación de una celda solar unitaria, es decir, los procedimientos implementados para llevar a cabo la fabricación, así como la descripción de materiales y equipo de laboratorio utilizado en el proceso. Cabe destacar que los procedimientos implementados en este trabajo de tesis son el resultado de un proceso previo de experimentación el cual se llevó a cabo con el fin de perfeccionar el proceso de depósito de las capas de los diferentes materiales utilizados. Finalmente, esto dio como resultado celdas funcionales con buenos resultados de caracterización.

4.1.1. Materiales y métodos

En la experimentación se utilizó la técnica de electrodeposición para obtener películas de sulfuro de cadmio (CdS), telurio de cadmio (CdTe), telurio de mercurio y cadmio (CdHgTe) y plata (Ag) a partir de soluciones no acuosas sobre sustratos de vidrio soda-lima recubiertos con una capa de óxido de indio y estaño (ITO) con una resistencia laminar de 10 Ω /rectángulo. Los pasos más importantes que implica la electrodeposición son: preparación del equipo, limpieza de los electrodos (electrodo de trabajo y contra electrodo), preparación del electrolito, conexión de los electrodos a la fuente de poder, inicio de la electrodeposición y procesamiento de los resultados. La Figura 4.1.1 presenta el equipo debidamente ensamblado y preparado para dar inicio al proceso de electrodeposición. En la figura, se observa la disposición meticulosa de los componentes fundamentales, entre los cuales destacan los electrodos (flecha rosa electrodo de platino y flecha roja sustrato), la solución electrolítica (flecha amarilla), la fuente de poder (flecha anaranjada), la plancha calefactora (flecha verde) y el amperímetro (flecha azul). Estos elementos están dispuestos estratégicamente con el propósito de facilitar y garantizar la ejecución eficiente del procedimiento de electrodeposición.

Para la electrodeposición de cada semiconductor se utilizaron diferentes reactivos químicos en la preparación del electrolito, así como diferentes concentraciones y condiciones de trabajo. Sin embargo, en todas las soluciones se utilizó etilenglicol (EG, 99%) como electrolito de soporte. Para CdS se preparó una solución que contenía 50 ml de EG, 0.036M de cloruro de cadmio (CdCl_2 , 99%) y 0.102M de azufre (S, 99%). Para CdTe se necesitaron 20 ml de EG, 1M de CdCl_2 , 0.160M de yoduro de potasio (KI, 99%) y 0.010M de cloruro de telurio (TeCl_4 , 99%). Para Ag se necesitaron 15 ml de EG, 1M de nitrato de plata (AgNO_3 , 99%) y 1M de nitrato de sodio (NaNO_3 , 99%). En el proceso de electrodeposición de CdS, CdTe y CdHgTe se formó un sistema de tres

electrodos con una lámina de platino como contraelectrodo, un termómetro como electrodo de referencia y el sustrato de vidrio como electrodo de trabajo. En el proceso de Ag no se necesitó del electrodo de referencia, por lo que se trabajó con un sistema de dos electrodos.

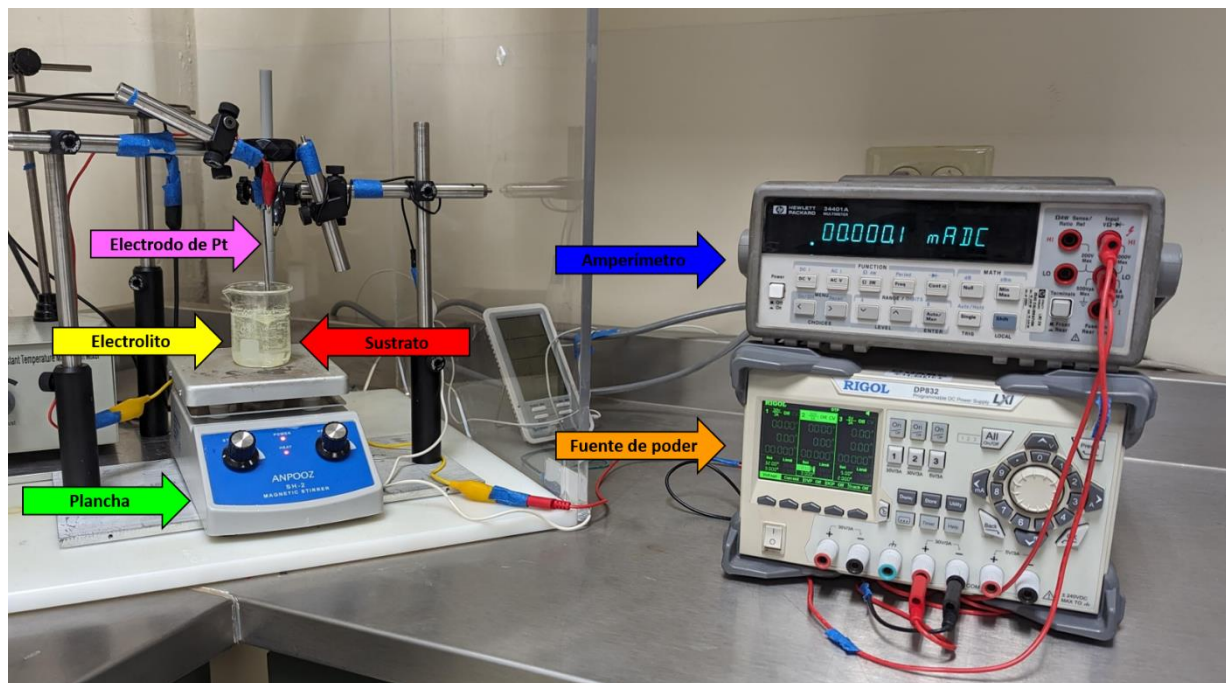


Figura 4.1.1. Equipo montado y listo para el proceso de electrodeposición.

4.1.2. Preparación del electrolito y electrodeposición

4.1.2.1. Sulfuro de cadmio

La película de CdS fue depositada sobre un sustrato compuesto por vidrio/ITO. El proceso empieza con la limpieza ultrasónica del sustrato en acetona y alcohol isopropílico, cada uno durante 300 segundos a una potencia de 50 W, seguido de un secado a temperatura ambiente. La preparación de la solución electrolítica involucró la disolución de todos los reactivos en EG, utilizando agitación magnética sobre una placa calefactora a 40°C hasta lograr una solución homogénea. A continuación, se aumentó la temperatura a 140°C y se conectaron los electrodos a las terminales de la fuente. Cuando la temperatura alcanzó los 140°C, los electrodos se sumergieron en el electrolito y se activó la fuente. El proceso de electrodeposición duró 35 minutos, manteniendo una densidad de corriente y temperatura constantes de 15 mA/cm² y 140°C, respectivamente. Después de completar la electrodeposición de CdS, se llevó a cabo una limpieza ultrasónica adicional en alcohol isopropílico durante 60 segundos a 50 W para eliminar cualquier residuo sobre la película depositada. Este paso post-electrodeposición contribuyó a asegurar la pureza y la calidad final de la película

de CdS. La Figura 4.1.2.1 hace una representación visual de lo descrito anteriormente, mostrando tres etapas distintas en la electrodeposición de CdS: (a) la primera muestra la estructura sumergida en el electrolito durante la electrodeposición, proporcionando una visión clara de la disposición y la interacción de los componentes; (b) la segunda ilustra el sustrato después de la limpieza ultrasónica, con la película de CdS depositada, lo que es crucial para asegurar la uniformidad y calidad del recubrimiento; (c) finalmente, la tercera muestra el sustrato con CdS recubierto con cinta térmica, listo para la siguiente etapa de electrodeposición, lo que indica una secuencia ordenada y planificada en el procedimiento.

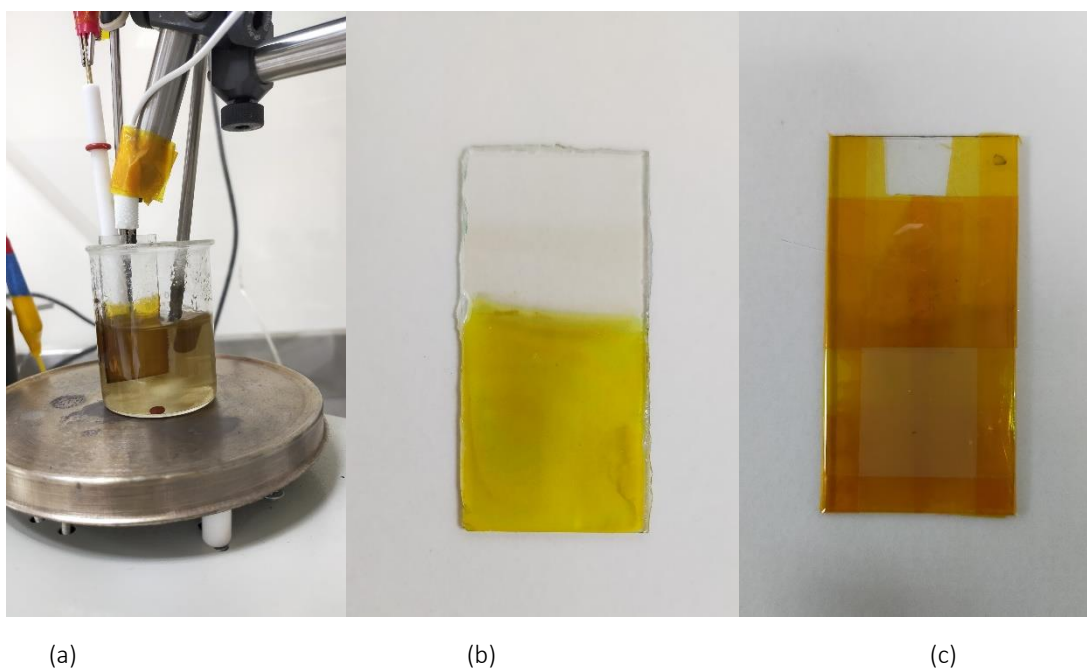


Figura 4.1.2.1. Electrodeposición de CdS: a) Estructura inmersa en el electrolito; b) Sustrato con CdS después de la limpieza ultrasónica; c) Sustrato con CdS recubierto con cinta térmica para la siguiente electrodeposición.

4.1.2.2. Telurio de cadmio - Telurio de mercurio y cadmio

La heteroestructura CdTe/HgCdTe/CdTe fue depositada sobre un sustrato conformado por vidrio/ITO/CdS. Inicialmente, se procedió a limpiar el sustrato con alcohol isopropílico, y posteriormente se delimitó la región donde no era necesario el depósito de CdTe con cinta térmica. La solución electrolítica se preparó disolviendo todos los reactivos en EG, utilizando agitación magnética sobre una placa calefactora a 40°C para asegurar la homogeneidad de la solución. Tras este paso, se incrementó la temperatura a 90°C, se apagó la agitación magnética y los electrodos se conectaron a las terminales de la fuente. Cuando la temperatura alcanzó los 90°C, los electrodos se sumergieron en el electrolito y se activó la fuente. El proceso de electrodeposición duró 20 minutos, manteniendo una densidad de corriente y temperatura constantes de 2.5 mA/cm² y 90°C,

respectivamente. Al terminar la electrodeposición de CdTe, el sustrato fue sometido a un tratamiento térmico a 180°C durante 300 segundos con el propósito de mejorar la adherencia entre las capas de CdS y CdTe. El proceso de electrodeposición para depositar la película de CdHgTe fue similar al proceso seguido para depositar CdTe. La única diferencia fue la adición de 1.99×10^{-4} M de HgCl_2 a la solución electrolítica. Una vez que se depositó la película de CdHgTe, se depositó una segunda capa de CdTe para obtener un arreglo de tipo vidrio/ITO/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe. La Figura 4.1.2.2 ilustra las tres etapas más importantes en la electrodeposición de CdTe y CdHgTe: (a) muestra el sustrato inmerso en la solución electrolítica durante el proceso de electrodeposición, (b) muestra el sustrato colocado sobre la plancha de calefacción, recibiendo el tratamiento térmico posterior a la etapa de electrodeposición, y (c) presenta el sustrato con las películas electrodepositadas de CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe, evidenciando las capas sucesivas que forman la estructura de la celda solar.



(a)

(b)

(c)

Figura 4.1.2.2. Electrodeposición de CdTe/HgCdTe/CdTe: a) Estructura sumergida en la solución electrolítica; b) Tratamiento térmico post-electrodeposición; c) Sustrato con las películas electrodepositadas de CdTe/CdHgTe/CdTe

4.1.2.3. Plata

La película de Ag se depositó sobre un sustrato compuesto por vidrio/ITO/CdS/CdTe/CdHgTe/CdTe. Para delimitar el área donde no era necesario depositar Ag, se utilizó cinta térmica. En la preparación de la solución electrolítica, todos los reactivos se disolvieron en EG mediante agitación magnética en una placa calefactora a 40°C, logrando así una solución homogénea. Luego, se apagó la temperatura y la agitación magnética para

conectar los electrodos a las terminales de la fuente. Posteriormente, ambos electrodos se sumergieron en el electrolito, y se encendió la fuente de poder. El proceso de electrodeposición se llevó a cabo a temperatura ambiente, extendiéndose por un periodo de 10 minutos, con la aplicación de una diferencia de potencial constante de 3V entre los electrodos. Con el propósito de mejorar la adherencia entre las capas de CdTe y Ag, el sustrato fue sometido a un tratamiento térmico a 180°C durante 60 segundos. Este procedimiento contribuyó a consolidar la unión entre los materiales, optimizando así la calidad y la integridad del depósito. La Figura 4.1.2.3 ilustra el proceso de electrodeposición de Ag, donde se muestra la preparación de la solución electrolítica y el sustrato con la película electrodepositada.

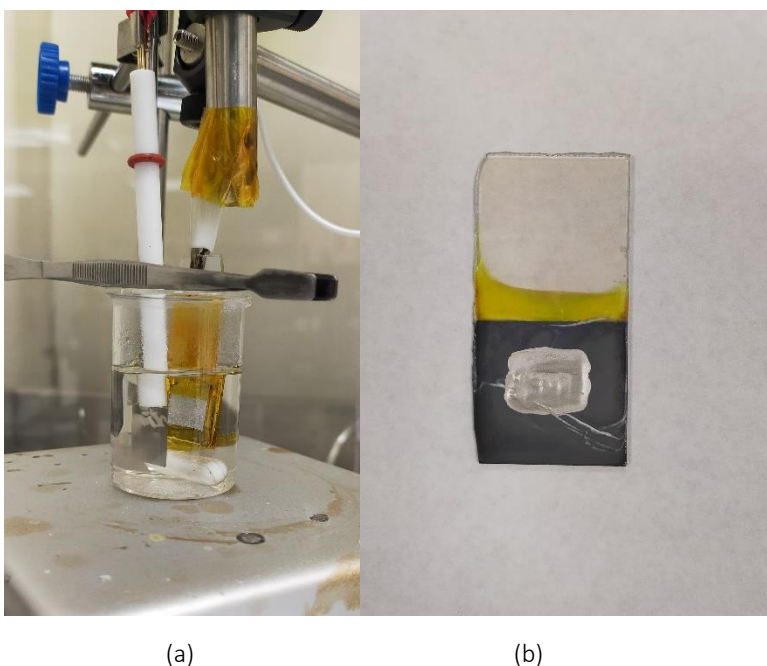


Figura 4.1.2.3. Electrodeposición de Ag: a) Preparación de la solución electrolítica; b) Sustrato con la película electrodepositada de Ag.

4.2. Cableado de la celda solar unitaria

Para iniciar el cableado, se manipuló la celda con precaución y se aplicó la primera tira de cobre (Cu), asegurándola a la película de ITO (Fig. 4.2a). Se utilizó una pequeña tira de cinta adhesiva para fijar dicho contacto. Una vez que el contacto quedó asegurado, se cortó la tira de Cu a la longitud deseada. Posteriormente, se añadió la segunda tira de cobre para establecer contacto con la película de Ag. Para garantizar la fijación de la tira de cobre, se depositó una gota adicional de Ag líquida (Fig. 4.2b), creando así una deposición Ag/Cu/Ag. Asimismo, para mejorar el contacto con los caimanos, se estañaron las puntas de

los contactos. Finalmente, se aseguraron las conexiones con cinta adhesiva (Fig. 4.2c), dejando la celda lista para someterse a pruebas (voltaje - corriente).

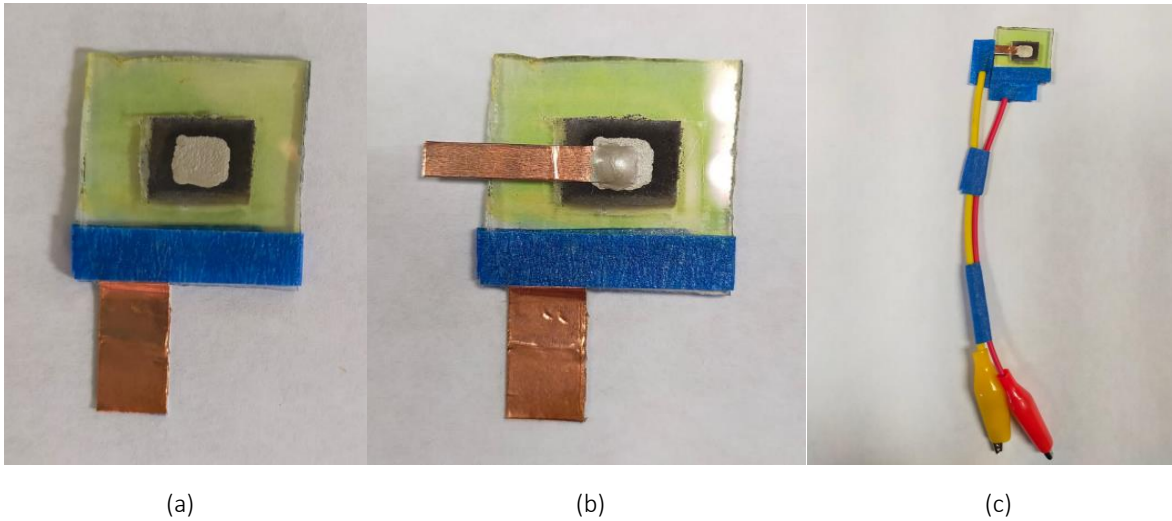


Figura 4.2. a) Primer contacto ITO/Cu, b) Segundo contacto Ag/Cu, c) Celda solar lista para caracterizar.

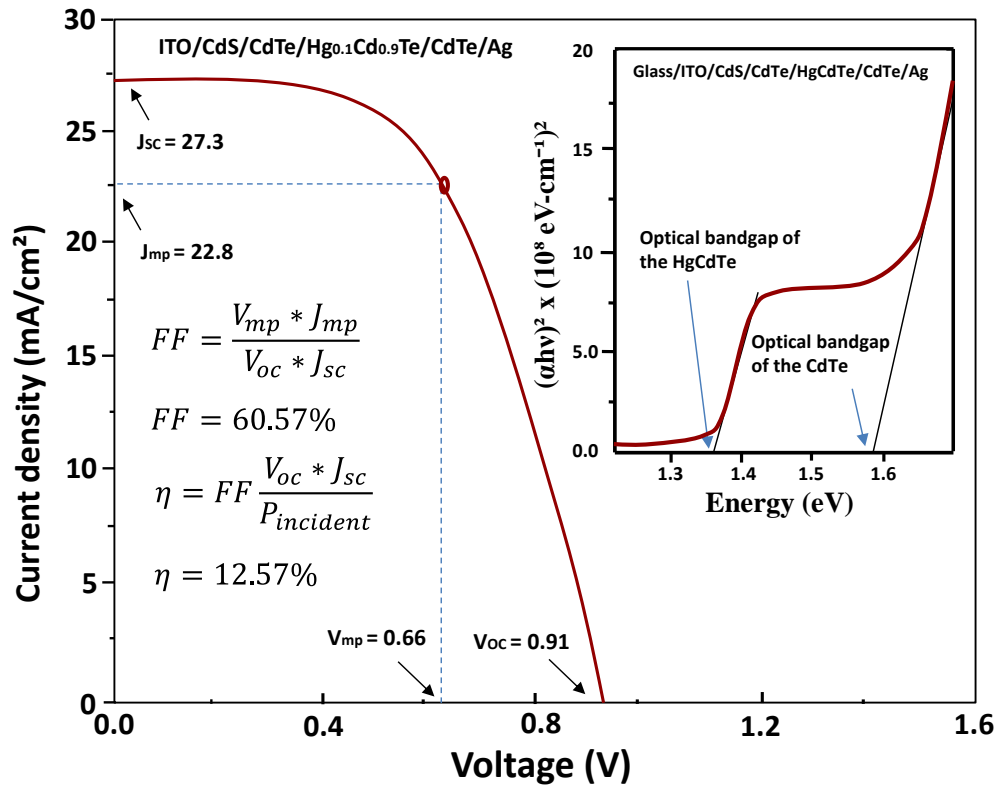
4.3. Caracterización de la celda solar unitaria

La caracterización de una celda solar es fundamental para evaluar su rendimiento y eficiencia en la conversión de energía solar en electricidad. Este proceso implica pruebas de laboratorio destinadas a medir y analizar una variedad de parámetros eléctricos y ópticos de la celda. Entre los aspectos clave de la caracterización se incluyen la curva de desempeño, la eficiencia de conversión y el factor de llenado.

Para mantener un entorno controlado y constante en las mediciones de este trabajo, asegurando la precisión y reproducibilidad de los resultados, se utilizó una lámpara de xenón con una intensidad de irradiancia constante de 1000 W/m^2 y un rango de longitud de onda entre 350 y 1700 nm. Los datos obtenidos de las pruebas realizadas en la celda solar fabricada se utilizaron para generar la curva J-V mostrada en la Gráfica 4.3.1. Esta gráfica exhibe las características típicas de una celda solar, mostrando una relación experimentalmente medida entre la corriente y el voltaje bajo condiciones estables de irradiancia y temperatura.

Según los resultados de la curva, la tensión de circuito abierto obtenida (V_{oc}) es de 0.91 V, con una densidad de corriente de cortocircuito (J_{sc}) de 27.3 mA/cm^2 , lo que proporciona una eficiencia de conversión de energía (PCE) del 12.57% con un factor de llenado del 60.57%. Los parámetros de caracterización obtenidos se atribuyen a la buena cristalinidad de los materiales electrodepositados y la buena coincidencia de interfaz de

película adquirida. Una buena cristalinidad de los materiales minimiza las pérdidas en las interfaces de los materiales y aumenta la absorción de luz y la generación de fotocorriente.



Gráfica 4.3.1. Curva J-V en la caracterización práctica (Densidad de corriente vs voltaje).

CAPÍTULO V. COMPARACIÓN DE RESULTADOS

En este capítulo se presenta un análisis comparativo entre los resultados obtenidos en la caracterización de las celdas solares diseñadas y fabricadas. En la sección 5.1 se encuentran los resultados obtenidos en el diseño teórico y los resultados obtenidos en la fabricación experimental de una celda solar con Qw, en la sección 5.2 se comparan los resultados teóricos y experimentales (con y sin Qw) y finalmente en la sección 5.3 se determina la correlación lineal existente entre la eficiencia de conversión y los parámetros de desempeño de las celdas solares. Los parámetros comparados incluyen el voltaje y la corriente de corto circuito, la potencia máxima, el voltaje y la corriente a máxima potencia, la densidad de corriente máxima, la resistencia y la eficiencia de conversión.

5.1. Resultados teóricos y Resultados prácticos de una celda solar con Qw

En esta sección se realiza una comparación entre los resultados de desempeño obtenidos en el diseño teórico y los resultados experimentales de la celda solar diseñada y fabricada con la inclusión de un Qw de CdHgTe en la capa de CdTe. A continuación, en las Tablas 5.1.1. y 5.1.2. se presentan los resultados a comparar:

Tabla 5.1.1. Resultados teóricos de las características de desempeño.

Características de desempeño de la celda solar en el diseño teórico							
V_{OC}	I_{SC}	P_{MaxPot}	V_{MaxPot}	I_{MaxPot}	R_{MaxPot}	FF	PCE
0.9167 V	$1.23 * 10^{-4}$ A	$9.91 * 10^{-5}$ W	0.8263 V	$1.2 * 10^{-4}$ A	6885.83 Ω	0.8740	10.85 %

Tabla 5.1.2. Resultados prácticos de las características de desempeño.

Características de desempeño de la celda solar en la fabricación							
V_{OC}	I_{SC}	P_{MaxPot}	V_{MaxPot}	I_{MaxPot}	R_{MaxPot}	FF	PCE
0.91 V	2.73 A	0.0150 W	0.66 V	2.28 A	0.2894 Ω	0.6057	12.57 %

La comparación entre los resultados de las características de desempeño obtenidos del diseño teórico (Tabla 5.1.1) y los resultados obtenidos de la implementación práctica (Tabla 5.1.2), revela diferencias significativas. Esta disparidad se atribuye en parte al enfoque teórico del diseño de la celda solar individual, que considera condiciones ideales, por ejemplo, en el cálculo de la tasa de generación de excitones se asume una eficiencia igual a uno que indica que cada fotón absorbido genera un excitón en la capa activa, lo que contribuiría idealmente al proceso de generación de corriente. Además, otros aspectos, como los reactivos utilizados en la preparación de las soluciones electrolíticas utilizadas en la electrodeposición y el control de los parámetros

clave (voltaje, corriente y tiempo de depósito) en el crecimiento del material, también influyeron en el desarrollo práctico de las celdas.

5.2. Resultados teóricos y prácticos de una celda solar con Qw – Resultados teóricos y prácticos de una celda solar sin Qw

En esta sección se realiza una comparación entre los resultados de desempeño obtenidos en el diseño teórico y fabricación de una celda solar sin Qw y los resultados obtenidos en el diseño teórico y fabricación de una celda solar con Qw. A continuación, en las Tablas 5.2.1. y 5.2.2. se presentan los resultados a comparar:

Tabla 5.2.1. Resultados teóricos de las celdas solares con y sin Qw.

Características de desempeño de la celda solar en el diseño teórico								
Sin Qw	V _{OC}	I _{SC}	P _{MaxPot}	V _{MaxPot}	I _{MaxPot}	R _{MaxPot}	FF	PCE
	0.9167 V	1.23 * 10 ⁻⁴ A	9.91 * 10 ⁻⁵ W	0.8263 V	1.2 * 10 ⁻⁴ A	6885.83 Ω	0.8740	10.85 %
Con Qw	V _{OC}	I _{SC}	P _{MaxPot}	V _{MaxPot}	I _{MaxPot}	R _{MaxPot}	FF	PCE
	0.9248 V	1.64 * 10 ⁻⁴ A	1.34 * 10 ⁻⁴ W	0.8342 V	1.61 * 10 ⁻⁴ A	5181.36 Ω	0.8749	15 %

Tabla 5.2.2. Resultados prácticos de las celdas solares con y sin Qw.

Características de desempeño de la celda solar en la fabricación								
Sin Qw	V _{OC}	I _{SC}	P _{MaxPot}	V _{MaxPot}	I _{MaxPot}	R _{MaxPot}	FF	PCE
	0.002 V	0.0019 A	2.21 * 10 ⁻⁶ W	0.0013 V	0.0017 A	0.7647 Ω	0.5816	5.6 * 10 ⁻³ %
Con Qw	V _{OC}	I _{SC}	P _{MaxPot}	V _{MaxPot}	I _{MaxPot}	R _{MaxPot}	FF	PCE
	0.91 V	2.73 A	0.0150 W	0.66 V	2.28 A	0.2894 Ω	0.6057	12.57 %

La comparación entre los resultados de las características de desempeño teórico de una celda solar sin y con Qw (Tabla 5.2.1) revela diferencias significativas, atribuibles principalmente a la inserción del Qw en la estructura. La presencia de un Qw permite un control más preciso sobre las propiedades ópticas y electrónicas de la celda, lo que conlleva a mejoras sustanciales en los resultados de caracterización. Así mismo, en la Tabla 5.2.2 se observa una disparidad notable entre los valores obtenidos, que se atribuye a las diferentes técnicas de fabricación empleadas. Mientras que para la celda solar sin Qw se utilizó la técnica de deposición de aspersion pirolítica, para la celda solar con Qw se empleó la técnica de crecimiento por electrodeposición.

5.3. Correlación entre de los resultados teóricos y prácticos de una celda solar con y sin QW

En esta sección se determina la correlación lineal que existe entre la eficiencia de conversión obtenida en una celda solar con y sin la inclusión de un Qw, tanto en su aplicación práctica como en su rendimiento teórico, con los parámetros de desempeño (J_V , V_{OC} , J_{sc} , FF) utilizados para caracterizar dicha celda. Esto permite identificar que parámetros de desempeño influyen directamente en el cambio de la eficiencia en la celda. Para ello se empleará el coeficiente de correlación de Pearson (r_{xy}) como medida de asociación. Este coeficiente se mide en una escala de 0 a 1, tanto en dirección positiva como en negativa, un valor de $r_{xy} = 0$ indica que no hay relación lineal entre las variables, mientras que un valor de $r_{xy} = \pm 1$ indica que hay una correlación perfecta entre dos variables, ya sea positiva o negativa. Para calcular dicho coeficiente se utiliza la siguiente ecuación:

$$r_{xy} = \frac{COV(x,y)}{\sqrt{Var(x) \times Var(y)}} \quad (47)$$

Donde $Cov(x, y)$ es la covarianza o variación conjunta entre las variables x y y ; y $Var(x, y)$ es la varianza o media de dispersión de x y y , respetivamente:

$$Cov(x, y) = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{n} \quad (48)$$

$$Var(x, y) = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 (y_i - \bar{y})^2}{n} \quad (49)$$

Donde n es el número total de observaciones; \bar{x} y \bar{y} son las medias aritméticas de las variables x y y , respectivamente:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \quad (50)$$

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} \quad (51)$$

A continuación, en las Tablas 5.3.1 y 5.3.2 se muestran los resultados obtenidos de r_{xy} , $Cov(x, y)$ y $Var(x, y)$, así como los parámetros utilizados en cada uno de los cálculos:

Tabla 5.3.1. Correlación entre los parámetros de desempeño teórico y n_{power} en celdas solares con y sin Qw.

Correlación de Pearson en resultados teóricos						
Parámetro	V_{OC}	I_{sc}	J_{sc}	V_{MaxPot}	I_{MaxPot}	FF
Sin Qw	0.9167 V	1.23×10^{-4} A	1.219 A/cm^2	0.8263 V	1.2×10^{-4} A	0.8740
Con Qw	0.9248 V	1.64×10^{-4} A	1.66 A/cm^2	0.8342 V	1.61×10^{-4} A	0.8749
\bar{x}	0.9207	1.43×10^{-4}	1.44	0.8302	1.4×10^{-4}	0.8744

$Cov(x, PCE)$	8.4×10^{-3}	4.25×10^{-5}	0.4668	8.1×10^{-3}	4.25×10^{-5}	9.33×10^{-4}
$Var(x, PCE)$	1.64×10^{-5}	4.2×10^{-10}	0.0506	1.56×10^{-5}	4.2×10^{-10}	2.02×10^{-7}
$r(x, PCE)$	1	1	1	1	1	1

Tabla 5.3.2. Correlación entre los parámetros de desempeño práctico y n_{power} en celdas solares con y sin Qw.

Correlación de Pearson en resultados prácticos						
Parámetro	V_{oc}	I_{sc}	J_{sc}	V_{MaxPot}	I_{MaxPot}	FF
Sin Qw	0.002 V	0.0019 A	1.261 A/cm^2	0.0013 V	0.0017 A	0.5816
Con Qw	0.91 V	2.73 A	0.0273 A/cm^2	0.66 V	2.28 A	0.6057
\bar{y}	0.456	1.365	0.6441	0.3306	1.1408	0.5936
$Cov(y, PCE)$	2.8521	8.5692	-3.8751	2.0690	7.1563	0.0757
$Var(y, PCE)$	0.2061	1.8606	0.3805	0.1084	1.2976	1.45×10^{-4}
$r(y, PCE)$	1	1	-1	1	1	1

La Tabla 5.3.2 presenta los resultados de la correlación entre los parámetros de desempeño teórico (JV , V_{oc} , J_{sc} , FF) y el factor de eficiencia de conversión (n_{power}) en celdas solares, tanto con la presencia como la ausencia de pozo cuántico (Qw). Una observación inmediata revela que el coeficiente de correlación de Pearson en todos los casos es igual a 1. Este hallazgo denota una correlación positiva muy fuerte entre los parámetros de desempeño y la eficiencia de conversión en la celda solar.

El resultado sugiere que un aumento en los valores de los parámetros de desempeño teórico está asociado con un incremento proporcional en la eficiencia de conversión de la celda solar. De manera recíproca, una disminución en estos parámetros conlleva una reducción en la eficiencia de la celda.

Adicionalmente, la Tabla 5.3.2 también proporciona información sobre la correlación entre los parámetros de desempeño práctico y el factor de eficiencia de conversión en celdas solares, para los casos con y sin la presencia de Qw.

Finalmente, al analizar la correlación de Pearson entre la eficiencia de la celda solar y sus parámetros de desempeño, se logra una comprensión más profunda para entender de cómo estos factores se relacionan y cómo impactan en el rendimiento global de la celda. Este entendimiento es crucial para identificar áreas de mejora tanto en el diseño teórico como en futuras fabricaciones de celdas solares, con el fin de optimizar su eficiencia y rendimiento.

CAPÍTULO VI. CONCLUSIÓN

El propósito de este estudio de investigación consiste en presentar el diseño teórico y la fabricación de una celda solar que incorpora un pozo cuántico dentro de la estructura multicapa de vidrio sodalima/ITO/CdS/CdTe/Ag. El diseño teórico se fundamenta en el cálculo de la tasa de generación de excitones $G(x)$ en la capa activa nanoestructurada, la determinación de las concentraciones de carga $n(x)$ y $p(x)$, así como la determinación del tamaño de la región de depleción en la capa activa del dispositivo mediante un proceso de autoconsistencia entre la ecuación de Poisson y las ecuaciones de continuidad de carga. Además, se lleva a cabo la caracterización del rendimiento de la celda unitaria mediante el cálculo de la curva de densidad de corriente-voltaje (JV), el voltaje de circuito abierto (V_{oc}), la densidad de corriente de cortocircuito (J_{sc}), el factor de llenado (FF) y la eficiencia de conversión (PCE) utilizando las ecuaciones fundamentales para dispositivos de unión pn.

La parte de la fabricación está basada en la electrodeposición progresiva de películas de CdS, CdTe, HgCdTe, CdTe y Ag en vidrio de sodio-lima recubierto con ITO. Una característica distintiva del método de electrodeposición usado es la aplicación de una solución no acuosa que contiene EG como electrolito suplementario para cada paso de deposición de película. Utilizar las mismas soluciones no acuosas y EG como electrolito de soporte reduce la incompatibilidad ambiental y la degradación en la adhesión capa a capa, y disminuye la hidrofobia de los materiales semiconductores. Todas las películas depositadas mostraron uniformidad y adhesión logradas mediante un control preciso de la temperatura del electrolito, que se muestra como uno de los factores más importantes que influyen en el proceso de crecimiento. Para la deposición de CdS, se encontró que un tiempo de trabajo de 35 minutos con una densidad de corriente constante de 15 mA/cm^2 a una temperatura de 140°C producía condiciones ideales. Sin embargo, en el depósito de CdTe y HgCdTe, fueron suficientes 20 minutos de procesamiento a una corriente constante de 2.5 mA/cm^2 a una temperatura de 90°C . Para depositar el HgCdTe, se añade una concentración de $1.99 \times 10^{-4} \text{ M}$ de HgCl_2 a la solución electrolítica en comparación con la preparación de la solución electrolítica para depositar CdTe. Además, para la deposición de la película de Ag, no se requirió alta temperatura. Una temperatura de 40°C en la preparación de la solución electrolítica fue adecuada para garantizar la solubilidad de los reactivos en el EG. Sin embargo, fue crucial mantener una diferencia de potencial constante de 3V entre los electrodos.

Entre los logros más destacados alcanzados en el marco de este proyecto, se destaca la publicación de dos artículos de investigación y la participación en el Congreso Internacional de Investigación Tijuana (CI2T, Anexo

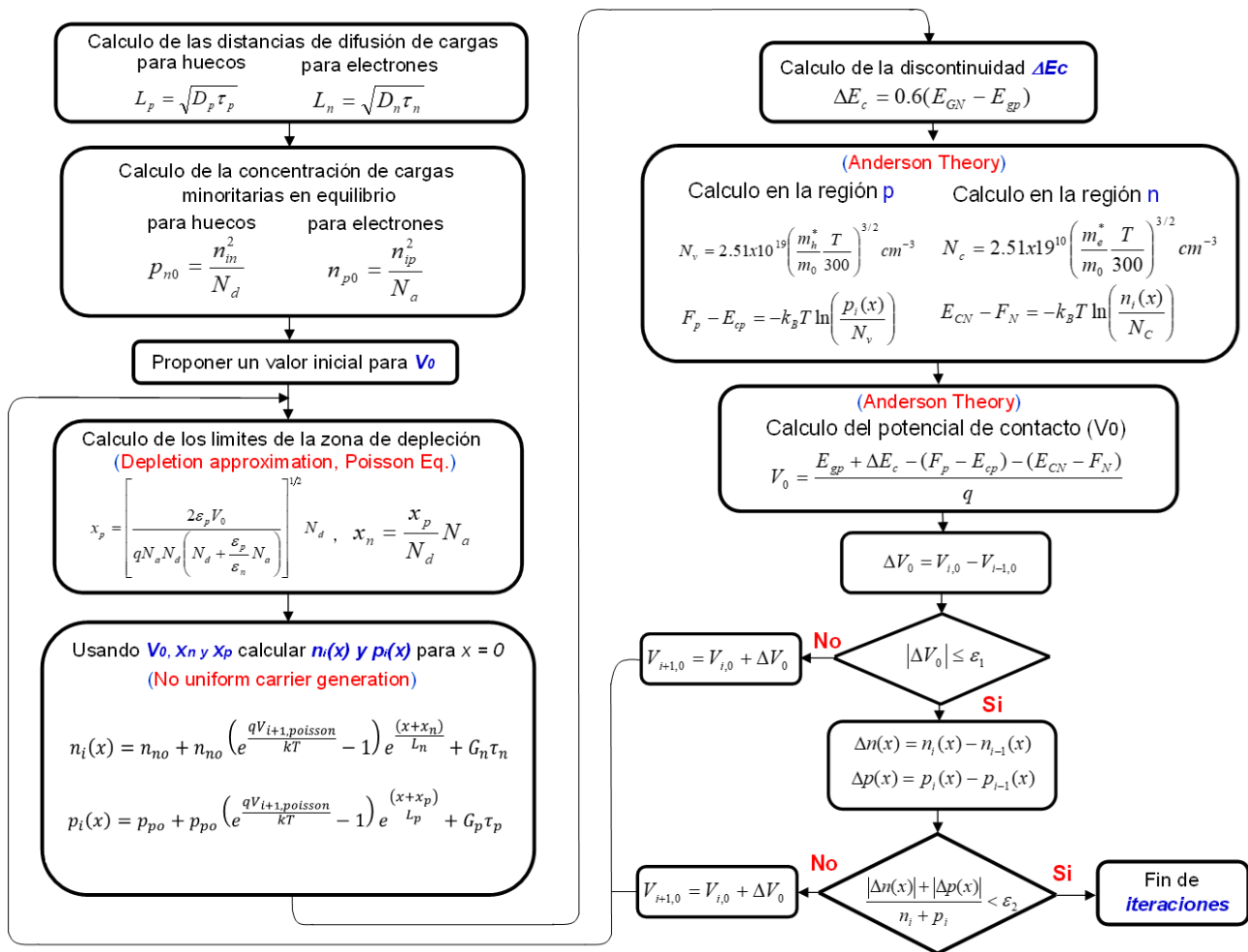
II). Durante dicho evento, se presentó el primer artículo titulado "*Optical Absorption and Conversion Efficiency Improvement by a QW Insertion in the Active Layer of PN Solar Cell*" (Anexo III), el cual posteriormente fue publicado en la revista Aristas, registrada con el ISSN 2007-9478. El segundo artículo titulado "*All-Layer Electrodeposition of a CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe Photodetector for Mid-Wavelength Infrared Detection*" (Anexo IV) se publicó en la revista optical materials de la casa editora Elsevier.



REFERENCIAS

- [1] Majid, A., & Bibi, M. (2018). Cadmium based II-VI Semiconducting Nanomaterials. En *Topics in mining, metallurgy and materials engineering*. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-68753-7>
- [2] Saha, S., Johnson, M. W., Altayaran, F., Wang, Y., Wang, D., & Zhang, Q. (2020). Electrodeposition Fabrication of Chalcogenide Thin Films for Photovoltaic Applications. *Electrochem*, 1(3), 286-321. <https://doi.org/10.3390/electrochem1030019>
- [3] Tatiparti, S. S. V., & Ebrahimi, F. (2011). Potentiostatic versus galvanostatic electrodeposition of nanocrystalline Al-Mg alloy powders. *Journal Of Solid State Electrochemistry*, 16(3), 1255-1262. <https://doi.org/10.1007/s10008-011-1522-5>
- [4] Al-Bat'hi, S. A. (2015). Electrodeposition of Nanostructure Materials. En *InTech eBooks*. <https://doi.org/10.5772/61389>
- [5] Souad A. M. Al-Bat'hi. Characterization of Electrodeposited Zn (Se, Te) Thin Films/ Polymer (PEO – Chitosan Blend) Junction for Solar Cells Applications. PhD thesis. Malaya University; 2007
- [6] Weerasinghe, A. R., "Solar cells based on electrodeposited thin films of ZnS, CdS, CdS_{Se} and CdTe", PhDT, 2013
- [7] Premaratne, K., Akuranthilaka, S. N., Dharmadasa, I. M., & Samantilleka, A. (2004). Electrodeposition using non-aqueous solutions at 170 °C and characterisation of CdS, CdS_xSe(1-x) and CdSe compounds for use in graded band gap solar cells. *Renewable Energy*, 29(4), 549-557. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2003.08.002>
- [8] Sali, D. P., & Chaure, N. B. (2021a). Electrodeposition and Characterization of CdTe thin films for photovoltaic applications. *Materials Today: Proceedings*, 42, 1647-1650. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.07.475>
- [9] Boosagulla, D., Mandati, S., Ramachandraiah, A., & Sarada, B. V. (2018). Room Temperature Pulse Electrodeposition of CdS Thin Films for Application in Solar Cells and Photoelectrochemical Cells. *ECS Journal Of Solid State Science And Technology*, 7(8), P440-P446. <https://doi.org/10.1149/2.0261808jss>
- [10] Altiokka, B., & Yildirim, A. K. (2018). Electrodeposition of CdS Thin Films at Various pH Values. *Journal Of The Korean Physical Society*, 72(6), 687-691. <https://doi.org/10.3938/jkps.72.687>
- [11] Kumarasinghe, K., De Silva, D. S. M., Pathiratne, K., Salim, H. I., Manaf, N. A. A., & Dharmadasa, I. M. (2016). Electrodeposition and characterization of as-deposited and annealed CdTe thin films. *Ceylon Journal Of Science*, 45(2), 53. <https://doi.org/10.4038/cjs.v45i2.7388>
- [12] Chauhan, S., & Rajaram, P. (2008). Electrodeposition of HgCdTe thin films. *Solar Energy Materials & Solar Cells/Solar Energy Materials And Solar Cells*, 92(5), 550-557. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2007.11.011>
- [13] Nair, J., Jayakrishnan, R., Chaure, N. B., Gohkale, S., Lobo, A., Kulkarni, S. A., & Pandey, R. K. (1999). Deposition and characterization of Cd_xHg_{1-x}Te films electroplated from a nonaqueous bath. *Journal Of Physics And Chemistry Of Solids*, 60(10), 1693-1703. [https://doi.org/10.1016/s0022-3697\(99\)00030-x](https://doi.org/10.1016/s0022-3697(99)00030-x)
- [14] Hansen, G. L., Schmit, J. L., & Casselman, T. N. (1982). Energy gap versus alloy composition and temperature in Hg_{1-x}Cd_xTe. *Journal Of Applied Physics*, 53(10), 7099-7101. <https://doi.org/10.1063/1.330018>

Anexo I. Algoritmo de Gummel

Calculo de las concentraciones de carga $n(x)$ y $p(x)$ y potencial electrostático (V_{Poisson}) por autoconsistencia en la solución de las ecuaciones de Poisson – Continuidad (algoritmo iterativo de Gummel modificado):







IX Congreso Internacional de Investigación Tijuana
Otorga la presente:

CONSTANCIA

a: *M.I. Vianey Aracely Candelas-Urrea, Dr. Carlos Villa-Angulo,
Dr. Rafael Villa-Angulo*

Por su participación con el trabajo titulado: **“Optical Absorption and Conversion Efficiency Improvement by a QW Insertion in the Active Layer of PN Solar Cell”** mediante la presentación oral en el 6th Conference on Electronics Engineering en el marco del Congreso Internacional de Investigación Tijuana que se llevó a cabo del 26 al 28 de abril del 2023, en la ciudad de Tijuana, B. C. México.


María Jesús Ruiz Soto
María Elena Miranda Pascual
Track Chairs de CoEE


Dra. Alejandra Serrano Trujillo
Coordinador General del CI2T 2023

Anexo III. Artículo “Optical Absorption and Conversion Efficiency Improvement by a QW Insertion in the Active Layer of PN Solar Cell”

Número Especial de la Revista Aristas: Investigación Básica y Aplicada. ISSN 2007-9478, Vol.10, Núm. 18. Año 2023

Optical Absorption and Conversion Efficiency Improvement by a QW Insertion in the Active Layer of PN Solar Cell

M.I. Vianey Aracely Candelas-Urrea ^a, Dr. Carlos Villa-Angulo ^b, Dr. Rafael Villa-Angulo ^c

^{a, b, c} Instituto de Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja California, Blvd. Benito Juárez S/N, CP. 21280, Mexicali B.C., vianey.candelas@uabc.edu.mx, villac@uabc.edu.mx, rafael.villa@uabc.edu.mx, Mexicali, B. C., México.

Resumen

En los últimos años la técnica de inserción de pozos cuánticos, en la zona de depleción de una celda solar de unión PN, ha sido de gran interés en el campo de la investigación teórica y experimental. El interés de esta técnica está basado en el incremento en la absorción óptica que genera la colocación, en la zona de depleción de la unión PN, de un material semiconductor con menor ancho de zona prohibida que el de la capa activa de la unión PN. Cuando el material semiconductor a insertar es adecuado la unión PN incrementa la absorción de fotones, que a su vez aumenta la generación de corriente y la eficiencia de conversión sin sacrificar el voltaje autogenerado. La diferencia entre la estructura de una celda solar convencional y una con pozos cuánticos consiste en que para el caso de una celda con QW se colocan en la zona de depleción uno o múltiples pozos cuánticos. En este trabajo, se realiza un estudio teórico de la selección del material más adecuado para colocarse como QW en una celda solar con estructura *vidrio/ITO/CdS/CdSe/Ag* para formar una estructura *vidrio/ITO/CdS/CdSe/CdSe_{1-x}Te_x/CdSe/Ag*. Se presentan y discuten para ambos casos los valores calculados de la tasa de generación de excitones, así como los parámetros de desempeño voltaje de circuito abierto (V_{oc}), corriente de corto circuito (I_{sc}), factor de llenado (FF) y eficacia de conversión (η).

Palabras clave—Absorción óptica, Celda solar, Eficiencia de conversión, pozo cuántico, Unión PN.

Abstract

In recent years, the technique of quantum wells insertion in the depletion zone of a PN junction solar cell has been of great interest. The interest of this technique is based on the increase in optical absorption generated by the placement, in the depletion zone of the PN junction, of a semiconductor material with a smaller bandgap than that of the active layer of the PN junction. When the semiconductor material to be inserted is suitable, the PN junction increases the absorption of photons, which in turn increases the generation of current and conversion efficiency without sacrificing the self-generated voltage. The difference between a conventional solar cell structure and a quantum wells solar cell structure is that in the case of a quantum wells cell in the depletion zone are collocated one or multiple quantum wells. In this work, a theoretical study is carried out on the selection of the most suitable material to be placed as QW in a solar cell of structure *glass/ITO/CdS/CdSe/Ag* to form a *glass/ITO/CdS/CdSe/CdSe_{1-x}Te_x/CdSe/Ag* structure. The calculated exciton generation rate as well as the short-circuit

voltage (V_{oc}), short-circuit current (I_{sc}), fill factor (FF) and conversion efficiency (η) are presented and discussed for both cases.

Keywords— Conversion efficiency, Optical absorption, PN junction, Quantum well, Solar Cell.

1. INTRODUCCIÓN

Los semiconductores inorgánicos se utilizan comúnmente para fabricar materiales fotovoltaicos (PV). Los materiales fotovoltaicos se concatenan en homouniones o heterouniones para formar estructuras de dispositivo positivo-negativo (PN) o positivo-intrínseco-negativo (PIN). La función principal de estas estructuras de dispositivos es permitir la generación de portadores libres cuando la estructura se expone a la luz. De una gran cantidad de materiales semiconductores, solo unos pocos satisfacen las condiciones de absorción de luz solar. Idealmente, el material absorbente de una celda solar terrestre debería ser un semiconductor con una banda prohibida de 1 a 1.5 eV, un alto coeficiente de absorción óptica ($10^4 - 10^5 \text{ cm}^{-1}$) en la región de longitud de onda de 350 a 1000 nm, una longitud de difusión grande, y una baja velocidad de recombinación [1]. Si se cumple la mayoría de estas condiciones y el material está ampliamente disponible, el material tiene el potencial para ser utilizado en la fabricación de celdas solares de película delgada. Aunque el silicio con una banda prohibida de 1.1 eV domina el mercado fotovoltaico, claramente no es un material ideal para la fabricación de celdas solares de película delgada debido a su banda prohibida indirecta [2]. Adicionalmente, aunque los materiales compuestos de los grupos III-V de la tabla periódica, como el arseniuro de galio (GaAs) y el fosfuro de indio (InP), con bandas prohibidas directas son ideales para aplicaciones fotovoltaicas, son demasiado caros para aplicaciones comerciales a gran escala debido al alto costo de los precursores necesarios utilizados para su deposición. Por otra parte, los materiales compuestos de los grupos II-VI de la tabla periódica, como el telurio de cadmio (CdTe), el seleniuro de cadmio (CdSe) y el sulfuro de cadmio (CdS), depositados mediante técnicas económicas a baja temperatura, poseen estructuras químicas en las que las superficies internas y externas están intrínsecamente bien pasivadas y se caracterizan por tener una baja velocidad de recombinación con exceso de portadores. Esta propiedad permite que estos materiales compuestos sean utilizados para construir estructuras de uniones múltiples con diferentes anchos de banda prohibida ayudando a recolectar el exceso de portadores y, por lo tanto, a mejorar al desempeño de celdas solares. En las celdas solares tipo PN de CdS/CdTe y CdS/CdSe la absorción de fotones es el mecanismo principal para la generación de portadores libres. Pero estas heterouniones no absorben energías menores que la energía de su banda prohibida lo que limita su eficiencia cuántica. A pesar de esta incapacidad de absorción y las pérdidas de recombinación en la interfaz CdS/CdTe y CdS/CdSe se han reportado eficiencias de conversión superior al 17 % para las celdas solares fabricadas con estas heterouniones [3, 4, 5]. Como una alternativa para aumentar la eficiencia de estas celdas solares, se han reportado celdas solares que utilizan un

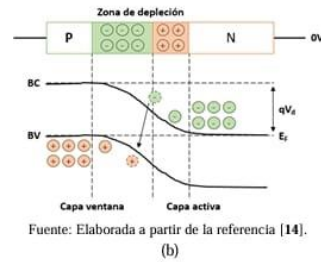
260

pozo cuántico (QW) y múltiples pozos cuánticos en la heterounión [6, 7]. En principio, las estructuras de estas celdas solares incorporan pozos cuánticos en la zona de depleción de la unión PN para formar una estructura de pozo cuántico múltiple PN(MQW). La formación de un QW se logra insertando un material en la zona de depleción de la unión PN con un ancho de banda prohibida menor que el de la capa activa lo que genera que se incremente el espectro de absorción de la celda. En las estructuras PN(MQW), el ancho y el número de pozos cuánticos determinan el borde de absorción de fotones y la respuesta espectral de la celda solar. Por lo tanto, se puede determinar un ancho de capa absorbente óptimo en los pozos cuánticos para una alta eficiencia ajustando con precisión la posición del borde de absorción de fotones [8, 9, 10]. En este trabajo, se realiza un estudio teórico de la selección del material más adecuado para colocarse como QW en una celda solar con estructura *vidrio/ITO/CdS/CdSe/Ag* para formar una estructura *vidrio/ITO/CdS/CdSe/CdSe_{1-x}Te_x/CdSe/Ag*. Se presentan y discuten para ambos casos los valores calculados de la tasa de generación de excitones, así como los parámetros de desempeño V_{oc} , I_{sc} , FF y η .

2. ESTRUCTURA DE UNA CELDA SOLAR

La Fig. (1a) muestra la estructura convencional de una celda solar de unión PN. En la parte inferior se encuentra un vidrio que generalmente es soda-lima y funciona como sustrato, el cual es encargado de darle solides mecánica y sostener a la celda solar. Posteriormente, tiene una capa delgada de un metal transparente que en este trabajo es óxido de indio (ITO), la cual funciona como el conductor frontal de la celda y debe de ser transparente al espectro de radiación solar para no absorber ni atenuar dicho espectro. Enseguida se deposita el primer semiconductor que funciona como material ventana, el cual debe de tener una alta foto-conductividad al espectro solar y es fundamental y necesario para formar la zona de depleción de la unión PN. Sobre el material ventana se deposita el segundo semiconductor el cual es la capa activa o el material que mayoritariamente absorbe el espectro solar incidente. Finalmente, se encuentra el contacto superior el cual es un metal con una alta fusión de trabajo para formar un contacto óhmico.

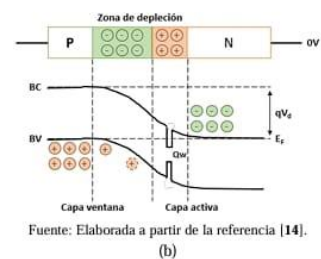
Fig. (1). Celda solar unitaria de heterounión PN. (a) estructura; (b) diagrama energético de la unión.



La Fig. (1b) muestra el diagrama energético de una unión PN. Los fotones absorbidos son aquellos que acarrean energía mayor al ancho de la zona de agotamiento definida con la diferencia entre la banda de conducción (BC) y la banda de valencia (BV), $E_g = BC - BV$. En la zona de depleción se realiza mayoritariamente la generación de cargas libre. Una desventaja en este tipo de celdas es su incapacidad para absorber fotones con energía menor al valor de E_g de la capa activa. Una solución a este problema es la inserción de una o varias capas delgadas de material semiconductor en la zona de depleción de la unión PN que tenga un E_g menor al de la capa activa, conocida como QW. Esta capa delgada de material semiconductor absorberá fotones con energía menor al E_g de la capa activa debido a la discontinuidad que se crean en las bandas de energía de la celda.

La Fig. (2a) muestra la estructura de una celda solar con pozos cuánticos. Esta estructura es básicamente igual a la de una celda convencional con la diferencia de la colocación del QW en la parte activa de la región intrínseca de la unión PN. La Fig. (2b) muestra el diagrama energético de una unión PN con el QW. En este diagrama se puede observar que al colocar un material con menor E_g se crea una discontinuidad energética en el diagrama de bandas, que absorberá fotones con energía menor al E_g de la capa activa.

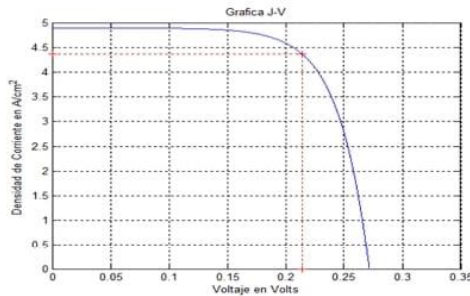
Fig. (2). Estructura de una celda solar unitaria de heterounión pn con la inserción de un QW en la capa activa.



2.1 DISEÑO Y ANÁLISIS TEÓRICO DE LAS CELDAS SOLARES

En este trabajo se diseñaron teóricamente dos diferentes celdas solares de unión PN. La primera con la estructura convencional sin QW y la segunda con la misma estructura pero incluyendo un QW. La estructura considerada para la primera fue vidrio/ITO/CdS/CdSe/Ag, con anchos de capas de 1.1 mm, 200 nm, 100 nm, 10 μm y 5 μm, respectivamente. Para esta celda se consideró CdS dopado con Sodio (Na) resultando tipo P con un $E_g = 2.42$ eV, y CdSe dopado con Galio (Ga) resultando tipo N con un $E_g = 1.74$ eV. Posteriormente se obtuvo su curva característica J-V mostrada en la Fig. (3). Considerando los parámetros de la tabla (1) se obtuvieron las características de desempeño V_{oc} , J_{sc} , FF y η utilizando las ecuaciones (1), (2), (3) y (4), respectivamente, los cuales mostrados en la tabla (2).

Fig. (3). Curva característica J-V de la celda solar convencional de unión PN diseñada con estructura vidrio/ITO/CdS/CdSe/Ag.



Fuente: Elaboración propia.

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

$$J_{sc} = -qG_L(L_p + L_n) \quad (2)$$

$$FF = \frac{V_{maxpot} \times J_{maxpot}}{V_{oc} \times J_{sc}} \quad (3)$$

$$\eta = \frac{V_{maxpot} \times J_{maxpot}}{P_{incidente}} \quad (4)$$

Tabla 1. Parámetros utilizados en los diseños.

Parámetro	Valor
L_p distancia de difusión de huecos	$9.121 \times 10^{-5} \text{ cm}$
L_n distancia de difusión de electrones	$9.486 \times 10^{-4} \text{ cm}$
G_L tasa de generación de excitones	$2.94 \times 10^{28} \text{ cm}^3/\text{s}$
D_n coeficiente de difusión de electrones	$9 \text{ cm}^2/\text{s}$
D_p coeficiente de difusión de huecos	$0.52 \text{ cm}^2/\text{s}$
n_{po} concentración de electrones en equilibrio	$1.162 \times 10^{-11} \text{ cm}^{-3}$
p_{no} concentración de huecos en equilibrio	51.2 cm^{-3}
q carga del electrón	$1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
J_{maxpot} corriente a máxima potencia	$4.366 \text{ A}/\text{cm}^2$
V_{maxpot} voltaje a máxima potencia	0.2142 V

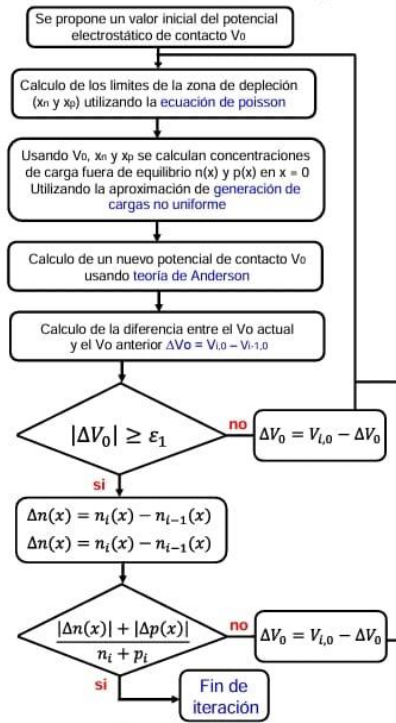
$P_{incidente}$ potencia incidente	100 mW cm^2
------------------------------------	-----------------------

La segunda celda solar diseñada incluye un QW, para el cual el material que lo forma fue seleccionado de tal manera que satisficiera cuatro criterios de selección. Los cuatro criterios establecidos para su selección son los siguientes:

1. El QW debe insertarse dentro de la zona de depleción en el material compuesto CdSe dado que es la capa activa.
2. El E_g de material del QW debe de ser menor al E_g del CdSe.
3. El material de QW debe de tener una constante de red "a" cercana al del CdSe para no genera alto estrés en los enlaces de interface.
4. El QW debe absorber fotones con energía que la estructura convencional no absorbe.

Como se puede observar en los criterios establecidos para la inserción del QW, este debe de ser colocado dentro de la zona de depleción de la unión PN. Por lo tanto, se debe calcular el ancho de la zona de depleción (w) fuera de equilibrio dado que la celda solar esta iluminada por una $P_{incidente}$ de manera constante. Para calcular w se utilizó el algoritmo de Gummel modificado mostrado en la Fig. (4).

Fig. (4). Algoritmo de Gummel modificado para el cálculo del ancho de la zona de depleción fuera de equilibrio.



Fuente: Elaboración propia.

Para iniciar la ejecución del algoritmo se propone un valor inicial para el potencial de contacto de Poisson ($V_{poisson}$) y se procede con el cálculo de las longitudes de difusión de cargas minoritarias hasta ejecutarlo completamente. Este algoritmo se cicla iterando hasta que se satisfacen dos condiciones; la primera es que la diferencia entre el $V_{poisson}$ de la iteración actual y el $V_{poisson}$ de una iteración anterior sea menor a un umbral previamente preestablecido, y la segunda que la suma de los valores absolutos de las diferencias de las concentraciones de cargas de la iteración actual y una anterior dividida sobre la suma de las concentraciones de cargas encontradas en la iteración actual sea menor a un umbral preestablecido. Una vez ejecutado este algoritmo se encontraron los datos mostrados en la tabla (2). Por lo tanto el QW se coloca dentro del material N a la mitad del ancho x_p .

Tabla (2). Valores calculados de ancho de la zona de depleción fuera de equilibrio.

Parámetro	valor
x_p ancho en el material N	$8.906 \times 10^{-7} \text{ cm}$
x_n ancho en material P	$7.659 \times 10^{-7} \text{ cm}$
w ancho total de la zona de depleción	$1.656 \times 10^{-6} \text{ cm}$

Una vez obtenida la posición donde se colocará el QW se debe seleccionar su material. Para realizar esta selección es importante definir la longitud de onda central de absorción del CdSe fijada por su E_g . Esta se encuentra utilizando la ecuación de Planck [ecuación (5)] que arroja $\lambda = 712.64 \text{ nm}$. Posteriormente, se selecciona una longitud de onda mayor de absorción para el material del QW y así que absorba fotones con menor energía que los que absorbe el CdSe. Por lo tanto, se escoge una λ para el material de QW de 825 nm.

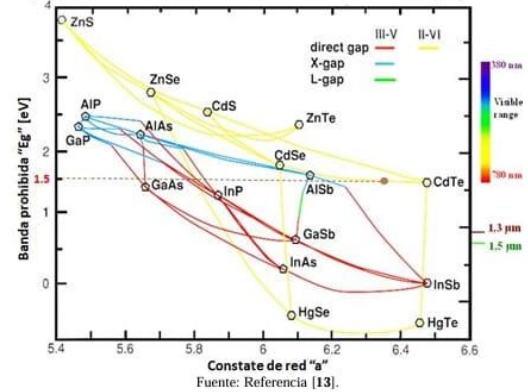
$$\lambda = \frac{1.24}{E_g} \quad (5)$$

Para encontrar el valor de ancho de banda prohibida que debe tener el material que formara el QW se utiliza la ecuación (5) de la cual se despeja E_g , el resultado en este cálculo es 1.5 eV. Posteriormente, utilizando las curvas de transición de materiales binarios a ternarios del grupo II-IV mostrada en la Fig. (5) se lleva a cabo la búsqueda del material para el QW. El procedimiento consiste en dibujar una línea horizontal en la posición de $E_g = 1.5 \text{ eV}$. Se observa que esta nueva línea horizontal toca la curva de transición que une a los materiales binarios CdSe y CdTe la cual representa un material ternarios de la forma $\text{CdSe}_{1-x}\text{Te}_x$ con un $E_g = 1.5 \text{ eV}$ y una constante red cercana al CdSe. Para encontrar el valor de la fracción molar "x" se usa la ecuación (6), donde E_A y E_B son el E_g del CdSe y CdTe respectivamente, el valor de b es un valor de ajuste igual a 0.01 tal como se explica en la referencia [11]. Se resuelve esta ecuación para x encontrando que para que $E_g(\text{CdSe}_{1-x}\text{Te}_x)$ sea 1.5 eV, x es de 0.4 y x-1 es de 0.6 lo que representa una proporción de 40% para el telurio (Te) y 60% para el selenio (Se). Por lo tanto el material ternario resultante para el QW es $\text{CdSe}_{0.6}\text{Te}_{0.4}$.

$$E_g(\text{CdSe}_{1-x}\text{Te}_x) = E_A + (E_B - E_A - b)x + bx^2 \quad (6)$$

De acuerdo a la selección, la estructura para la segunda celda solar es *vidrio/ITO/CdS/CdSe/CdSe_{0.6}Te_{0.4}/CdSe/Ag*. Cabe mencionar que el valor del ancho del QW se obtuvo al resolver el algoritmo modificado de Gummel mostrado previamente junto con la solución autoconsistente de las ecuaciones de Schrödinger – Poisson.

Fig. (5). Curvas de transición de materiales binarios del grupo II-VI.



2.2. RESULTADOS

En esta sección se considera un análisis comparativo entre los resultados obtenidos en el diseño de la celda convencional y la celda diseñada con el QW en la estructura. Entre los resultados que se compararan se encuentran: el voltaje de circuito abierto, la corriente de corto circuito, la potencia máxima deseada, el voltaje a máxima potencia, densidad de corriente máxima, la resistencia a máxima potencia, el factor de llenado, eficiencia de conversión, entre otros.

En la tabla (3) se muestra un resumen de los resultados obtenidos en el desempeño teórico en las celdas solares diseñadas, en la columna central se encuentran los resultados de la celda con una estructura de tipo *vidrio soda-lima/CdS/CdSe/Ag*, mientras que en la columna derecha se encuentran los resultados de la celda con una estructura de tipo *vidrio soda-lima/ITO/CdS/CdSe/CdSe_{0.6}Te_{0.4}/CdSe/Ag*.

Tabla (3). Características de desempeño teórico.

Parámetro	Características de desempeño	
	Sin QW	Con QW
V_{OC}	0.2786 V	0.2908 V
J_{sc}	6.4046 A/cm^2	10.2189 A/cm^2
V_{max}	0.2205 V	0.2314 V
J_{max}	5.7324 A/cm^2	9.1933 A/cm^2
P_{max}	$1.2568 * 10^{-4} \text{ W}$	$2.0826 * 10^{-4} \text{ W}$
η_{power}	14.04 %	23.63 %
FF	0.7082	0.7160
R_{max}	386.84 Ω	257.11 Ω
I_{max}	$5.99 * 10^{-4} \text{ A}$	$9 * 10^{-4} \text{ A}$
A_{trans}	9943.47 μm^2	

Los resultados en la tabla muestran que el dispositivo diseñado sin QW obtiene una eficiencia de conversión teórica de 14.04 %, mientras que la eficiencia en la celda con un QW en la estructura es igual a 23.63 %. Este resultado muestra un incremento de 9.59 %, lo que sugiere que una celda solar diseñada teóricamente con un QW en la estructura alcanza una mayor eficiencia de conversión que la celda solar sin QW.

3. CONCLUSIONES Y DISCUSIONES

En este trabajo, se realizó un estudio teórico de la selección del material y su acho para colocarse como QW en una celda solar con estructura *vidrio/ITO/CdS/CdSe/Ag* y formar una celda con estructura *vidrio/ITO/CdS/CdSe/CdSe_{1-x}Te_x/CdSe/Ag*. Se calcularon y compararon los parámetros de desempeño de ambas celdas para cuantificar el efecto del uso del QW. Con respecto a la selección del material para el QW se establecieron criterio de selección así como un procedimiento basado en el uso de las curvas de transición de materiales binario a ternarios del grupo II-VI de la tabla periódica (Calcogenuros de Cadmio). Dicho procediendo sirve para seleccionar un material ternario que satisface los requerimientos de E_g y constante de red establecidos. Una vez que se ejecutó este procedimiento se encontró que el material a usarse como QW es el ternario $CdSe_{0.6}Te_{0.4}$ el cual posee un $E_g = 1.5$ eV y tiene una constante de red cercana al CdSe.

Con respecto a los parámetros de desempeño calculados para ambas celdas solares se encontró que la celda sin QW tiene un FF = 0.7082 y una $\eta = 14.04$ % mientras que la celda con el QW tiene un FF = 0.7160 y una $\eta = 23.63$ % lo que representa un incremento en FF de 0.0072 y un incremento en η de 9.59 %. Estos resultados sugieren que la inclusión del QW provoca un incremento considerable en el desempeño de la celda solar diseñada.

3.1 Observaciones generales

El autor le agradece al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico a los estudios de Vianey Aracely Candelas Urrea, así como a Instituto de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Baja California (UABC) por permitirle el uso de las instalaciones y el equipo necesario para la realización de este trabajo.

4. REFERENCIAS

- [1] J. Poortmans, V. Arkhipov, "Thin Film Solar Cells, fabrication, characterization and Applications", John Wiley & Sons Ltd, 2006.
- [2] K. L. Chopra, P. D. Paulson, V. Dutta, "Thin-film solar cells: an overview", Prog. Photovolt: Res. Appl., 12(2-3), pp. 69-92, 2004.
- [3] X. Wu, J. C. Keane, R. G. Dhere, C. DeHart, D. S. Albin, A. Duda, T. A. Gessert, S. Asher, D. H. Levi, P. Sheldon, "Seventeen European Photovoltaic Solar Energy Conference", 3, pp. 995-1000, 2001.
- [4] "First Solar sets 18.7% record for CdTe solar cell efficiency", ([\[today.com/news_items/2013/FEB/FIRSTSO_LAR_260213.html\]\(http://today.com/news_items/2013/FEB/FIRSTSO_LAR_260213.html\)\).](http://www.semiconductor-</div><div data-bbox=)

- [5] L. Kosyachenko, T. Toyama, "Current-voltage characteristics and quantum efficiency spectra of efficient thin-film CdS/CdTe solar cells", Sol. Energ. Mat. & Sol. C., 120, pp. 512-520, 2013.
- [6] K. W. J. Barnham, I. Ballard, J. P. Connolly, N. J. Ekins-Daukes, B. G. Klufinger, J. Nelson, C. Rohr, "Quantum well solar cells", Physical E, 14(1-2), pp. 27-36, 2002.
- [7] K. Y. Lai, G. J. Lin, C. Y. Chen, Y. L. Lai, "Origin of Hot Carriers in InGaN-Based Quantum-Well Solar Cells", IEEE Electron Device Letters, 32(2), pp. 179-181, 2011.
- [8] J. R. Villa, R. Villa, C. Villa, "Photon absorption coefficient (α) for a low-dimensional CdS/CdTe absorber by a partial k-selection approach", Journal of Nanophotonics, 7(1), pp. 2-13, 2013.
- [9] C. Villa, D. Saucedo, J. R. Villa, R. Villa-Angulo, "Optical field dissipation in heterostructures for nanophotovoltaic devices", Journal of Nanophotonics, 10(4), pp. 2-19, 2016.
- [10] J. R. Villa, R. Villa, K. Solorio, S. E. Ahumada, C. Villa, "Effect of effective mass mismatch in CdS/CdTe heterojunctions on the fundamental design parameters of nanophotonic devices", Journal of Nanophotonics, 8(1), pp. 2-14, 2014.
- [11] S.S. Patil and P. H. Pawar, "Structural and optical studies of thermally evaporated CdSe_xTe_{1-x} thin films", Journal of chemical, Biological and Physical Science, 2(3), pp. 1472-1484, 2012.
- [12] C. Villa, "CdSe_{0.4}Te_{0.6} Quantum Well-Based Photodetector Toward Imaging Vision Sensors", IEEE Sensors Journal, 20(22), pp. 13357-13363, 2020.
- [13] G. Brill, Y. Chen, "New material system for 3rd generation IR applications", Army Research Laboratory, pp. 9-24, 2010.
- [14] "Abrupt PN junction at thermal equilibrium", Fundamentals of Semiconductor physics, (http://www.optique-ingenieur.org/en/courses/OPI_ang_M05_C02/co/Contenu_05.html).

All-Layer Electrodeposition of a CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe Photodetector for Mid-Wavelength Infrared Detection

Vianey A. Candelas-Urrea, Carlos Villa-Angulo, Iván O. Hernández-Fuentes, Ricardo Morales-Carbajal, and Rafael Villa-Angulo

Abstract. In the past decade, researchers have employed various techniques to fabricate CdTe/HgCdTe/CdTe light sensing devices. These include photolithography (PL), liquid phase epitaxy (LPE), molecular-beam epitaxy (MBE), and ion implantation with etching for barriers and active layer deposition, as well as sputter coating (sputtering) and thermal evaporation (PVD) for depositing metal contacts. Because of the deposition conditions and environmental incompatibility, using a combination of different deposition techniques to fabricate a light sensing device requires high costs, energy, and time. Electrodeposition (ED) is a process that involves forming a coating layer on a base material by electrochemically reducing semiconductor/metal ions from an electrolyte. This process offers a low cost and low-energy route for depositing all layers of cadmium chalcogenide-based photodetectors. In this paper, an all-layer electrodeposition assembly approach is used to manufacture a glass/ITO/CdS/CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe/Ag photodiode (PD) for mid-wavelength infrared detection. The produced photodetector has sensitivity up to ≈ 900 nm with a detectivity (D^*) of 2.86×10^{12} cm Hz^{1/2} W⁻¹ and dark current density (d_{dark}) in the order of 10^{-6} mA cm⁻². Furthermore, the manufactured photodiode exhibits photovoltaic performance because V_{oc} and I_{sc} are self-generated compared to other reported photodiodes, illustrating viability and adaptability of electrodeposition process for all-layer deposition of photodiodes for various applications.

Keywords- Photodetector, electrodeposition, all-layer deposition, Quantum-well sensing devices, cadmium chalcogenides.

Address all correspondence to: Carlos Villa-Angulo, Autonomous University of Baja California, Institute of Engineering, s/n De la Normal Avenue, Insurgentes, Mexicali, B.C., México 21280, Tel: +1 686-566-4150; Fax: +1686-566-4150; E-mail: villac@uabc.edu.mx

1 Introduction

Cadmium chalcogenides (CCs) are composed of semiconductors involving elements from groups II and VI of the periodic table. CCs possess near-ideal direct bandgap, high light sensitivity, and high optical absorption coefficients necessary for low-cost thin film photodiodes and solar cell applications [1 – 5]. Specifically, owing to the bandgap tunability and high sensitivity from shortwave infrared (SWIR) to mid-wave infrared (MWIR) wavelengths, Hg_{1-x}Cd_xTe and CdSe_xTe_{1-x} ternary compounds are perfect materials for next generation of airspace light detection [6, 7] and terrestrial imaging in inclement weather [8]. PN, PIN, and avalanche photodiode (APD) are the favored structures to achieve HgCdTe based light sensing devices due to the obtained linear mode photon counting detection with efficiency over 90% within the wavelength range of 0.9–4.3 μm [9 – 12]. Many material deposition process combinations have been used to create these devices. For instance, Jin Chen et al. develop a *p*-type HgCdTe layer doped by Hg vacancies using a liquid phase epitaxy (LPE) method with a Cd component with boron (B) using ion implantation and a *n*-type HgCdTe via suppressing Hg vacancies in annealing processes. Then, Au electrodes were deposited using lithography and etching techniques [7]. Dekang Chen et al. develop a charge

and multiply an APD using molecular-beam epitaxy (MBE). The wafer was formed into circular mesa structures using normal photolithography techniques and citric acid wet etching and a submicrometer metal grating array on top of the mesa using electron-beam lithography and metal liftoff procedure [13]. P. Duke Anderson et al. utilized an LPE approach to generate p-type Cu-doped HgCdTe thin films and metals by plasma etching [14]. Klaudia H. et al. fabricated a *p*-type HgCdTe photodiode using metal organic chemical vapor deposition (MOCVD) for barriers and active layer and photolithography and wet chemical etching for bottom (*N*+ type) and top (*P*-type) Au contacts [15]. G. Qin et al. grew high-quality HgCdTe films with a thickness of 7–8 μm using an arsenic implantation approach on CZT(211)B substrates by MBE with a liquid Hg source at a growth temperature of $180^\circ\text{C} \pm 1^\circ\text{C}$. Then, utilizing these films, they created a high-performance planar *p*-on-*n* HgCdTe infrared photodetector [16], among others.

A variety of deposition processes with different growth conditions to create HgCdTe sensing devices demands high costs, energy, and time. Furthermore, environmental incompatibility of wet and dry growth material approaches causes degradation in layer-to-layer adhesion and increases the hydrophobicity of CCs' semiconducting materials [17 – 18]. However, electrodeposition is a straightforward, easy to implement relatively approach that does not need specialized and expensive equipment. It can attain large-scale production using high purity materials. Electrodeposition, a process consisting of the production of a coating layer onto a base material occurring through the electrochemical reduction of semiconductor/metal ions from an electrolyte, offers a low-cost and low-energy method for all-layer deposition of chalcogenide-based photodetectors [19 – 21]. In this study, an all-layer electrodeposition assembly process is described to create an HgCdTe based photodetector for mid-wavelength infrared detection. The process allows the electrodeposition of every semiconductor and back metal layer on a glass/ITO coated substrate. The constructed photodiode structure is glass/ITO/CdS/CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe/Ag where the CdS, CdTe, HgCdTe, and Ag films were electrodeposited using a traditional three-electrode configuration from nonaqueous electrolyte at potentials of 0.65 V, 0.625 V, and 0.75 V, respectively. The manufactured photodetector demonstrated sensitivity up to ≈ 850 nm with a detectivity (D^*) of 4.82×10^{13} $\text{cm Hz}^{1/2} \text{W}^{-1}$ and dark current density in the order of 10^{-6} mA cm^{-2} . Furthermore, the manufactured photodiode indicates photovoltaic performance since it generates V_{oc} and I_{sc} compared to other reported photodiodes, proving the viability of electrodeposition technique for all-layer deposition.

2. Photodetector architecture

Figure 1a depicts the constructed glass/ITO/CdS/CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe/Ag photodetector structure. A transparent glass layer measuring 25 mm x 50 mm x 1.1 mm is used as substrate. A 200-nm-thick layer of transparent indium tin oxide (ITO) functions as the front contact and *n*-electrode [22]. The design of the QW photodiode consists of a 300 nm layer of a high photoconductivity *n*-type CdS semiconductor serving as a window layer. This layer must have high conductivity to minimize electrical losses [23]. A layer of 84-nm-thick *p*-type CdTe semiconductor material acts as the primary photon absorber. A 6 nm layer of Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te followed by a 9.91- μ m-thick CdTe layer acts as the QW and back barrier for the *n*-*p* structure [24]. Next, a layer of Ag serves as the back contact. To establish a good ohmic contact with the *n*-type material, the back contact layer must have a high work function [25]. The 6 nm Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te layer sandwiched between the two CdTe layers forms a QW heterostructure. Figure 1b displays an energy diagram of the single photodetector, where the QW heterostructure is exhibited in depletion zones. Additionally, the first and second energy levels in the conduction and valence bands (E_{C1} , E_{C2} , E_{V1} , and E_{V2}) of the CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe QW were obtained by solving the conventional Schrödinger equation using effective mass and envelope function approximations. Hence, the effective or threshold absorption wavelength (λ_{eff}) of the QD is close to 742 nm. The λ_{eff} was theoretically obtained using the equation $\lambda_{eff} = hc/[Eg(Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te) + Ec_1 + Ev_1]$, where h is the Plank constant, c is the speed of light, and $Eg(Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te) = 1.26$ eV [26, 27].

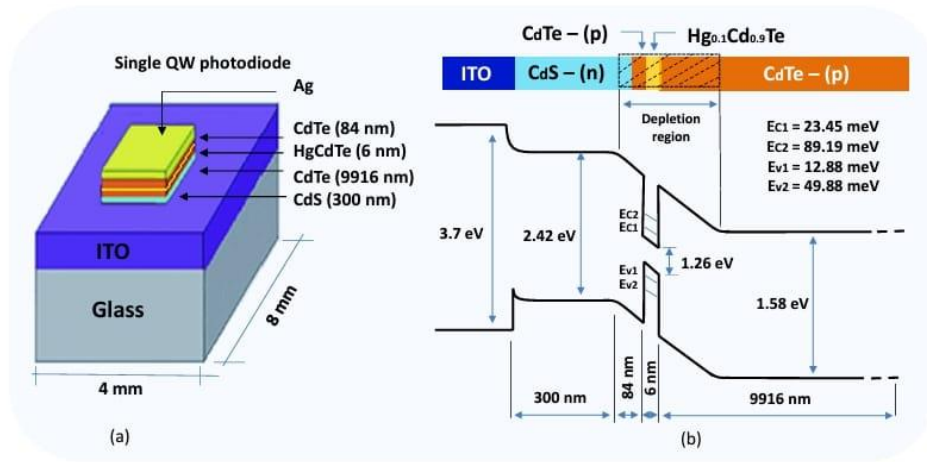


Figure 1. Fabricated glass/ITO/CdS/CdTe/HgCdTe/CdTe/Ag photodetector: (a) structure; (b) energy diagram.

3. Materials and methods

Electrodeposition from nonaqueous solutions was used to obtain successive thin films of cadmium sulfide (CdS), cadmium telluride (CdTe), mercury cadmium telluride (HgCdTe), and silver (Ag) on soda–lime glass substrates covered with an indium tin oxide layer (ITO). The fabrication device route includes electrode cleaning, electrolyte preparation, power source connection, and thin film and device characterization. For the electrodeposition of each semiconductor, different working conditions and chemical reagents were utilized to create the electrolytes. However, ethylene glycol (EG, 99%) was utilized as a supporting electrolyte in all solutions. For CdS electrodeposition, a solution was made comprising 50 ml of EG, 0.036M of cadmium chloride (CdCl₂, 99%), and 0.102M of sulfur (S, 99%). For CdTe, 20 ml of EG, 1M of CdCl₂, 0.160M of potassium iodide (KI, 99%), and 0.010M of tellurium chloride (TeCl₄, 99%) were required. For the HgCdTe, the same reagents used to deposit CdTe were used with the addition of $1.99 \cdot 10^{-4}$ M of HgCl₂ to the electrolyte solution. For Ag, 15 ml of EG, 1M silver nitrate (AgNO₃, 99%), and 1M sodium nitrate (NaNO₃, 99%) were used. In the electrodeposition of CdS, CdTe, and HgCdTe, a three-electrode setup was used with a platinum foil as the counter electrode, a thermometer as the reference electrode, and ITO coated at the glass substrate as the working electrode. In the Ag electrodeposition, the reference electrode was not necessary; consequently, a two-electrode setup was used.

3.1 CdS electrodeposition

The CdS film was applied on a soda–lime glass substrate coated with ITO. First, the substrate was cleaned in an ultrasonic bath containing acetone and isopropyl alcohol, each for 300 seconds at a power of 50 W, followed by drying at room temperature. Preparation of the electrolyte solution involved dissolving all reagents in EG, utilizing magnetic stirring on a hot plate at 40°C until a homogeneous solution was created. The temperature was then raised to 140°C, and electrodes were attached to the power supply terminals. The electrodeposition process lasted 35 minutes with a constant current density of 15 mA/cm² at temperature of 140°C. Subsequently, the substrate containing the electrodeposited CdS film was ultrasonically cleaned in isopropyl alcohol for 60 s at 50 W to eliminate any remaining residue. This post-electrodeposition process helped to guarantee the purity and ultimate quality of the CdS film. Figures 2a and 2b depict the substrate being submerged in the electrolyte and the substrate with the CdS electrodeposited layer, respectively. The electrolyte solution turns brown when additional ions leave the solution to

produce the binary compound in the substrate. Figure 2c displays the substrate with the CdS electrodeposited film following the post-electrodeposition ultrasonic cleaning process.

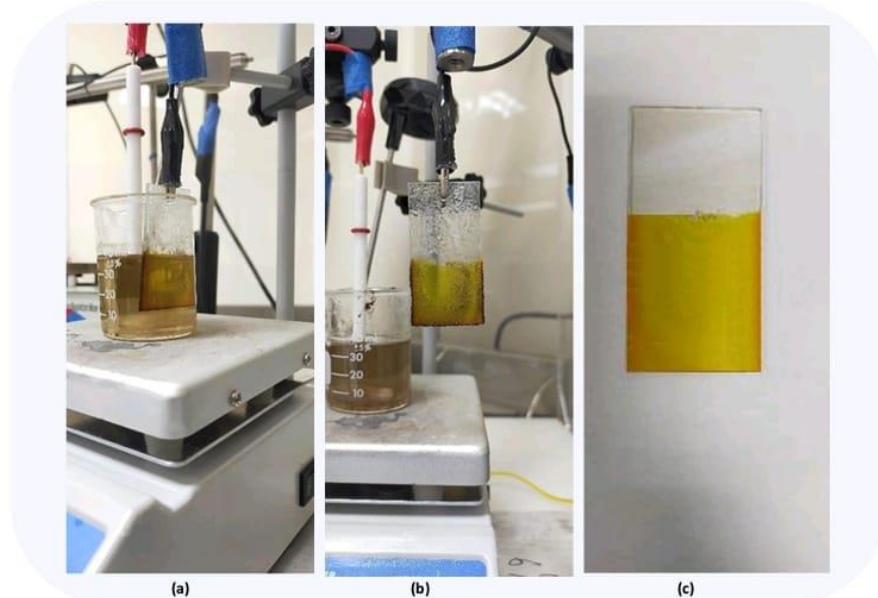


Figure 2. Electrodeposition of a CdS film: (a) substrate immersed in the electrolyte; (b) substrate with the electrodeposited CdS film before post-electrodeposition process; (c) substrate with the electrodeposited CdS film after the post-electrodeposition ultrasonic cleaning process.

3.2 CdTe/HgCdTe/CdTe electrodeposition

The CdTe/HgCdTe/CdTe heterostructure was deposited on a previously coated glass/ITO/CdS substrate. The substrate containing coated CdS was cleaned using isopropyl alcohol, and subsequently a thermal tape mask was placed in the area where the CdTe was not required. The electrolyte solution was produced by dissolving all chemicals in EG, using magnetic stirring on a hot plate at 40°C to ensure a homogeneous solution. In addition, the temperature was raised to 90°C, the magnetic stirring was stopped, and the electrodes were linked to the source terminals. The electrodeposition time was 20 minutes, maintaining a constant current density and temperature of 2.5 mA/cm² and 90°C, respectively. Further, the deposited heterostructure passed through a heat treatment at 180°C for 300 seconds to enhance the adhesion between the formed films. The process for the electrodeposition of the HgCdTe film was comparable to the process followed to deposit CdTe film. The only difference was the addition of 1.99×10^{-4} M of HgCl₂ to the electrolyte solution. Once the HgCdTe film was deposited, a second layer of CdTe was also deposited to

create a glass/ITO/CdS/CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe-type arrangement. Figure 3a, 3b, and 3c depict the substrate submerged in the electrolyte, the substrate with the thermal mask out the electrolyte, and the substrate with the CdS/CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe electrodeposited films, respectively.

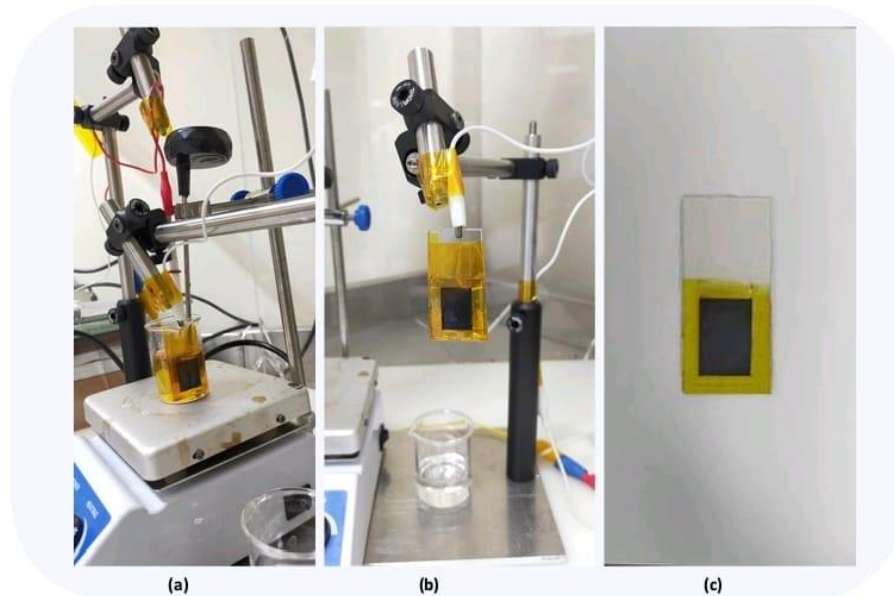


Figure 3. Electrodeposition of CdTe/HgCdTe/CdTe: (a) glass/ITO/CdS coated substrate immersed in electrolyte; (b) substrate with the CdTe/HgCdTe/CdTe electrodeposited film with thermal mask out the electrolyte; (c) glass/ITO/CdS/HgCdTe deposited films.

3.3 Ag electrodeposition

The Ag film was applied following the CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe heterostructure electrodeposition. A thermal tape mask was collocated to demarcate the area where Ag was placed. In the creation of the electrolyte solution, all reagents were dissolved in EG using magnetic stirring on a hot plate at 40°C until a homogeneous solution was obtained. Subsequently, both electrodes were submerged in the electrolyte, and the power supply was turned on. The electrodeposition process was 20 minutes at room temperature maintaining a constant potential difference of 3V between the electrodes. Subsequently, a heat treatment at 180°C for 60 seconds was performed to the deposited Ag film to enhance the adhesion between the CdTe and Ag layers. The heat treatment helped to improve the bond adhesion between the layers optimizing the quality and integrity of the depositions. Figure 4a and 4b depict the coated substrate submerged in the electrolyte and the substrate with the Ag electrodeposited film, respectively. An uncolored electrolyte is seen that does not change when ions leave the solution to form the Ag film in the substrate.

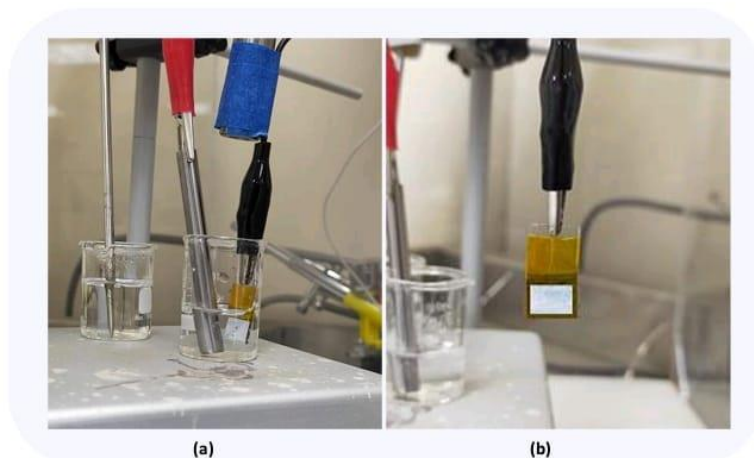


Figure 4. Ag electrodeposition: (a) Glass/ITO/CdS/CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe coated substrate immersed in the electrolyte; (b) Substrate with the Ag electrodeposited film.

5 Results and discussions

The chemical content, elemental morphology, and light absorbance of the electrodeposited CdS, CdTe, HgCdTe, and Ag films were investigated using X-ray analysis (XRD), field emission microscopy (EDS), and UV–vis–NIR scanning spectrophotometry. Figure 5a displays the XRD pattern of the CdS coated on ITO layer, and the associated structural data are summarized in Table 1. This figure depicts the ITO and the CdS significant XRD peaks (002) correspond to $2(\theta)$ angle 29.18° and 26.53° , respectively. The lattice characteristics of CdS are well-matched with the conventional JCPD (card no. 41–1049) [28]. Additionally, the structure parameter verified that the CdS film is polycrystalline in nature which is explained in Table 1. Crystallite size, D (nm), was calculated using Scherrer's equation, $D = \lambda K / \beta \cos \theta$ [29, 30], where K is 0.94 (Scherrer's constant), λ is 0.15406 nm (wavelength of the X-ray source), β is the full width at half maximum (FWHM), and θ is the Bragg angle or peak location in radians. Dislocation density (δ) and lattice micro strain (ϵ) were calculated using the equation $\delta = 1/D^2$ and $\epsilon = \beta / 4 \tan \theta$, respectively [31 – 33]. These findings are consistent with the previously published research [34] and with the EDS analysis displayed in Fig. 5b that shows no impurity peaks except in a small carbon (C) peak generated by traces of organic chemicals such as EG or CO₂ taken from the surroundings [35, 36]. Additionally, the absorbance spectra of the deposited film were measured over wavelength ranging from 350 nm to 800 nm using the scanning spectrophotometer. An incident light intensity of 100 mW/cm^2 was established for the measurement by using a xenon lamp with appropriate filters that

offer a good overlap with the standard AM1.5G. The measured absorbance (Fig. 5c) is plotted as a function of the wavelength. For CdS, a high absorbance is obtained below 500 nm and a low absorbance is found at 550 nm. Figure 5d displays an amplification of the deposited CdS film surface. From this figure, a homogeneous deposition is observed without micro cavities and cracks that ensure no leaks during the deposition of the subsequent film; additionally, the grain shape and grain boundaries of the deposited film are noted.

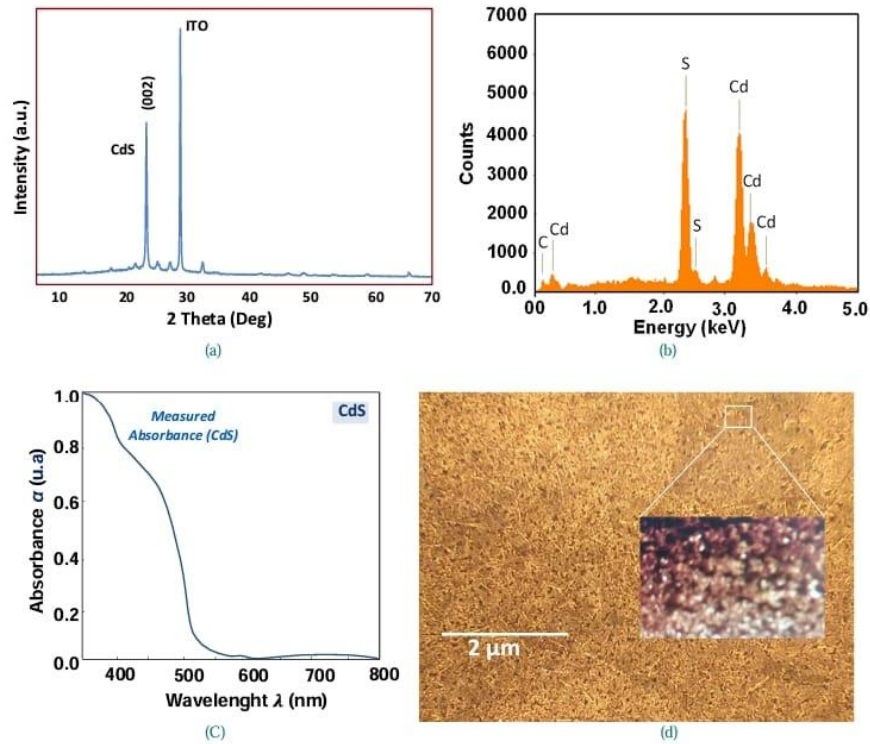


Figure 5. ITO/CdS layer characterization results: (a) XRD patterns; (b) EDS patterns; (c) absorbance vs. wavelength; (d) amplification of the deposited CdS film surface.

Table 1. CdS, CdTe, HgCdTe, and Ag structure parameters (Crystalline size, dislocation density, and lattice micro strain)

Material	2 θ (degree)	(hkl)	FWHM ($^{\circ}$)	D (nm)	δ (nm^{-2})	ϵ (nm^{-2})
CdS	26.53	002	0.204	41.77	5.73×10^{-4}	3.77×10^{-3}
CdTe	22.30	100	0.165	51.23	3.81×10^{-4}	3.65×10^{-3}
Hg _{0.1} Cd _{0.9} Te	30.00	111	0.107	80.24	1.55×10^{-4}	1.74×10^{-3}
Ag	38.00	111	0.197	44.52	5.04×10^{-4}	2.50×10^{-3}

Figure 6a shows the XRD pattern for the deposited CdTe suggesting WZ phase. The intensity of the diffraction peaks at 22.30° (100) and 46.38° (110) are attributed to the dependence of the Te/Cd ratio during the electrodeposition process [37, 38]. Table 1 displays the structural characteristic of the CdTe film, which confirms polycrystalline nature. Figure 6b displays an EDS image of the deposited CdTe film. This image, similar to CdS, shows no impurity peaks except in a small carbon (C) peak generated by traces of organic chemicals such as EG or CO_2 taken from the surroundings. Figure 6c shows the light absorbance of the electrodeposited CdTe which decays quickly than those of CdS for wavelengths less than 500 nm, and the PL is centered around 780 nm. Figure 6d displays an amplification of the deposited CdTe film surface. From this figure, and similar to the CdS film, a uniform deposition is seen without micro cavities and cracks that ensure no leaks during the deposition of the subsequent film. Furthermore, the grain shape and grain boundaries of the deposited film are noted. Figure 6e displayed the measured XRD spectra of the $\text{Hg}_{0.1}\text{Cd}_{0.9}\text{Te}$ film as deposited over ITO/CdS/CTe substrate. Since the binary compounds CdTe and HgTe possess cubic structure with almost identical lattice constants ($a_{\text{CdTe}} = 0.6478$ nm and $a_{\text{HgTe}} = 0.6465$ nm), hence the diffraction peaks of the ternary CdHgTe are expected to exhibit some similarities. The reflection peaks near $2\theta = 30.00^\circ$ (111), 50.00° (220), and 59.50° (311) planes are attributed to the CdTe/HgTe collectively, and the corresponding peak at $2\theta = 94.00^\circ$ is credited to the (422) planes of HgTe [39]. In Fig. 6f, an EDS image of the deposited CdHgTe layer indicating the Hg, Te, and Cd presence in the deposited film is seen. Figure 6g displays the light absorbance of the electrodeposited $\text{Hg}_{0.1}\text{Cd}_{0.9}\text{Te}$ which has a maximum absorbance around the 957 nm that agrees with λ_{eff} determined in Subsection 2. After the position of its maximum, the absorbance decays faster and a new peak arises at about 1300 nm that is linked to the HgTe combination. Figure 6h displays a uniform deposition without micro cavities and cracks ensuring no leaks in the deposition of the subsequent film. Additionally, the grain shape and grain boundaries of the deposited film are noted, and crystallinity parameter is summarized in Table 1.

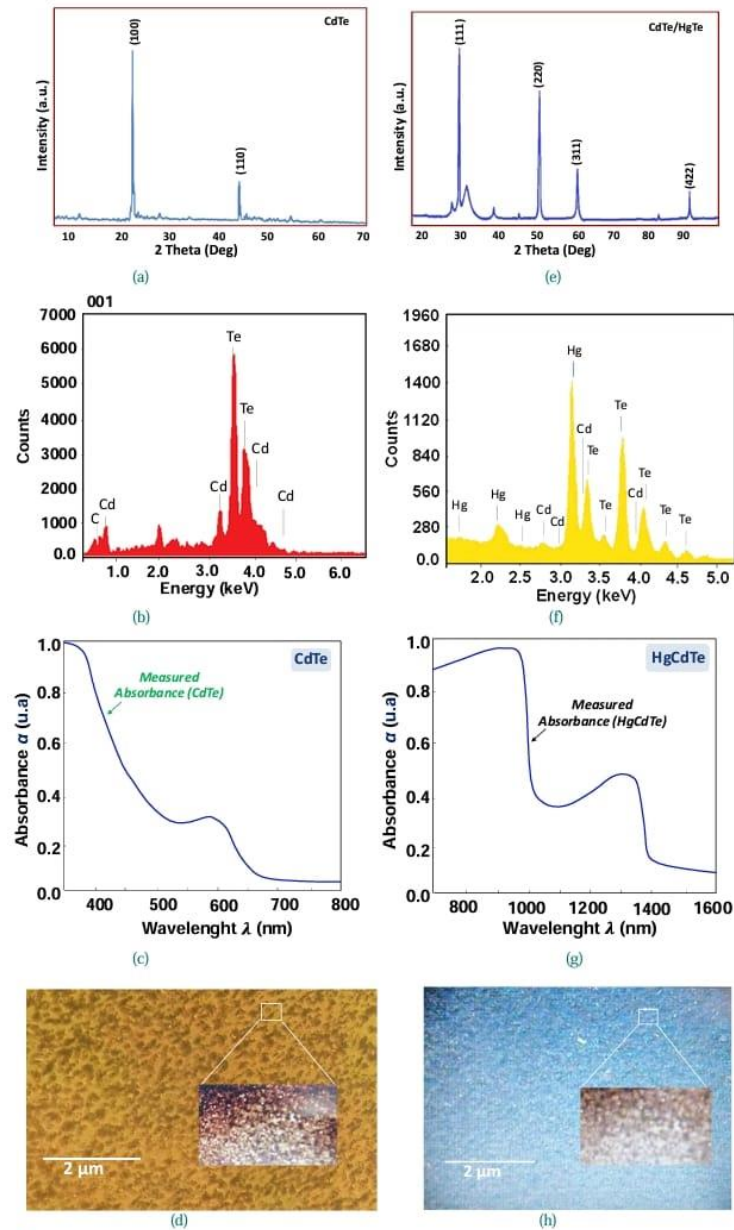


Figure 6. CdTe and HgCdTe layer characterization results: (a) CdTe XDR patterns; (b) CdTe EDS patterns; (c) CdTe absorbance vs. wavelength; (d) amplification of the deposited CdTe film surface; (e) HgCdTe XDR patterns; (f) HgCdTe EDS patterns; (g) HgCdTe absorbance vs. wavelength; (h) amplification of the deposited CdTe film surface.

Figure 7a displays the XRD patterns of the deposited Ag film. The intensity of the diffraction peaks at both 38.00° (111) and 44.00° (200) exhibits face-centered cubic structure that is well-matched with the standard JCPDS (card no. 65–2871) [40]. EDS analysis of the deposited Ag film is in Fig. 7b that displays no impurity peaks except in agreement with previously published findings [41]. Figure 6g depicts the light absorbance of the electrodeposited HgCdTe which decays quickly between 300 and 400 nm. Figure 6h displays a uniform deposition without micro cavities and cracks ensuring no leaks in the deposition of the subsequent film. Additionally, the grain shape and grain boundaries of the deposited film are noted, and crystallinity parameter is summarized in Table 1.

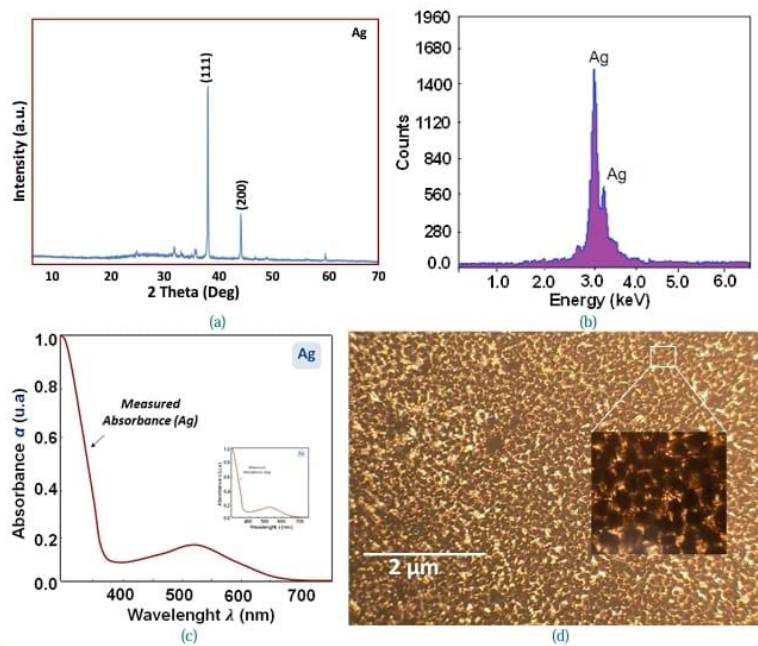


Figure 7. Ag layer characterization results: (a) Ag XRD patterns; (b) Ag absorbance vs. wavelength; (c) Ag EDS patterns; (d) amplification of the deposited Ag film surface

Figure 8a displays the spectral detectivity (D^*) and responsivity (R) for backside-illuminated devices achieved through hyperhemispherical immersion at reverse bias voltages and 300 K. Solid and dotted lines refer to measurements of D^* and R , respectively. Maximum detectivity (D^*_{max}) was found at peak $1.28 \mu\text{m}$ and $2.31 \mu\text{m}$ of 2.86 and $2.80 \times 10^{12} \text{ cmHz}^{1/2}/\text{W}$, respectively. From Fig. 8a, it is observed D^* spectrum stays nearly constant across a wide range of wavelengths, making the electrodeposited photodetector a solid option for mid-wavelength infrared detection.

The maximal responsivity (R_{max}) was obtained at peak 3.8 μm , indicating a mid-wavelength infrared detection.

Using a light source of a wavelength range between 350 and 1700 nm obtained from a 1000 W/m^2 xenon lamp and a Keithley meter system, the fabricated glass/CdS/CdTe/ $\text{Hg}_{0.1}\text{Cd}_{0.9}\text{Te}$ /CdTe/Ag photodiode was characterized (at zero-bias). Figure 8b displays the produced J - V transfer curve. Findings indicate that the produced photodiode operates in photovoltaic mode without an external power supply. This operation mode shows promise for wireless and autonomous PD applications. The obtained open circuit voltage (V_{oc}) is 0.91 V with short circuit current density (J_{sc}) of 27.3 mA/cm^2 which gives a power conversion efficiency (η) of 12.57% with a fill factor of 60.57%. The obtained characterization parameters are attributed to the good crystallinity of the electrodeposited materials and the good acquired film interface matching. A good crystallinity of materials minimizes losses in material interfaces and boosts light absorption and photocurrent generation.

The bandgap (E_g) of the CdTe/ $\text{Hg}_{0.1}\text{Cd}_{0.9}\text{Te}$ /CdTe QW was determined by using the Tauc plot of Fig. 8b and the equation $\alpha = (K/h\nu)[h\nu - E_g]^n$. Here, α is the absorption coefficient, K is a constant, $h\nu$ is the photon energy, E_g is the bandgap, and n is a constant (n equals $\frac{1}{2}$ or 2 for a direct or indirect semiconductor, respectively). In the Tauc plot, the QW arrangement has an absorption linear slope at around 1.36 eV that is the effective bandgap of the $\text{Hg}_{0.1}\text{Cd}_{0.9}\text{Te}$ and has a second absorption linear slope at around 1.58 eV that is the bandgap of CdTe. Hence, the produced photodetector has potential for photodetection in the mid-wavelength infrared ranges. Furthermore, the manufactured photodetector is appealing due to its inexpensive construction. The utilized electrodeposition procedures function at a modest temperature, without the need of high temperature and vacuum-based fabrication steps required by conventional photodetector manufacturing processes.

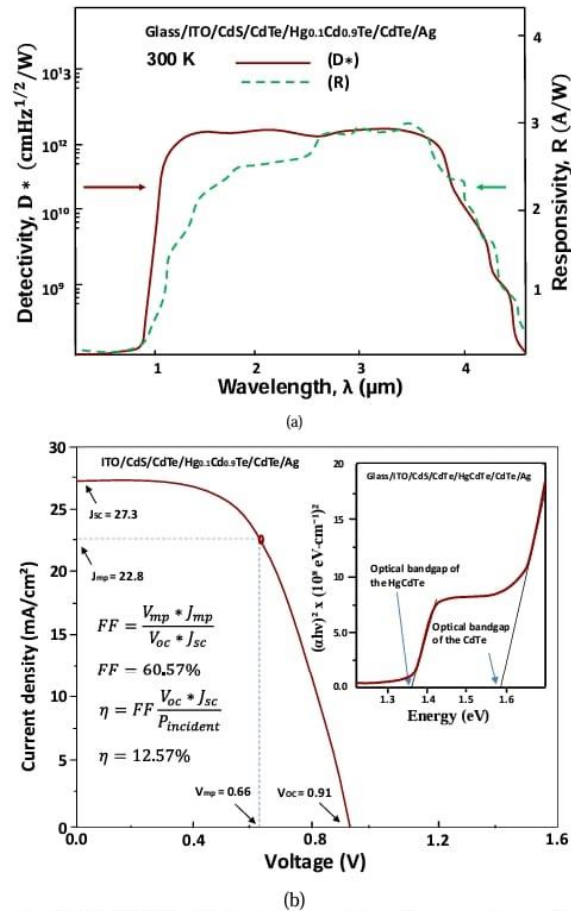


Figure 8. Characteristics of the ITO/CdS/CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe/Ag photodiode: (a) spectral detectivity (D^*) and responsivity (R) for backside-illuminated devices achieved through hyperhemispherical immersion at reverse bias voltages and 300 K; (b) J - V transfer curve.

Device performance including type of heterojunction, fabrication method, and detection range of the manufactured photodiode and other previously published HgCdTe based photodiodes are summarized in Table 2. The previously published HgCdTe photodiodes are made using various methods (MBE, LPE, and MOCVD) with varied architectures (pn, pin, APD) and are employed from 0.8 to 5 μm (SWIR, MWIR, and part of LWIR) region of the spectrum. The frequently reported performance metrics include gain, GBW, impulse response time, dark current, avalanche gain, etc. Worthy of note are the reported detectivity (D^*) and J_{dark} range from 2.0×10^{14} to $9.83 \times 10^{11} \text{ cmHz}^{1/2}\text{W}^{-1}$ and $4.0 \times 10^{-9} \text{ A}/\text{cm}^2$ to $1.06 \times 10^{-3} \text{ A}/\text{cm}^2$ respectively, while the greatest D^* and dark density current (J_{dark}) achieved in this work are $-2.86 \times 10^{12} \text{ cmHz}^{1/2}\text{W}^{-1}$ and 1.1×10^{-6}

A/cm^3 , respectively. Accordingly, the produced photodiode achieved a $\eta > 12$ with a balance in all performance parameters. Furthermore, the synthesized HgCdTe based photodiode exhibits photovoltaic performance since it produces V_{oc} and I_{sc} in contrast to other documented photodiodes. The demonstrated photovoltaic performance of the electrodeposited CdS/CdTe/Hg_{0.1}Cd_{0.9}Te/CdTe structure is attributed to the self-powered performance due to the passivation of the thin CdHg_{0.4}Te_{0.6} layer in the implemented heterostructure.

Table 2. Summary of characteristic performance of the HgCdTe fabricated photodiode and other HgCdTe based photodiodes reported previously.

Heterojunction	Fabrication technique	Detection range (μm)	Reported performance	Ref.
Hg _{1-x} Cd _x Te	MBE	0.9–4.3	Photon detection efficiency > 70% Dark count rate of <250 Hz at 110K	[6]
HgCdTe/CdZnTe	LPE	0.8–5.0	g factor 5.7018 $D_{\text{max}} = 2 \times 10^{14} \text{ cm Hz}^{1/2} \text{ W}^{-1}$ at the bias voltage -7.1 V	[7]
HgCdTe/CdZnTe	LPE	0.9–4.3	High dynamic resistance times active area (ROA) product $2 \times 10^6 \Omega\text{-cm}^2$, $J_{\text{dark}} = 4 \text{ nA}/\text{cm}^2$ Gain > 5500 at -8 V and 80 K.	[10]
HgCdTe/CdTe	LPE	0.4–4.5	Gain of ~ 6100 (reverse bias of 14.9 V at 1.55 μm illumination) Factor of 4 reduction in the ROIC glow-induced dark counts. Photoelectron jitter > 1.5 ns	[14]
HgCdTe/CdTe	MOCVD	0.9–8.0	$J_{\text{dark}} = 1.06 \times 10^{-3} \text{ A}/\text{cm}^2$ $D_{\text{max}} = 9.83 \times 10^{11} \text{ cm Hz}^{1/2} \text{ W}^{-1}$	[15]
HgCdTe	LPE/MBE	0.9–6.0	$J_{\text{dark}} = 1 \times 10^{-4} \text{ A}/\text{cm}^2$, EQE = 74%	[41]
CdHgTe/CdTe	Electrodeposition	0.9–5.0	$J_{\text{dark}} = 1.1 \times 10^{-6} \text{ A}/\text{cm}^2$ $D_{\text{max}} = 2.86 \times 10^{12} \text{ cm Hz}^{1/2} \text{ W}^{-1}$ $V_{oc} = 0.91 \text{ V}$ $J_{sc} = 27.3 \text{ mA}/\text{cm}^2$	This work

6 Conclusion

In this study, a progressive electrodeposition of CdS, CdTe, HgCdTe, CdTe, and Ag films on ITO coated soda–lime glass was performed. One distinctive feature of the applied electrodeposition method is the application of a nonaqueous solution containing EG as a supplementary electrolyte for every film deposition step. Utilizing the same nonaqueous solutions and EG as supporting electrolyte reduces environmental incompatibility and degradation in layer-to-layer adhesion and lessens the hydrophobicity of CCs' semiconducting materials. All deposition films exhibited uniformity and adhesion achieved through precise control of the electrolyte temperature which shows to be one of the most important factors influencing the growth process. For CdS deposition, a working time of 35 minutes with a constant current density of $15 \text{ mA}/\text{cm}^2$ at a temperature of 140°C was found to produce ideal conditions. However, in the CdTe and HgCdTe deposit, 20

minutes of processing at a steady current of 2.5 mA/cm² at a temperature of 90°C were sufficient. To deposit the HgCdTe, a 1.99×10^{-4} M of HgCl₂ is added to the electrolyte solution compared with the electrolyte preparation to deposit CdTe. Furthermore, for the Ag film deposition, high temperature was not required. 40°C in the electrolyte preparation was adequate to guarantee the solubility of the reagents in the EG. However, it was crucial to maintain a steady potential difference of 3V between the electrodes.

Acknowledgment

The Authors are grateful to the National Council for Science and Technology of Mexico (CONACYT) for supporting a scholarship for doctoral studies of Vianey Aracely Candelas Urrea.

References

- [1] Y. Qiao, S. Li, W. Liu, M. Ran, H. Lu, and Y. Yang, "Recent Advances of Rare-Earth Ion Doped Luminescent Nanomaterials in Perovskite Solar Cells," *Nanomaterials*, **8**(1), 43 (2018). [doi:10.103390/nano8010043]
- [2] W. W. Yu, L. Qu, W. Guo, and X. Peng, "Experimental determination of the extinction coefficient of CdTe, CdSe, and CdS NCs," *Chem. Mater.*, **15**(14), 2854–2860 (2003). [doi: 10.1021/cm034081k]
- [3] L. Zhu, C. Li, Y. Li, C. Feng, F. Li, D. Zhang, Z. Chen, S. Wen, and S. Ruan, "Visible-light photodetector with enhanced performance based on a ZnO@ CdS heterostructure," *J. Mater. Chem. C*, **3**(10), 2231–2236 (2015). [doi:10.1039/C4TC02890B]
- [4] Y. Zhang, L. W. Wang, and A. Mascarenhas, "Quantum coaxial cables for solar energy harvesting," *Nano Lett.* **7**(5), 1264–1269 (2007). [doi:10.1021/nl070174f]
- [5] Y. Heng, L. Jingobo, A. L. Richard, W. Lin-Wang, and E.B. William, "Two-versus three-dimensional quantum confinement in indium phosphide wires and dots," *Nat. Mater.* **2**(8), 517–520 (2003). [doi:10.1038/nmat942]
- [6] Xiaoli Sun, James B. Abshire, Michael A. Krainak, Wei Lu, Jeff D. Beck, William W. Sullivan III, Pradip Mitra, Dick M. Rawlings, Renny A. Fields, David A. Hinkley, Bradley S. Hirasuna, "HgCdTe avalanche photodiode array detectors with single photon sensitivity and integrated detector cooler assemblies for space lidar applications," *Opt. Eng.* **58**(6), 067103 (2019). [doi: 10.1117/1.OE.58.6.067103]
- [7] Jin Chen, Jian Chen, Xin Li, Jiale He, Liao Yang, Jian Wang, Feilong Yu1, Zengyue Zhao, Chuan Shen, Huijun Guo, Guanhai Li, Xiaoshuang Chen, and Wei Lu, "High-performance HgCdTe avalanche photodetector enabled with suppression of band-to-band tunneling effect in midwavelength infrared," *npj Quantum Materials*, **6**(103), 00409-3 (2021). [doi:10.1038/s41535-021-00409-3]
- [8] Carlos Villa-Angulo, "CdSe_{0.4}Te_{0.6} Quantum Well-Based Photodetector Toward Imaging Vision Sensors," *Sensors Journal*, **20**(22), 13357-13363 (2020). [doi:10.1109/JSEN.2020.3006219]
- [9] Anand Singh, Vanya Srivastav, Ravinder Pal, "HgCdTe avalanche photodiodes: A review," *Optics & Laser Technology*, **43**(7), 1358-1370 (2011). [doi:10.1016/j.optlastec.2011.03.009]
- [10] Anand Singh, A. K. Shukla and Ravinder Pal, "HgCdTe e-avalanche photodiode detector array," *AIP Advances*, **5**, 087172 (2015). [doi:10.1063/1.4929773]

- [11] Kumar, V., Pal, R., Chaudhury, P.K. et al. "A CdTe passivation process for long wavelength infrared HgCdTe photo-detectors," *J. Electron. Mater.* **34**, 1225–1229 (2005). [[doi:10.1007/s11664-005-0267-2](https://doi.org/10.1007/s11664-005-0267-2)]
- [12] Dinand, S., Gravrand, O., Baier, N. et al. "Dark Current Evolution in Irradiated MWIR HgCdTe Photodiodes," *J. Electron. Mater.*, **52**, 7103–7113 (2023). [[doi:10.1007/s11664-023-10701-6](https://doi.org/10.1007/s11664-023-10701-6)]
- [13] Dekang Chen, Stephen D. March, Andrew H. Jones, Yang Shen, Adam A. Dadey, Keye Sun, J. Andrew McArthur, Alec M. Skipper, Xingjun Xue, Bingtian Guo, Junwu Bai, Seth R. Bank, and Joe C. Campbell, "Photon-trapping-enhanced avalanche photodiodes for mid-infrared applications," *Nature Photonics*, **17**, 594–600 (2023). [[doi:10.1038/s41566-023-01208-x](https://doi.org/10.1038/s41566-023-01208-x)]
- [14] P. Duke Anderson, Jeffrey D. Beck, William Sullivan III, Christopher Schaake, James McCurdy, Mark Skokan, Pradip Mitra, Xiaoli Sun, "Recent Advancements in HgCdTe APDs for Space Applications," *Journal of Electronic Materials*, **51**, 6803–6814 (2022). [[doi:10.1007/s11664-022-09873-4](https://doi.org/10.1007/s11664-022-09873-4)]
- [15] Klaudia Hackiewicz, Małgorzata Kopytko, Waldemar Gawron, "MOCVD-grown HgCdTe photodiodes optimized for HOT conditions and a wide IR range" *Sensors and Actuators A: Physical*, **309**, 112008 (2020). [[doi:10.1016/j.sna.2020.112008](https://doi.org/10.1016/j.sna.2020.112008)]
- [16] G. Qin G., Kong J. C., Yang J., Ren Y., Li Y. H., Yang C. Z., Li H. F., Wang J. Y., Yu J. Y., Qin Q., Zhao J. and Zhao P., "HgCdTe Films Grown by MBE on CZT(211)B Substrates," *Journal of Electronic Materials*, **52**, 2441–2448 (2023). [[doi:10.1007/s11664-022-10193-w](https://doi.org/10.1007/s11664-022-10193-w)]
- [17] Liubing Huang, Jia Grace Lu, "Synthesis, Characterizations and Applications of Cadmium Chalcogenide Nanowires: A Review," *Journal of Materials Science & Technology*, **31**(6), 556-572 (2015). [[doi:10.1016/j.jmst.2014.12.005](https://doi.org/10.1016/j.jmst.2014.12.005)]
- [18] Carlos Villa-Angulo, "Self-powered cadmium chalcogenide photodetectors by pressurized air blast spraying," *OSA, Optical Materials Express*, Vol. 11, No. 4, pp. 1104 - 1118, April. (2021). [[doi: 10.1364/OME.418301](https://doi.org/10.1364/OME.418301)]
- [19] Bulent M. Basol, "Electrodeposited CdTe and HgCdTe solar cells," *Solar Cells*, **23**(1–2), 69-88 (1988). [[doi:10.1016/0379-6787\(88\)90008-7](https://doi.org/10.1016/0379-6787(88)90008-7)]
- [20] Nair, J. P., Chaure, N. B., Jayakrishnan, R. et al. "Non-aqueous electrodeposited CdHgTe films for solar cell application," *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, **12**, 377–385 (2001). [[doi:10.1023/A:1011226529977](https://doi.org/10.1023/A:1011226529977)]
- [21] Jaya P. N., Jayakrishnan R., Nandu B. C., Gohkale S., Lobo A., Kulkarni S. K., Pandey R. K., "Deposition and characterization of Cd_xHg_{1-x} films electroplated from a nonaqueous bath," *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **60**(10), 1693-1703 (1999). [[doi:10.1016/S0022-3697\(99\)00030-X](https://doi.org/10.1016/S0022-3697(99)00030-X)]
- [22] N. Romeo, A. Bosio, V. Canevari, and A. Podesta, "Recent progress on CdTe/CdS thin film solar cells," *Sol. Energy*, **77**(6), pp. 795–801, Dec. (2004). [[doi:10.1016/j.solener.2004.07.011](https://doi.org/10.1016/j.solener.2004.07.011)]
- [23] H. A. Mohamed, "Dependence of efficiency of thin-film CdS/CdTe solar cell on optical and recombination losses," *J. Appl. Phys.*, **113**(1), p. 093105, Feb. (2013). [[doi:10.1016/j.tsf.2008.11.0129](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2008.11.0129)]
- [24] A. Y. Jaber, S. N. Alamri, and M. S. Aida, "CdS thin films growth by ammonia free chemical bath deposition technique," *Thin Solid Films*, **520**(9), pp. 3485–3489, Feb. (2012). [[doi:10.1016/j.tsf.2011.12.061](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2011.12.061)]
- [25] X. Wu, "High-efficiency polycrystalline CdTe thin-film solar cells," *Sol. Energy*, vol. **77**(6), pp. 803–814, Dec. (2004). [[doi:10.1016/j.solener.2004.06.006](https://doi.org/10.1016/j.solener.2004.06.006)]

- [26] J. R. Villa-Angulo, R. Villa-Angulo, and C. Villa-Angulo, "Photon absorption coefficient (α) for a low-dimensional CdS/CdTe absorber by a partial k-selection approach," *J. Nanophotonics* 7(1), 073099 (2013). [[doi:10.1117/1.JNP.7.073099](https://doi.org/10.1117/1.JNP.7.073099)]
- [27] J. R. Villa-Angulo, R. Villa-Angulo, K. Solorio-Ferrales, S. E. Ahumada-Valdez, and C. Villa-Angulo, "Effect of effective mass mismatch in CdS/CdTe heterojunctions on the fundamental design parameters of nanophotonic devices," *J. Nanophotonics* 8(1), 083096 (2014). [[doi:10.1117/1.JNP.8.083096](https://doi.org/10.1117/1.JNP.8.083096)]
- [28] Gates-Rector S, Blanton T. The Powder Diffraction File: a quality materials characterization database. *Powder Diffraction*. 2019;34(4):352-360. [[doi:10.1017/S0885715619000812](https://doi.org/10.1017/S0885715619000812)]
- [29] Ullah, S., Mollar, M. & Mari, B., "Electrodeposition of CuGaSe₂ and CuGaS₂ thin films for photovoltaic applications," *J Solid State Electrochem*, **20**, 2251–2257 (2016). [[doi:10.1007/s10008-016-3237-0](https://doi.org/10.1007/s10008-016-3237-0)]
- [30] Bouich, A., Hartiti, B., Ullah, S. *et al.* "Optoelectronic characterization of CuInGa(S)₂ thin films grown by spray pyrolysis for photovoltaic application," *Appl. Phys. A*, **125**, 579 (2019). [[doi:10.1007/s00339-019-2874-4](https://doi.org/10.1007/s00339-019-2874-4)]
- [31] Rasool S. *et al.*, "Annealing and plasma treatment effect on structural, morphological and topographical properties of evaporated β -In₂S₃ films," *Mater. Res. Express*, **7**, 016431 (2020). [[doi:10.1088/2053-1591/ab6a5b](https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab6a5b)]
- [32] Bouich, A., Ullah, S., Ullah, H. *et al.* "Deposit on different back contacts: to high-quality CuInGaS₂ thin films for photovoltaic application," *J Mater Sci: Mater Electron*, **30**, 20832–20839 (2019). [[doi:10.1007/s10854-019-02450-2](https://doi.org/10.1007/s10854-019-02450-2)]
- [33] Purohit *et al.*, "Effect of air annealing on structural, optical, morphological and electrical properties of thermally evaporated CdSe thin films," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **69**, 342-348 (2015). [[doi:10.1016/j.physe.2015.01](https://doi.org/10.1016/j.physe.2015.01)]
- [34] Thutiyaporn, T., Onlaor, K., Tunhoo, B., "A humidity sensor based on silver nanoparticles thin film prepared by electrostatic spray deposition process." *Advances in Materials Science and Engineering*, 2013, 640428 (2013). [[doi:10.1155/2013/640428](https://doi.org/10.1155/2013/640428)]
- [35] Q. Jijun, J. Zhengguo, W. Weibing, L. Xiaoxin, C. Zhijie, "Effect of annealing on structural, optical and electrical properties of CdS thin films grown by ILGAR," *Journal of Wuhan University of Technology-Mater*, **21**(1), 88–91 (2006) [[doi:10.1007/bf0286147910](https://doi.org/10.1007/bf0286147910)].
- [36] H. Sekhar, S. and Rao DN, "Stokes and Anti-Stokes Luminescence in Heat-Treated CdS Nanopowders," *The Journal of Physical Chemistry*, **117**(5): 2300–2307 (2013) [[doi:10.1021/jp3074943](https://doi.org/10.1021/jp3074943)].
- [37] Moure-Flores F.D. *et al.*, "Hexagonal CdTe films with Te excess grown at room temperature by laser ablation," *Mater. Lett.*, **92**, 94-95 (2013). [[doi:10.1016/j.matlet.2012.10.056](https://doi.org/10.1016/j.matlet.2012.10.056)] [[10.1016/j.matlet.2012.10.056](https://doi.org/10.1016/j.matlet.2012.10.056)]
- [38] Arizpe-Chávez H. *et al.*, "Cubic to hexagonal phase transition in CdTe polycrystalline films by oxygen incorporation", *Solid State Communications*, 101(1), 39-43 (1997). [[doi:10.1016/S0038-1098\(96\)00554-6](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(96)00554-6)]
- [39] JCPDS 1989 Powder Diffraction File Inorganic phase, (International Center for Diffraction data, Swarthmore, PA, 1989).
- [40] Nair, J.P., Chaur, N.B., Jayakrishnan, R. *et al.*, "Non-aqueous electrodeposited CdHgTe films for solar cell application," *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, **12**, 377–385 (2001). [[doi:10.1023/A:1011226529977](https://doi.org/10.1023/A:1011226529977)]

- [41] Gravrand, O., Rothman, J., Cervera, C. *et al.* "HgCdTe Detectors for Space and Science Imaging: General Issues and Latest Achievements," *J. Electron. Mater.*, **45**, 4532–4541 (2016). [[doi:10.1007/s11664-016-4516-3](https://doi.org/10.1007/s11664-016-4516-3)]