



UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS

**Instituto de Investigación e Innovación en
Energías Renovables.**

TESIS

**“Estudio de la hetero-estructura CdS/InGaN y
depósito de CdS sobre diferentes sustratos, para
aplicación a celdas solares”**

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

**MAESTRO EN MATERIALES Y SISTEMAS
ENERGÉTICOS RENOVABLES**

PRESENTA

Ing. José Alfredo Santis Espinosa

DIRECTOR

DR. Heber Vilchis Bravo

CODIRECTOR

DR. Joel Pantoja Enríquez

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, Enero de 2018.



UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS
Dirección de Investigación y Posgrado



investigación
y posgrado

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas
23 de enero de 2018
Oficio No. DIP- 078/2018

C. José Alfredo Santis Espinosa
Candidato al Grado de Maestro en Materiales
y Sistemas Energéticos Renovables
Presente.

En virtud de que se me ha hecho llegar por escrito la opinión favorable de la Comisión Revisora que analizó su trabajo terminal denominado “ **Estudio de la hetero-estructura CdS/InGaN y depósito de CdS sobre diferentes sustratos, para aplicación a celdas solares**”. y que dicho trabajo cumple con los criterios metodológicos y de contenido, esta Dirección a mi cargo le **autoriza la impresión** del documento mencionado, para la defensa oral del mismo, en el examen que usted sustentará para obtener el Grado de Maestro en Materiales y Sistemas Energéticos Renovables. Se le pide observar las características normativas que debe tener el documento impreso y entregar en esta Dirección un tanto empastado del mismo.

Atentamente

“Por la Cultura de mi Raza”

Dra. Magnolia Solís López
Directora.



**DIRECCION DE INVESTIGACION
Y POSGRADO**

C.c.p. Expediente

Unidad de Estudios de Posgrado
Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, México
Libramiento Norte Poniente No 1150. C.P. 29000
Teléfono: 61-70440 Ext.4360.
investigacionyposgrado@unicach.mx

Dedicatorias

A mis padres Alejandro Espinosa Pérez, María Velasco Alvares y Virginia Espinosa Velasco que fueron y serán siempre parte esencial de mi formación.

A Dios por prestarme la vida y en la memoria de mi padre Fernando Santis Bautista.

A mis hermanos por compartir alegrías y tropiezos de los cuales salimos triunfadores, por su confianza, los quiero a todos, Luis Fernando, Bertha Alicia y Ana María que siempre los tengo presente en cada logro de mi vida.

A mi amor Jane por el apoyo brindado durante la realización de este trabajo.

Agradecimientos

Agradezco al CONACYT por el financiamiento brindado durante la realización de este proyecto.

A la Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas por permitirme cursar este posgrado en sus instalaciones.

Al Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables y a los profesores investigadores, agradecimiento especial a Rosi la mejor secretaria del CIDTER y la universidad.

A mis compañeros y amigos de generación: Cristian, Jairo, Vicente, Juan Carlos, Edwin, Francisco, Wilber, Abram y Josep, por su valiosa amistad y apoyo en diversas actividades.

A Janeth León por su amor y motivación para continuar.

A la maestra Andrea Guadalupe Flota Robledo por su apoyo y brindarme sus conocimientos en el procesos de depósito por baño químico de películas de CdS.

Al Dr. Víctor Manuel Sánchez Reséndiz del Cinvestav por aceptarme en la estancia, fue punto clave para realizar las caracterizaciones de películas de CdS, así como los técnicos de la sección de electrónica del estado sólido del Cinvestav-IPN.

Al Dr. José Francisco Pola Albores por brindarme sus conocimientos en difracción de rayos X, en sus cursos de caracterización, además de sus comentarios y recomendaciones en la revisión del trabajo final.

Al Dr. Joel Pantoja Enríquez por su apoyo absoluto en la realización del trabajo, así como sus comentarios en el trabajo final.

Al Dr. Heber Vilchis Bravo por ser el director de este trabajo, le agradezco sus comentarios, apoyo académico y revisiones del trabajo durante la maestría.

A los técnicos del Instituto de energía Renovables del departamento de fotovoltaica por su apoyo para poder depositar películas de sulfuro de cadmio y sus caracterizaciones.

A todas las personas que me brindaron su apoyo en las diferentes actividades que realice para llegar al objetivo del trabajo.

Indicé

Nomenclatura y acrónimos.....	viii
Resumen.....	ix
Abstract.....	xi
Introducción.....	1
Planteamiento del problema.....	2
Objetivo general.	3
Objetivos específicos.....	3
Justificación	4
Capítulo 1. Antecedentes.....	6
1.1. Propiedades y características del sulfuro de cadmio (CdS).	6
1.2. Depósito de película delgada de CdS.....	9
1.3. Celdas solares basada en CdS.....	11
1.4. Propiedades y características de InGaN.....	12
1.5. Síntesis de películas delgadas de InGaN.	15
1.6. Simulación de celdas solares de InGaN.	16
Referencias.....	18
Capítulo 2. Marco teórico	22
2.1. Principio de funcionamiento de una celda solar.	22
2.2. Estructuras típicas de celdas solares.....	26
2.2.1. Las celdas solares de unión p-n.....	26
2.3. Características eléctricas.....	29
2.3.1. La celda solar ideal.....	29
2.4. Simulación numérica de celdas solares.	33
2.4.1. Procesos de absorción.....	33
2.4.2. Ecuación de Poisson.	37
2.4.3. Las poblaciones de estados deslocalizados (banda) n y p.....	39
2.4.4. Ecuación de continuidad.	40
2.5. Densidad de corriente de electrones y huecos.....	41
2.6. Mecanismos de recombinación.....	42
2.6.2. Recombinación directa (banda a banda).....	43
2.6.3. Recombinación Shockley-Read-Hall (S-R-H).....	44

2.6.4. Recombinación Auger.....	46
2.7. Transporte.....	49
2.7.1. Mecanismos de transporte de masa en sólidos.....	49
2.7.2. Transporte de masa en las bandas de conducción y de valencia.....	49
2.7.3. Procesos de transporte en interfase.....	55
2.9. Condiciones de frontera.....	59
2.10. Depósito de películas delgadas por baño químico (DBQ).....	60
Referencias.....	62
Capítulo 3. Metodología.....	64
3.1. Simulación.....	65
3.1.1. Cálculo de parámetros para la simulación.....	66
3.2. Depósito de película delgada de CdS mediante depósito de baño químico (DBQ).....	68
3.2.1. Depósito por baño químico.....	69
3.2.2. Limpieza de sustratos.....	69
3.2.3. Preparación de las soluciones.....	69
3.2.4. Proceso del depósito.....	70
3.3. Técnicas de caracterización.....	71
3.3.1. Difracción de rayos X (DRX).....	71
3.3.2. Caracterización óptica.....	73
3.3.3. Elipsometría.....	74
3.3.4. Caracterización morfológica mediante AFM.....	75
3.3.5. Espectroscopía Raman.....	76
3.3.6. Fotoluminiscencia.....	77
Referencias.....	79
Capítulo 4. Resultados.....	80
4.1. Simulación.....	80
4.1.1. Hetero-estructura CdS/InGaN con interfaz.....	84
4.1.2. Homo-estructura n-InGaN/p-InGaN.....	86
4.1.3. Hetero-estructura CdS/InGaN sin interfaz.....	87
4.1.4. Estudio de variación de parámetros de CdS.....	90
4.2. Resultados experimentales.....	96
4.2.1. Depósito por Baño Químico de sulfuro de cadmio (CdS).....	96

4.2.2. Difracción de rayos X.....	97
4.2.3. Espectroscopía Raman.....	103
4.2.5. Elipsometría.....	107
4.2.6. Fotoluminiscencia.....	109
4.2.7. Caracterización morfológica por Microscopio de Fuerza Atómica (AFM).	111
4.3. Conclusiones.....	116
Trabajos futuros	118
Referencias.....	120

Nomenclatura y acrónimos

Símbolo-abreviatura	Descripción	Símbolo-abreviatura	Descripción
CS	Celda solar	μ_n	Movilidad de electrones
DBQ	Depósito por baño químico	μ_p	Movilidad de huecos
ET	Equilibrio termodinámico	ξ'_n	Campo de fuerza efectiva de electrones
Eg	Ancho de banda prohibida	ξ'_p	Campo de fuerza efectiva de huecos
In	Indio		
S-R-H	Shockley-Read-Hall	τ_n^A	Tiempo de vida de electrones Auger para material tipo p
α	Coefficiente de absorción	τ_p^A	Tiempo de vida de huecos Auger para material tipo p
ϵ	Permitividad relativa	τ_n^R	Tiempo de vida de recombinaciones radiativas de electrones
D_n	Coefficiente de difusión de electrones o difusividad	τ_p^R	Tiempo de vida de recombinaciones radiativas de huecos
D_p	Coefficiente de difusión de huecos o difusividad	τ_n^L	Tiempo de vida de recombinaciones S-R-H de electrones para material de tipo p
D_E	Coefficiente de difusión de exitones	τ_p^L	Tiempo de vida de recombinaciones S-R-H de huecos para material tipo n
D_n^T	Coefficiente de difusión térmica (Soret) de electrones	τ_n	Tiempo de vida de electrones para material tipo p
D_p^T	Coefficiente de difusión térmica (Soret) de huecos	τ_p	Tiempo de vida de huecos para material tipo n
Ec	Energía en la banda de conducción	σ_n	Sección transversal de un estado localizado para capturar un electrón
Ev	Energía en la banda de valencia	σ_p	Sección transversal de un estado localizado para capturar un hueco
E_F	Energía en el nivel de Fermi	\mathfrak{R}^A	Recombinación Auger
E_{VL}	Nivel de energía en el vacío	\mathfrak{R}^L	Tasa de recombinación neta S-R-H
FF	Factor de forma	\mathfrak{R}^R	Tasa de recombinación neta radiativa
g_{th}^R	Numero de electrones generados térmicamente en la banda de conducción y valencia por tiempo por volumen a las transiciones banda-banda	$R(\lambda)$	Flujo de fotones reflejado
$g(E)$	Densidad de estados en energía por volumen	S_n	Velocidad de recombinación de superficie para electrones
$g_e^c(E)$	Densidad de estados por volumen en la banda de conducción	S_p	Velocidad de recombinación de superficie para huecos
$g_e^v(E)$	Densidad de estados por volumen en la banda de valencia	T_n	Temperatura efectiva de electrones varia espacialmente

N_c	Densidad de estado banda de conducción	T_p	Temperatura efectiva de electrones varia espacialmente
N_v	Densidad de estado banda de valencia		
m_e	Masa efectiva de electrones		
m_h	Masa efectiva de huecos		
χ	Afinidad electrónica	V_n	Diferencia de energía entre en borde de la banda de conducción y el electron del nivel de cuasi-Fermi en un punto x
I_0	Corriente de saturación	V_p	Diferencia entre el hueco del nivel de cuasi-Fermi y el borde de la banda de valencia en un punto x
I_{ph}	Corriente fotogenerada	x	Posición en un dispositivo o capa
V_{oc}	Voltaje de circuito abierto		
η	Eficiencia		
J_{sc}	Densidad de corriente		
Ψ	Nivel de vacío local		
λ	Longitud de onda		
ξ	Fuerza de campo eléctrico		
ξ_0	Campo eléctrico en equilibrio termodinámico		
ρ	Densidad de carga		
e	Carga del electrón		
c	Velocidad de la luz		
h	Constante de Planck		
\hbar	Constante de Planck dividida		
T	Temperatura absoluta		
N_D	Concentración de donores		
N_A	Concentración de aceptores		
$\Phi_0(\lambda)$	Flujo de fotones por banda en función de longitud de onda		
J_{mp}	Densidad de corriente en el punto de máxima potencia		
J_n	Densidad de corriente de electrones		
J_p	Densidad de corriente de huecos		
J_{OB}	Densidad de corriente que pasa por una barrera de energía en una interfaz		
K	Constante de Boltzman		

Resumen

El trabajo aquí descrito presenta los resultados con respecto a las simulaciones eléctricas basadas en celdas solares $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. El estudio teórico se centra en describir el rendimiento de las celdas solares en la homo-unión InGaN considerando las contribuciones experimentales recientes, como el coeficiente de absorción y la concentración de In en capas delgadas. Se utilizó el análisis de simulación de Estructuras Microelectrónicas y Fotónicas (AMPS-1D) y las simulaciones se llevaron a cabo en la región verde en el campo electromagnético. Con el fin de mejorar la eficiencia de los dispositivos, la concentración de In se varió en ambas capas tipo n y p. El mejor resultado se obtuvo con una concentración del 25% de In para la capa de tipo n y del 34% para la capa de tipo p, con 50 nm y 400 nm de espesor respectivamente. En la simulación se predijo una eficiencia en la homo-unión de la celda solar de 7.34% con una densidad de corriente de $8.96 \text{ mA} / \text{cm}^2$. En la configuración de la hetero-estructura n-CdS/p-InGaN con interfaz no se obtuvo la eficiencia esperada ya que la mayor fue de tan solo 2.44%, es por ello que se procedió a realizar la simulación de una sola unión sin interfaz de la hetero-estructura. Con los estudios realizados anteriormente se optimizaron los parámetros primeramente del material ternario InGaN, obteniendo una eficiencia de 8.47%, por otro lado con la optimización de estos parámetros se realizó lo mismo para el material CdS y se obtuvo la eficiencia de 8.738% y una densidad de corriente de 10.544 mA/cm^2 .

Las películas delgadas de sulfuro de cadmio (CdS) se depositaron sobre sustratos de vidrio mediante la deposición de baño químico en condiciones optimizadas, para obtener películas con las condiciones en las cuales la simulación se obtuvo la mejor eficiencia. La caracterización estructural se llevó a cabo mediante difracción de rayos X. Los estudios ópticos se realizaron mediante mediciones de transmitancia, elipsometría y fotoluminiscencia a temperatura ambiente. El ancho de banda prohibida de las muestras está en el rango 2.358 eV - 2.382 eV. Se estudiaron tres emisiones principales en los rangos 'rojo' (1.8 eV - 2.0 eV), 'verde' (2.3 eV - 2.41 eV) y 'azul' (2.9 eV - 3.0 eV) y se identificaron las diferentes transiciones. Las películas delgadas de sulfuro de cadmio epitaxial (CdS) se depositaron mediante el mismo método, en sustratos de arseniuro de galio (GaAs) y nitruro de galio (GaN). Los diagramas de polo se realizaron mediante difracción de rayos X de alta resolución

(XRD) a $2\theta = 26.6^\circ$ y $2\theta = 43.9^\circ$ para estudiar la textura cristalina de las películas de CdS. Estos valores de 2θ se seleccionaron porque coinciden con las señales de difracción para las fases cristalinas cúbicas y hexagonales. Los resultados de XRD confirmaron que la película CdS sigue siendo la estructura cristalina del sustrato. Fue posible ver cuatro simetrías en las películas de CdS depositadas en sustratos de GaAs, y tampoco hubo señal relacionada con la inclusión de la fase hexagonal. En las películas de CdS obtenidas en sustratos de GaN fue posible observar claramente las seis simetrías. Mediante la dispersión Raman, pudimos determinar el modo fonónico A1LO a $302,35\text{ cm}^{-1}$ y $303,19\text{ cm}^{-1}$ para CdS cúbico y hexagonal, respectivamente. El estudio estructural se completó con análisis de superficie de las películas de CdS mediante imágenes de microscopios de fuerza atómica. Observamos una mayor rugosidad en las películas de CdS sobre sustratos de GaN que confirma la distribución de textura observada en los diagramas de polos.

Abstract

The work herein described presents the results regarding electrical simulations based on $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ solar cells. The theoretical study is focused on describing the performance of InGaN homojunction solar cells considering recent experimental contributions, such as absorption coefficient and In concentration in thin layers. We used analysis of microelectronic and photonic structures (AMPS-1D) code and the simulations were carried out in green region in the electromagnetic field. In order to improve the efficiency of devices, the In concentration was varied in both n-type and p-type layers. The best result was obtained with a concentration of 25% of In for n-type layer and 34% for p-type layer with 50 nm and 400 nm respectively. Simulation predicted a solar cell efficiency of 7.34% with a density current of 8.96 mA/cm^2 . Cadmium sulfide (CdS) thin films were deposited on glass substrates by chemical bath deposition at optimized conditions in order to tune specific emissions of CdS. Structural characterization was carried out by X-ray diffraction, optical studies were realized by Transmittance, Ellipsometry and Photoluminescence measurements at room temperature. The energy band gap of the samples is in the range $2.358 \text{ eV} - 2.382 \text{ eV}$. Three principal emission in '*red*' ($1.8 \text{ eV} - 2.0 \text{ eV}$), '*green*' ($2.3 \text{ eV} - 2.41 \text{ eV}$) and '*blue*' ($2.9 \text{ eV} - 3.0 \text{ eV}$) ranges were studied and the different transitions were identified. Epitaxial cadmium sulfide (CdS) thin films were deposited by chemical bath technique on gallium arsenide (GaAs) and gallium nitride (GaN) substrates. Pole diagrams were realized by high resolution X-ray diffractometer (XRD) at $2\theta = 26.6^\circ$ and $2\theta = 43.9^\circ$ in order to study the texture crystalline of the CdS films. These 2θ values were selected because that match the diffraction signals for cubic and hexagonal crystalline phases. XRD results confirmed that the CdS film remains the crystal structure of the substrate. It was possible to see four-symmetry in the CdS films deposited on GaAs substrates, also there was no signal related to the hexagonal phase inclusion. In the CdS films obtained on GaN substrates was possible to clearly observe six-symmetry. By Raman scattering we could determine the $A_1\text{LO}$ phononic mode at 302.35 cm^{-1} and 303.19 cm^{-1} for cubic and hexagonal CdS respectively. Structural study was complete with surface analysis of the CdS films by atomic force microscope images. We observed a greater roughness in the CdS films on GaN substrates confirming the texture distribution observed in pole diagrams.

Introducción

Con el desarrollo extensivo de la industrialización y el crecimiento rápido de la población, la crisis de la energía y la contaminación del ambiente causadas por el agotamiento de los combustibles fósiles se consideran como dos desafíos principales en el futuro [1,2]. Para abordar estos temas, el aprovechamiento de la energía solar es una estrategia prometedora para lograr la producción de energía sostenible para la sociedad humana [3,4].

El abastecimiento de energía eléctrica a nivel internacional está agotando las fuentes de energía convencionales y sobre ellas recae la mayor responsabilidad de la contaminación y cambio climático a nivel mundial. Además el consumo de energía crece a medida que la población aumenta cada año. Es por ello que surge la necesidad de buscar nuevas formas de producir energía que sean renovables y amigables con el medio ambiente, a fin de combatir la contaminación y cambio climático [5,6]. Una fuente de estas energías es la solar fotovoltaica que aprovecha la energía del sol directamente con los paneles solares que convierten la radiación electromagnética directamente en energía eléctrica. Para la fabricación de los paneles solares se requieren de materiales llamados semiconductores.

La energía solar fotovoltaica se basa en la utilización de celdas solares o fotovoltaicas, fabricadas con materiales semiconductores nanoestructurados, orgánicos, cristalinos, amorfos o policristalinos, mediante efecto fotovoltaico, transforman la radiación solar directamente en energía eléctrica cuando esta incide sobre las celdas solares. El silicio ha sido base de los materiales semiconductores más ampliamente utilizados en el mundo para la construcción de celdas solares comerciales [7].

Gracias a los materiales semiconductores han transformado la tecnología y la sociedad de una manera verdaderamente revolucionaria. Diversos materiales semiconductores se utilizan en dispositivos electrónicos, celdas solares, entre otros,

que han permitido la producción de energía, realizar trabajos más eficientes, funcionamiento de los aparatos electrónicos, etc. [8].

La era moderna de semiconductores en aplicaciones fotovoltaicas comienza en 1954 cuando Chapin, Fuller y Pearson obtuvieron una celda solar de silicio con una eficiencia del 6 %. La primera mención de una celda basada en GaAs fue de un 4 % en 1956 [9]. En la actualidad las celdas de silicio son las más estudiadas y comercializadas, pero estas están llegando a su máxima eficiencia teórica. Es por ello que se requiere del estudio de nuevos materiales.

Se han realizado numerosos estudio de materiales semiconductores formados a partir de los grupos II, III, IV, V y IV de la tabla periódica, para aplicaciones a celdas solares, en este trabajo se centra la atención a los materiales compuestos de los grupos II-VI y III-V, tal es el caso del sulfuro de cadmio (CdS) y nitruro de galio indio (InGaN) respectivamente.

Planteamiento del problema

El estudio de las propiedades físicas y eléctricas en materiales semiconductores, es de vital importancia en el diseño de nuevas estructuras en celdas solares, para comprender los fenómenos que se presentan en la interfaz de la unión p-n en los materiales.

El CdS se ha utilizado en celdas solares desde hace varias décadas como material ventana tipo n. Por otro lado el material ternario InGaN para aplicaciones a celdas solares presenta grandes ventajas en sus propiedades, tales como variar el ancho de banda prohibida solo cambiando la composición de indio, buena resistencia mecánica y a la radiación, es por ello que pueden ser favorables con el acople con el CdS para obtener una celda solar de alta eficiencia. Por ello se plantea el estudio de esta hetero-estructura.

En este trabajo se realiza el estudio de las propiedades eléctricas en la interfaz de esta hetero-estructura (n-CdS/p-InGaN), ya que no existen reportes del estudio de este tipo de hetero-estructura. Se realizó un estudio teórico mediante simulación de parámetros ópticos y eléctricos. Con los resultados se espera plantear una nueva propuesta para desarrollo de celdas solares más eficientes, como primer paso realizo un estudio numérico variando parámetros de los materiales para el funcionamiento de la celda. Posteriormente se realizó el depósito de CdS sobre diferentes sustratos, con el fin de estudiar las propiedades ópticas, morfológicas, estructurales, etc. Para determinar la viabilidad del CdS como material ventana en las construcciones futuras, de hetero-estructuras con diferentes materiales, que puedan acoplarse en la unión n-p con el CdS.

Objetivo general.

Estudiar numéricamente la hetero-estructura CdS/InGaN y depositar CdS sobre diferentes sustratos para el desarrollo de celdas solares.

Objetivos específicos.

1.- Simular parámetros eléctricos de la interfaz CdS/InGaN, en el programa de simulación AMPS-1D.

- Calcular parámetros de simulación en función de la concentración de indio en la aleación ternaria de InGaN. Con diferentes valores de concentración de In para modificar las propiedades ópticas y eléctricas en el material.
- Realizar simulación de los parámetros de la hetero-estructura CdS/InGaN con interfaz.
- Optimizar parámetros del material InGaN, mediante una homo-unión n-InGaN/p-InGaN.
- Realizar simulación de los parámetros en la hetero-estructura, sin interfaz.
- Optimizar parámetros del material CdS, con valores reportados en diferentes trabajos.

2. Realizar depósito y caracterización del material CdS sobre diferentes sustratos.

- Realizar depósito de película delgada de CdS, por depósito por baño químico (DBQ), sobre diferentes sustratos (Vidrio, Si, GaAs y GaN).
- Realizar caracterización estructural de las muestras por difracción de rayos x.
- Caracterizar por elipsometría.
- Caracterizar mediante espectroscopía Raman.
- Realizar caracterización óptica por UV-vis.
- Realizar caracterización morfológica por microscopio de fuerza atómica (AFM).
- Caracterizar por fotoluminiscencia.

Justificación

Una de las alternativas prometedoras para la solución del problema de las energías renovables es el desarrollo de tecnologías de celdas solares, en las que la eficiencia de conversión de alta energía es un requisito clave [10]. Hasta la fecha, el silicio ha sido el material de elección en celdas solares, debido a su tecnología madura y su disponibilidad. Sin embargo, el silicio, tiene una eficiencia limitada debido al exceso de defectos que presenta, su ancho de banda prohibida, por la absorción superficial, etc.

Se han utilizado materiales alternativos en multi-uniones, principalmente compuestos de semiconductores, de eficiencia igual o superior a las celdas solares actuales basadas en silicio. El diseño convencional de celdas solares de alta eficiencia se basa en múltiples uniones, cada una con diferentes intervalos de banda optimizados para absorber energía de diferentes porciones de la irradiación solar [11].

Las celdas solares son una fuente de energía eléctrica renovable y libre de carbono, prometedora para hacer frente a la escasez de combustibles fósiles y el calentamiento global [7]. En la actualidad se buscan nuevos materiales semiconductores para la fabricación de estas, nuevos materiales con características

y propiedades que puedan ser apropiadas para aplicaciones a la construcción de celdas solares, con una mayor eficiencia y bajos costos de fabricación.

En este trabajo se realizará el estudio de la hetero-estructura CdS/InGaN para poder conocer y comprender los fenómenos de transporte así como el comportamiento eléctrico. Esto con el fin de determinar la viabilidad de los materiales y con estos poder desarrollar celdas solares uniendo estas dos familias de materiales semiconductores.

Con el estudio numérico, podemos predecir el comportamiento de la hetero-estructura de la celda solar basada en CdS/InGaN, además determinar la eficiencia de conversión de la energía solar y convertirla en energía eléctrica, con esto podría contra atacar las desventajas que puedan presentar estos materiales. Esto conllevaría a desarrollar tecnología para celdas solares con dos materiales novedosos.

El CdS presenta un parámetro de red en la fase cubica de 5.818 \AA y el InGaN de $4.6 \pm 0.05 \text{ \AA}$. Para concentraciones de indio que se estudian en este trabajo, se tiene una diferencia de 23.5%, en trabajos anteriores se han realizado hetero-estructuras con estos materiales con diferencias mayores en el parámetros de red y por lo tanto no hay un acople eficiente en las uniones. Ahora con esta característica de ambos materiales CdS y el InGaN que son similares se espera obtener una buena respuesta en la hetero-estructura de una celda solar. Por un lado el CdS se ha utilizado como material ventana tipo n desde hace varias décadas como se mencionara más adelante en la descripción de este material y con las ventajas que ofrece el InGaN para celdas solares de alta eficiencia, como el de cubrir todo el espectro electromagnético con la variación del ancho de banda prohibida, variando la concentración de indio en la aleación ternaria.

Capítulo 1. Antecedentes.

En este capítulo se presenta una breve descripción de las propiedades, antecedentes y características generales de los materiales CdS e InGaN, se describen las propiedades más importantes de ambos materiales como ancho de banda prohibida, las fases cristalinas en las que existen, los métodos que se han utilizado en la síntesis de los materiales y la obtención de películas delgadas para aplicaciones en celdas solares. Por último se tienen los antecedentes de estos materiales en celdas solares, para obtener los parámetros de cada material que nos ayudaran para la unión n-p de la celda solar basada en CdS/InGaN.

1.1. Propiedades y características del sulfuro de cadmio (CdS).

El sulfuro de cadmio (CdS) es un material semiconductor de tipo n con un ancho de banda prohibida de 2.42 eV a temperatura ambiente, que lo convierte en un semiconductor muy adecuado para su uso en la preparación de dispositivos optoelectronicos, especialmente como material ventana en celdas solares [12,13]. Es un material de color amarillo que se puede encontrar en forma de polvo y se puede obtener en película delgada por diferentes métodos.

El CdS cristaliza en diferentes estructuras. Las fases más comunes son la estructura hexagonal (wurtzita) y cubica centrada en las caras (zincblenda). Sus propiedades electrónicas han sido estudiadas extensamente durante las últimas tres décadas, debido a sus grandes aplicaciones potenciales. CdS se utiliza en dispositivos adecuados para la optoelectrónica [14], piezoelectrica [15], película delgada hetero-unión de celdas solares y materiales semiconductores [16].

En la figura 1.1 se muestra los tipos de estructuras cristalina que en CdS presenta [14]. En la figura 1.2 a) se muestra la estructura de bandas del CdS y b) la primera zona de Brillouin de la estructura hexagonal. En la figura 1.3 se muestra la estructura de bandas [15] y la primera zona de Brillouin de la estructura cúbica.

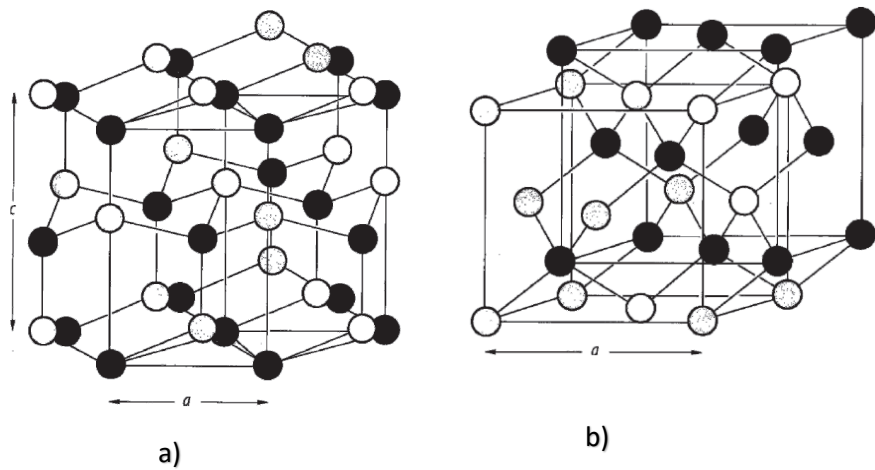


Figura 1.1 Estructura cristalina de CdS a) hexagonal y b) cubica centrada en las caras [14].

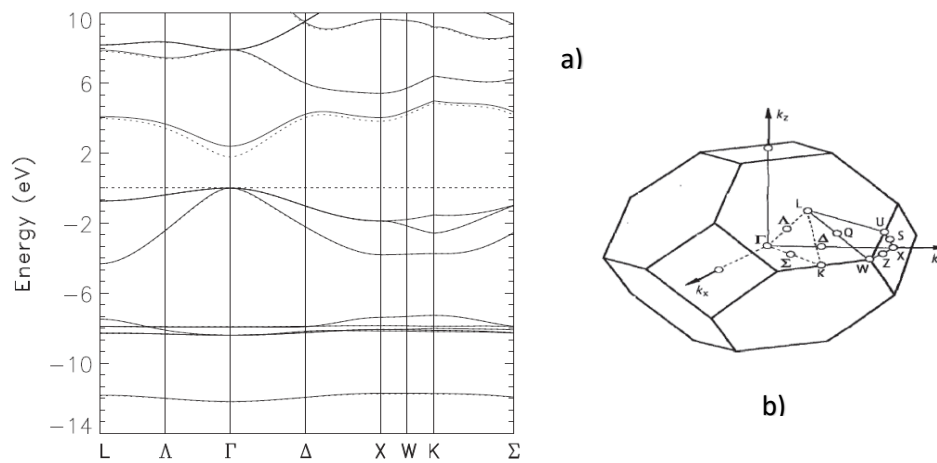


Figura 1.2 a) Estructura de banda de CdS y b) primera zona de Brillouin, estructura hexagonal [17].

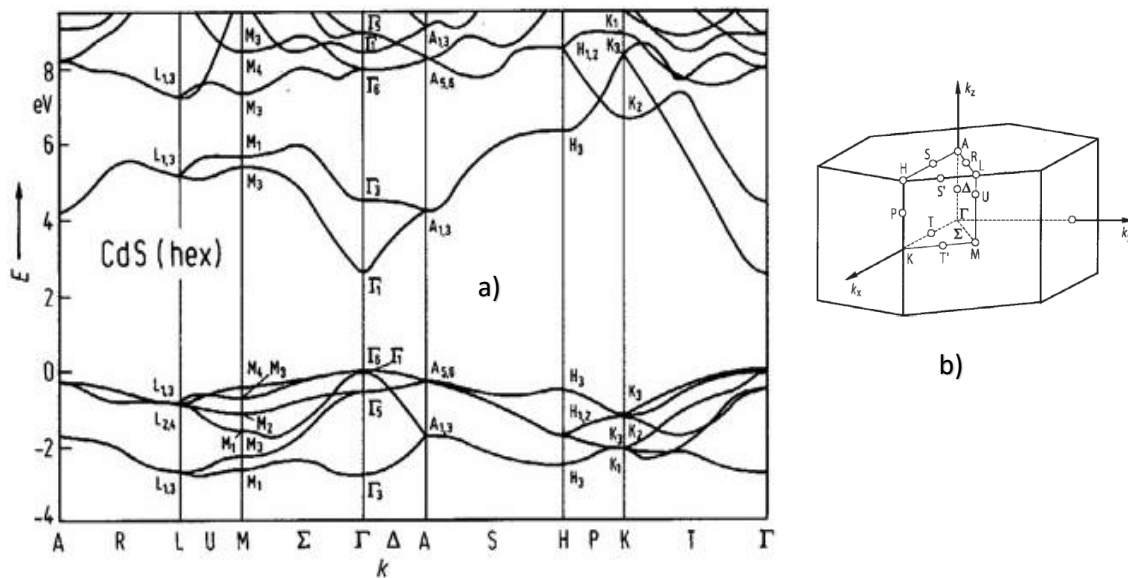


Figura 3. a) Bandas electrónicas calculadas de energía de CdS-h de Cálculos V (líneas continuas) y VI (líneas discontinuas). Las energías ocupadas correspondientes de los cálculos V y VI son iguales para cualquier punto k [18], y b) primera zona de Brillouin para CdS-cúbico [17].

Las propiedades más importantes de CdS se muestran en la tabla 1.1 [18,19]. Donde fueron obtenidos experimentalmente.

Tabla 1.1 Parámetros y características de CdS (hexagonal y cúbico).

Propiedades	Valores/descripción
Estructura cristalina	Cubica (c), Hexagonal (h)
Parámetro de red hexagonal y cubica	$a = 4.1348 \text{ \AA}$, $c = 6.7490 \text{ \AA}$. [17] y $a = 5.818 \text{ \AA}$
Ancho de Banda prohibida	2.5 eV-hexagonal, 2.48 eV-cubica [19]
Masa efectiva de electrones en la banda de conducción: m_n	$0.2 M_e$ (c-h)
Masa efectiva de electrones en la banda de Valencia: m_p	$0.7 m_h$ (c-h)
Constante dieléctrica: $\epsilon(0)$	9.12 (c-h)
Índice de refracción: n	2.5
Movilidad de electrones: μ_n (cm^2/Vs)	300-h, 17-c [19]
Movilidad de huecos: μ_p (cm^2/Vs)	50-h, 5-c [19]
Conductividad térmica: k (W/Kcm)	0.2-(c-h)

Concentración intrínseca de portadores (10^{15} cm^{-3})	8.6-h, 16.7-c
Movilidad Hall de electrón: $\mu_{dr,n}^*(\text{cm}^2/\text{Vs})$	286-(c-h)
Movilidad Hall de los huecos $\mu_{dr,p}^*(\text{cm}^2/\text{Vs})$	6-h, 15-c
Coeficiente de absorción: $\alpha_0(\text{cm}^{-1})$	0.045-(c-h)
Altura de barrera Schottky (eV): CdS-Au, CdS-Cu	0.8-h, 0.35-c
Capacidad calorífica molar $C_p(\text{K}^{-1}\text{mol}^{-1})$	13.3×10^{-3} -(h-c)
Densidad: $d(\text{g}/\text{cm}^3)$	4.82
Concentración de donores (cm^{-3})	1×10^{18} -(h-c) [19]
Concentración de aceptores (cm^{-3})	10
Densidad de estados banda conducción $N_c (\text{cm}^{-3})$	1×10^{20} -(h-c) [19]
Densidad de estados banda valencia $N_v (\text{cm}^{-3})$	1×10^{20} -(h-c)[19]
Afinidad electrónica (eV)	4.5-(h-c) [19]
Permitividad relativa	8.9-(h-c) [19]

1.2. Depósito de película delgada de CdS.

Las películas delgadas de CdS se puede obtener por diferentes métodos tales como sputtering [20], depósito por baño químico (DBQ) [21], deposición física en fase de vapor (CVD) [22], evaporación termal [23], por sublimación en espacio cerrado (CSS) [24], epitaxia de haces moleculares (MBE) [25], por pulverización pirólisis [26] y epitaxia de pared caliente [27]. Entre todos los procesos el más común y exitoso para el depósito de CdS, es por baño químico [28]. La técnica DBQ tiene muchas ventajas como la simplicidad, no hay necesidad de instrumentos sofisticados, desperdicio mínimo de material, la forma económica de la deposición de gran superficie, y no hay necesidad de manipulación de gases venenosos [29]. DBQ es un proceso lento, que facilita la mejor orientación de los cristales con estructura de grano mejorada. Se observa que los parámetros de deposición en los que se producen las películas delgadas de CdS desempeñan un papel vital en la decisión de la uniformidad de la película delgada y su respuesta espectral [30].

En comparación de la estructura cúbica y hexagonal, la segunda se ha realizado mayor estudio ya que es la fase más estable y se puede sintetizar fácilmente por diversos métodos de preparación [31]. Y es posible hacer crecer películas de CdS cúbica. La formación de la fase cúbica o hexagonal depende de muchos factores, como la técnica de depósito y las condiciones de estas. En depósito por baño químico (DBQ) la estructura de la película está influenciada por la composición del baño, temperatura y pH de la solución. En la fase cúbica es descrito en las referencias [32,33], donde la película de CdS fue preparado a partir de baño con cloruro de cadmio, hidróxido de potasio, nitrato de amonio y thiourea a una temperatura de 75 °C. Por otra parte en las referencias [34,35] reportan estructura hexagonal de CdS, donde las películas fueron depositadas por baño químico, a partir de nitrato de cadmio, citrato sódico, amoníaco acuoso y thiourea, a una temperatura de 60 °C. La fase cubica es menos común y los experimentos en los que los polvos o soluciones se convirtieron en CdS hexagonal han llevado a la conclusión de que CdS cúbico es metaestable en el rango de temperaturas de 20-90 °C [36].

En los últimos años se han realizado diversos estudios sobre el depósito de CdS, tales como los espesores de películas delgadas, las propiedades ópticas y estructurales, etc. [37] o la comparación de las propiedades de películas con diferentes métodos de depósito [38].

En diversos trabajos han reportado, depósito de película delgada de CdS por baño químico de muy buena calidad, es por ello que en este trabajo se realiza el depósito por esta técnica. En la figura 1.4 se presenta un esquema del método DBQ, donde se presentan los principales componentes que se utilizan para este proceso.

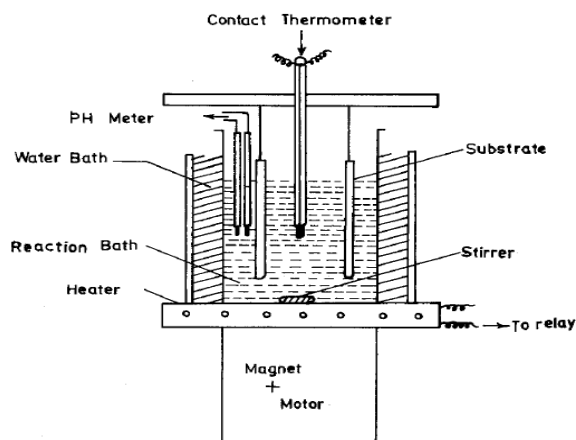


Figura 1.4 Esquema del método depósito de película delgada por baño químico (DBQ) [39].

1.3. Celdas solares basada en CdS.

El CdS es uno de los semiconductores de película delgada más investigados para aplicaciones fotovoltaicas en las últimas cinco décadas. El CdS tuvo atención como hetero-unión en celdas solares en la década de 1950 obteniendo un 6% de eficiencia para la primera celda de película delgada en la unión de CuS/CdS [39]. Con su característica de semiconductor de tipo n [40] y el intervalo de su brecha energética ($E_g = 2.4 \text{ eV}$), CdS se ha utilizado como material de ventana junto con varios semiconductores como CdTe [41], Cu_2S , InP [42] y Cu_2InSe [43-44] con 14-16% de eficiencia [45]. También, se han realizado estudios sobre CdS dopado con Cu para obtener Cu-CdS de tipo p. Es así como se ha obtenido CdS tipo p por difusión de Cu. Han logrado una eficiencia de 6-7% con CdS (Cu) / CdS homoestructura para aplicaciones fotovoltaicas [46, 47]. Hoy el CdS es considerado como el material ventana más adecuado para celdas solares basado con diversos materiales, los más comunes con los mencionados anteriormente [48,49].

A continuación se mencionan algunos trabajos que se han realizado y utilizan el CdS como material ventana con diferentes materiales como Nowshad Amin et al. [50] En 2007 realizó una simulación numérica de una celda solar de CdS/CdTe y CdS/CdTe/ZnTe en función del espesor de CdTe. Donde reporta la variación de la

eficiencia de la celda solar en función del espesor del material CdTe, CdS como material ventana y ZnTe como contacto posteriores para reducir pérdidas de portadores por recombinación. Para una estructura convencional de celda solar CdS/CdTe/dopado con Cu y estructura cúbica está por debajo de 16% de eficiencia con un espesor de 3 μm de CdTe. Se encontraron disminuciones de la respuesta espectral y esto sugiere pérdida por recombinación de portadores, y la minoría en la interfaz del contacto posterior.

En el caso de celdas solares de CdS/CdTe, muestra una tendencia decreciente de la eficiencia de conversión con la disminución del espesor de CdTe. Los cálculos relacionados de la estructura CdS/CdTe/ZnTe que se llevaron a cabo, respecto a la intersección del ZnTe se observó que la pérdida de portadores en la superficie por recombinación fue superada y con esto podría contribuir en un aumento significativo en la eficiencia. La fiabilidad de las predicciones, por su puesto, depende los parámetros de los materiales que se utilicen en la simulación.

Hongmei Dang et al. (2014) [51], realizaron un estudio de matrices de nanocables de sulfuro de cadmio de 100 nm como reemplazo para la película plana de n-CdS, que actualmente se utiliza como capa ventana en muchos dispositivos de celdas solares. Estas matrices exhibieron gran transmisión a longitudes de onda por debajo de 512 nm. Se obtuvieron cálculos teóricos del número de fotones extras transmitida a través de la capa ventana de CdS, indica una mejora en la potencia de fotocorriente en 20.6% y en el voltaje de circuito abierto de 10.2% sobre el dispositivo usando película delgada de CdS como capa ventana.

1.4. Propiedades y características de InGaN.

En el camino hacia la próxima generación de celdas solares de alta eficiencia, la aleación ternaria de nitruro de galio indio (InGaN) es un buen candidato ya que permite cubrir todo el espectro solar solo con el cambio en su composición de indio [52]. De hecho, su banda prohibida puede cubrir todo solar espectro, solamente

cambiando la composición de indio en la aleación [53,54]. En la figura 1.5 se presenta esta propiedad en la cual presentan las curvas de E_g vs fracción molar de indio, donde se observa cómo cambia el ancho de banda prohibida del ternario InGaN reportada por la referencia [55]. El GaN y InN en la fase cubica tienen un ancho de banda prohibida de 3.2 eV y 0.7 eV a temperatura ambiente [56,57] y un parámetros de red $a=4.51 \text{ \AA}$ y 5.01 \AA [58,59], respectivamente, se hace referencia a estos dos binarios ya que a partir de estos son las propiedades del ternario InGaN.

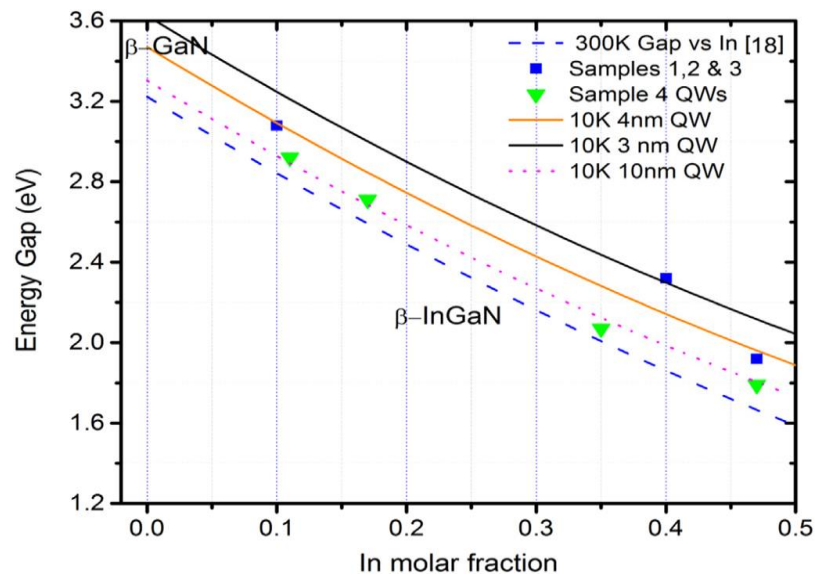


Figura 1.5 Ancho de banda vs la fracción molar de indio para aleaciones de InGaN a diferente concentración de In, los cuadros azules corresponden a emisiones de InGaN de pozos cuánticos (QWs) para tres diferentes concentraciones de In, (la línea azul fue reportada en [60]).

La aleación de InGaN también cuenta entre sus ventajas un alto coeficiente de absorción [61,62], así como buena resistencia a la radiación [63], permitiendo su funcionamiento en condiciones extremas.

Sin embargo, uno de sus principales inconvenientes es la dificultad de su dopaje tipo-p, principalmente debido a la alta concentración de donantes residuales y la falta de aceptores [64] y los procesos tecnológicos complejos que son difíciles de dominar que tienen un alto impacto en la calidad de la capa [65,66]. Otros

inconvenientes son la dificultad de realizar contactos óhmicos [67] y la dificultad de hacer crecer InGaN con contenido de indio lo suficientemente alto como para permitir la cobertura óptima de la radiación del espectro solar [68,69]. Por estas razones, las celdas solares basadas en InGaN se encuentran todavía en las primeras etapas de desarrollo y la eficiencia es todavía muy baja para competir con otras tecnologías de películas delgadas bien establecidos [70]. En la tabla 1.2 se presentan algunas propiedades y características del material ternario que están en función principalmente de la concentración de In.

Tabla 1.2 Ecuaciones para el cálculo de parámetros del InGaN, variando la composición de In (para la fase hexagonal o cúbica).

Parámetros	Valores/características	Ref
Ancho de banda (E_g)	$E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \cdot E_g^{\text{InN}} + (1-x) \cdot E_g^{\text{GaN}} - b \cdot x \cdot (1-x)$	[89]
Coefficiente de absorción (α)	$\alpha(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 10^5 \sqrt{C(E_{ph} - E_g) + D(E_{ph} - E_g)^2}$	[78]
Permitividad relativa (ε)	$\varepsilon(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 15.3x + 8.9(1-x)$	[89]
Densidad de estados banda de conducción (N_c)	$N_c(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = (0.9x + 2.3(1-x)) \cdot 10^8$	[87]
Densidad de estados banda de valencia (N_v)	$N_v(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = (5.3x + 1.8(1-x)) \cdot 10^9$	[87]
Masa efectiva de electrones (m_e)	$m_e(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 0.12x + 0.2(1-x)$	[89]
Masa efectiva de huecos (m_h)	$m_h(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 0.17x + 1.0(1-x)$	[89]
Movilidad de electrones/huecos (U_0)	$U_0(N, T) = U_{\min,i} \left(\frac{T}{300} \right)^{B1} + \frac{(U_{\max,i} - U_{\min,i})(T/300)^{B2}}{1 + (N / Nref (T/300)^{B3})^{\gamma(T/300)^{B4}}}$	[81]
Afinidad electrónica (χ)	$\chi(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 4.1 + 0.7(3.4 - E_g)$	[89]

1.5. Síntesis de películas delgadas de InGaN.

El crecimiento de películas de InGaN, aún es difícil de obtener, ya que es muy difícil mezclar homogéneamente indio (In) y galio (Ga) con nitrógeno (N) para cantidades relativamente elevadas de In, porque la temperatura de crecimiento de GaN es muy diferente del InN y también difieren considerablemente en su miscibilidad a nivel termodinámico [72,73]. El InGaN se ha conseguido crecer, por ejemplo, sobre zafiro o sobre plantillas de GaN, pero normalmente con composiciones no homogéneas [74,75]. Las condiciones de crecimiento de InGaN que dan como resultado una concentración de más de un 30% de indio pueden conducir a una alta densidad de defectos debido al gran desajuste de la red entre GaN e InN. Además, el alto contenido de indio lleva a un fuerte efecto de confinamiento cuántico, lo que reduce la eficiencia de recombinación radiativa de los portadores y dificulta las transiciones de largo alcance de longitud de onda. Informes recientes han estudiado la optimización del material en ciertos rangos de InGaN hexagonal [76-78]. Para el crecimiento de películas de InGaN se han tomado diferentes rutas, para superar los problemas físicos, técnicos que se han presentado para el crecimiento de este material. Uno de los caminos para crecer InGaN, es sintetizar pozos cuánticos mediante la variación de la fracción molar en la capa activa, para absorber una longitud de onda larga de emisión [79]. Los trabajos más destacados en el crecimiento de InGaN, son para aplicaciones a diodos emisores de luz y hacen el crecimiento de puntos cuánticos o pozos cuánticos [80], nanoporos [81]. Típicamente todos los trabajos que se han realizado cristalizan en la fase hexagonal que es la fase más estable. Por lo tanto, la mayor parte de los trabajos anteriores se basan en estructura hexagonal (wurtzita) de InGaN. Sin embargo, la fase cúbica (zincblende) tiene algunas ventajas sobre la fase hexagonal, como la falta de polarización espontánea y piezoeléctrica [82]. Además el GaN-cúbico tiene una banda de energía prohibida inferior de 3.28 eV que el GaN-hexagonal. Por lo tanto, las emisiones de baja energía en la aleación ternaria InGaN-cúbico pueden obtenerse con una concentración de In de menor a InGaN-hexagonal.

Aunque es más difícil sintetizar películas cúbicas de InGaN, se ha podido crecer usando técnicas de depósito químico en fase de vapor usando fuentes metal-orgánicas (MOCVD) y epitaxia de haces moleculares (MBE), crecidas sobre sustratos de 3C-SiC, GaAs, MgO y reciente sobre sustratos de silicio microestructurado [83]. En 2000 Taniyasu et al. [84] crecieron InGaN-cúbico QWs sobre GaAs usando MOVPE que emitió en la región espectral violeta-azul, hacen la variación del contenido de In, además reportan la composición de estructura hexagonal en un 10%. Chichibu et al. [84] obtuvieron emisiones en los rangos de violeta, azul y verde con InGaN QWs cúbico sobre sustratos 3C-SiC usando MBE. Li et al. [85] demuestran la emisión del verde de InGaN QWs crecidas sobre 3C-SiC utilizando MBE. Stark et al. [83] crecieron InGaN QWs en Si-ranurado utilizando MOVPE. I.E. Orozco et al. [86] crecieron InGaN QWs cúbico, utilizando plasma de epitaxia de haces moleculares (PA-MBE) crecida sobre sustratos de MgO en un solo proceso de crecimiento y demuestran la emisión en los tres colores primarios (azul, verde y rojo) en una hetero-estructura solo cambiando la concentración de In en el ternario.

1.6. Simulación de celdas solares de InGaN.

Algunos antecedentes de celdas solares basada en InGaN se describen a continuación, diferentes trabajos se presentan hasta la fecha solamente estudio teórico, donde se han obtenido eficiencias altas en una y multi-uniones de este material. B. Dennai et al. (2013) [87], realizaron una simulación de multi-uniones de celdas solares basada en InGaN usando AMPS-1D, donde diseña una celda solar tándem (con seis uniones) donde realiza el estudio de esta estructura y obtiene resultados de una sola unión de 10.9% y un 40.05% en seis uniones con iluminación AM1.5.

Nargis Akter (2014) [88], realizo diseño y simulación de una celda solar tándem multi-unión de InGaN. Realiza diversas simulaciones de análisis de microelectrónica y estructura fotónica, para explorar la posibilidad de una mayor eficiencia de estas

celdas, reporta resultados de eficiencia de una sola unión con gap de 1.34 eV de 25.02% de doble unión de 35.45% y de tripe con 42.34%. A demás determino espesor óptimo de las capas n-p así como de los contactos

A. Mesrane et al. (2015) [89], realizaron el diseño y simulación de la unión p-n de una celda solar basada en InGaN, donde determina la unión óptima para una celda solar, así como las propiedades ópticas y el modelo físico como el modelo Fermi-Dirac, dopaje, recombinación de portadores, esto en una sola unión.

A. Adaine et al. (2016) [52], hacen el estudio de la simulación de una nueva capa p libre de InGaN de celda solar basado en Schottky, reporta resultados del análisis de la capa de la celda basa InGaN y MIN con eficiencias un poco mayores a la de estructuras convencionales de 18.2% y 19.8% respectivamente.

Los trabajos que se han realizado con el material InGaN, hasta ahora han sido estudios numéricos, como se mencionó en los párrafos anteriores, con los antecedes que se tienen hasta la fecha, aun no se ha realizado estudio experimental, en otras palabras los resultados obtenidos en los estudios no se han llevado al experimento para poder validar los resultados numéricos.

En este trabajo se realiza la unión de dos materiales de familias diferentes, por una lado el sulfuro de cadmio es de la familia III-V y el InGaN de la familia II-V, el CdS se eligió por las propiedades ópticas y eléctricas que este presenta, además es un material que ha sido estudiado desde los años 70's como material ventana tipo n ya que presenta en sus portadores mayoritarios electrones y el InGaN por ser un material novedoso, ya que en los estudios que se han realizado basados en celdas solares, han reportados eficiencias de hasta 42.34% [88].

Referencias

- [1]. Q.J. Xiang, B. Cheng, J.G. Yu, *Angew. Chem. Int. Ed.* 54 (2015) 2–19.
- [2]. H.G. Yu, F.Y. Chen, F. Chen, X.F. Wang, *Appl. Surf. Sci.* 358 (2015) 385–392.
- [3]. Q. Li, X. Li, S. Wageh, A.A. Al-Ghamdi, J. Yu, *Adv. Energy Mater.* 5 (2015)1500010.
- [4]. J. Jin, J.G. Yu, D.P. Guo, C. Cui, W. Ho, *Small* 11 (2015) 5262–5271.
- [5]. Yuri M. Galperin. (1999): *Doped Semiconductors: Role of Disorder. Lectures at Lund University October-November 1999. Department of Physics, P.O. Box 1048 Blindern, 0316 Oslo.*
- [6]. Carl sagan: *miles de millones*, (<https://lasteologias.files.wordpress.com/2008/06/carl-sagan-miles-de-millones.pdf>).
- [7]. José A. C. González, Roque C. Pérez, Antonio C. Santos, *CENTRALES DE ENERGÍAS RENOVABLES: GENERACIÓN ELÉCTRICA CON ENERGÍAS RENOVABLES*, PEARSON EDUCACIÓN, S.A., Madrid, 2009.
- [8]. *Engineering materials science*. Milton Ohring, departamento of materials science and engeeniering, Steven institute of technology, hoboquen, New Jersey, 1995 by ACADEMIC PRESS.
- [9]. R.H. Bube, “*Series on properties of semiconductor materials. Vol. 1 - Photovoltaic Materials*”, Imperial College Press, (1998).
- [10]. J. Nelson, *the Physics of Solar Cells*, Imperial College Press, London, UK, 2003.
- [11]. T. F. Gundogdu, M. Gökkavas and E. Ozbay, *Improving the Efficiency Enhancement of Photonic Crystal Based InGaN Solar Cell by Using a GaN Cap Layer*, *Advances in Materials Science and Engineering*, V. 2014.
- [12]. M. A. Mahdi, Z. Hassan, S. S. Ng, J. J. Hassan, and S. K. M. Bakhori, “*Structural and optical properties of nanocrystalline CdS thin films prepared using microwave-assisted chemical bath deposition*,” *Thin Solid Films*, vol. 520, no.9,pp. 3477–3484, 2012.
- [13]. M. A. Mahdi, J. J. Hassan, Z. Hassan, and S. S. Ng, “*Growth and characterization of ZnxCd1-xS nanoflowers by microwaveassisted chemical bath deposition*,” *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 541, pp. 227–233, 2012.
- [14]. Y. Iyechika, G. Wigner, D. Jager, A. Witt, C. Klingshirn, *SPIE Opt. Comput.* 88 (1988) 103.
[4] V.V. Stefko Sov, *J. Commun. Technol. Electron.* 36 (1991).
- [15]. M.J. Bruchez, M. Moronne, P. Gin, S. Weiss, A.P. Alivisatos, *Science* 281 (1998) 2013–2016.
- [16]. Otfried Madelung, *Semiconductors: Data Handbook*,
- [17]. E.C. Ekuma, L.Franklin, G.L. Zhao, J.T. Wang, D. Bagayoko, *Physica B* 406 (2011) 1477–1480.
- [18]. Ximello Quiebras Jose Nestor. *Propiedades de peliculas delgadas de CdS, depositadas por baño quimico-sputtering en celdas solares*.ESFM, 2005.
- [19]. J. Conde, I Mejia, F S Aguirre-Tostado, C Young and M A Quevedo-Lopez, *Semicond. Sci. Technol.* 29 (2014) 045006 (6pp).
- [20]. I. Mártil de la Plaza, González-Díaz G, Sánchez-Quesada F, Rodríguez-Vidal M. *Structural and optical properties of r.f.-sputtered CdS thin films*. *Thin Solid Films* 1984;120: 31-6.

- [21]. Mahdi MA, Kasem SJ, Hassen JJ, Swadi AA, A l-Ani SKJ. Structural and optical properties of chemical deposition CdS thin Films. *Int. J. Nanoelectronics and Materials* 2009; 2:163-72.
- [22]. Ashour A, El-Kadry N, Mahmoud SA. On the electrical and optical properties of CdS films thermally deposited by a modified source. *Thin Solid Films* 1995; 269:117-20.
- [23]. Davide Barreca, Alberto Gasparotto, Cinzia Maragno, and Eugenio Tondello. CVD of Nanosized ZnS and CdS thin films from single-source precursors. *J. Electrochem. Soc.* 2004; 151(6):G428-35.
- [24]. Albin D, Rose D, Dhere R, Levi D, Woods L, Swartzlander A, Sheldon P. Processing effects on junction interdiffusion in CdS/CdTe polycrystalline devices. *Proc. 26th IEEE Photovoltaic Specialists Conf., Anaheim, California; 1997.*
- [25]. Petillona S, Dinger A, Grün M, Hetterich M, Kazukauskas V, Klingshirn C et. al. Molecular beam epitaxy of CdS/ZnSe heterostructures. *Journal of Crystal Growth* 1999; 201-202:453-56.
- [26]. Ashoour A. Physical properties of spray pyrolysed CdS thin films. *Turk. J. Phys.* 2003; 27:551-8.
- [27]. Humenberger J, Linnert G, Lischka K. Hot-walleepitaxy of CdS thin films and their photoluminescence. *Thin Solid Films* 1984; 121(1):75-83.
- [28]. R.S. Mane, C.D. Lokhande, *Mater. Chem. Phys.* 65 (2000) 1–31.
- [29]. M. Dhanam, R. Balasundraprabhu, S. Jayakuma, P. Gopalakrishnan, M.D. Kannan, *Phys. Status Solidi (a)* 191 (1) (2002) 149.
- [30]. M. Matsumura, S. Furukawa, Y. Saho, H. Tsubomura, *J. Phys. Chem.* 89 (1985)1329–1330.
- [31]. R. Banerjee, R. Jayakrishnan, P. Ayyub, *J. Phys. Condens. Matter* 12 (2000)10647–10654.
- [32]. A.I. Oliva, O. Solís-Canto, R. Castro-Rodríguez, P. Quintana, *Thin Solid Films* 391 (2000) 28.
- [33]. R. Castro-Rodríguez, et al., *Appl. Surf. Sci.* 161 (2000) 340.
- [34]. P.J. George, A. Sanchez-Juarez, P.K. Nair, *Semicond. Sci. Technol.* 11 (1996) 1.
- [35]. A.E. Rakhshani, A.S. Al-Azab, *J. Phys. Condens. Matter* 12 (2000) 8745.
- [36]. Rittner, E. S., Schulman, J. H.: *J. Phys. Chem.* 47 (1943) 537.
- [37]. Joel Pantoja Enríquez, Xavier Mathew, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 76 (2003) 313–322.
- [38]. M.A. Islam, M.S. Hossain, M.M. Aliyu, P. Chelvanathan, Q. Huda, M.R. Karim, K. Sopian, N. Amin, *Energy Procedia* 33 (2013) 203 – 213
- [39]. R.H. Bube, *Photovoltaic Materials*, Imperial College Press, London, 1998, p. 1.
- [40]. V.R. Shinde, S.B. Mahadik, T.P. Gujar, C.D. Lokhande, *Appl. Surf. Sci.* 252 (2006) 7487.
- [41]. G. Feng, C. Li, Y. Hu, L. Zhang, *J. Cryst. Growth* 304 (2007) 369.
- [42]. Y. Zhang, Y. Chen, T. Wang, J. Zhou, Y. Zhao, *Microporous Mesoporous Mater.* 114 (2008) 257.
- [43]. M.T. Verelst, O. Ely, C. Amiens, E. Snoeck, P. Lecante, A. Mosset, M. Respaud, J.M. Brotom, B. Chaudret, *Chem. Mater.* 11 (1999) 2702.
- [44]. P. Nkeng, J. Koenig, J. Gautier, P. Chartier, G. Poillerat, *J. Electroanal. Chem.* 402 (1996) 81.
- [45]. S.G. Chrisoskova, M. Stoyanova, M. Georgieva, D. Mehandjiev, *Mater. Chem. Phys.* 60 (1999) 39.
- [46]. M.M. Natile, A. Glisenti, *Chem. Mater.* 14 (2002) 3090.
- [47]. T. Maruyama, S. Arai, *J. Electrochem. Soc.* 143 (1996) 1383.
- [48]. Y. Kashiwaba, K. Isojima, K. Ohta, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 75 (2003) 253.

- [49]. Y. Kashiwaba, T. Komatsu, M. Nishikawa, Y. Ishikawa, K. Segawa, Y. Hayashi, *Thin Solid Films* 408 (2002) 43
- [50]. D. Bonnet, *Int. J. Solar Energy* 12 (1992) 1.
- [51]. T.L. Chu, S.S. Chu, *Solid-State Electron.* 38 (1994) 533.
- [52]. Abdoulwahab Adaine, Sidi Ould Saad Hamady, Nicolas Fressengeas, *Superlattices and Microstructures* 96 (2016) 121-133
- [53]. A. Bhuiyan, K. Sugita, A. Hashimoto, A. Yamamoto, *InGaN solar cells: present state of the art and important challenges*, *IEEE Journal of Photovoltaics* 2 (3) (2012) 276–293.
- [54]. L. A. Reichertz, I. Gherasoiu, K. M. Yu, V. M. Kao, W. Walukiewicz, J. W. Ager III, *Demonstration of a III–Nitride/Silicon tandem solar cell*, *Applied Physics Express* 2 (12) (2009) 122202
- [55]. I.E. Orozco Hinojosa, M. Avalos-Borja, V.D. Compeán García, C. Cuellar Zamora, A.G. Rodríguez, E. López Luna, M.A. Vidal, *Journal of Crystal Growth* 435 (2016) 110–113.
- [56]. V.D. CompeánGarcía, I.E.OrozcoHinojosa, A.EscobosaEchavarría, E.LópezLuna, A.G.Rodríguez, M.A.Vidal, *Journal of Crystal Growth* 418 (2015) 120–125.
- [57]. S.V. Novikov, N. Zainal, A.V. Akimov, C.R. Staddon, A.J. Kent, C.T. Foxon, *J. Vac. Sci. Technol. B.* 28 (2010) C3B1.
- [58]. J. Schörmann, D.J. As, K. Lischka, P. Schley, R. Goldhahn, S.F. Li, W. Löffler, M. Hetterich, H. Kalt, *Appl. Phys. Lett.* 89 (2006) 261903.
- [59]. M. PérezCaro, A.G. Rodríguez, E. López-Luna, M.A. Vidal, H. Navarro-Contreras, *J. Appl. Phys.* 107 (2010) 083510.
- [60]. E. Matioli, C. Neufeld, M. Iza, S.C. Cruz, A.A. Al-Heji, X. Chen, R.M. Farrell, S. Keller, S. DenBaars, U. Mishra, et al., *High internal and external quantum efficiency InGaN/GaN solar cells*, *Appl. Phys. Lett.* 98 (2) (2011) 021102.
- [61]. S. Lin, S. Zeng, X. Cai, J. Zhang, S. Wu, L. Sun, B. Zhang, *Simulation of doping levels and deep levels in InGaN-based single-junction solar cell*, *J. Mater. Sci.* 47 (11) (2012) 4595e4603.
- [62]. A.Y. Polyakov, S. Pearton, P. Frenzer, F. Ren, L. Liu, J. Kim, *Radiation effects in GaN materials and devices*, *J. Mater. Chem. C* 1 (5) (2013) 877e887.
- [63]. R. Dahal, B. Pantha, J. Li, J. Lin, H. Jiang, *InGaN/GaN multiple quantum well solar cells with long operating wavelengths*, *Appl. Phys. Lett.* 94 (6) (2009) 063505.
- [64]. Meng Z., Bhattacharya P., Wei G., Banerjee A., *Mg doping of GaN grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy under nitrogen-rich conditions*, *Appl. Phys. Lett.*, 96(13).
- [65]. I. Gherasoiu, K.M. Yu, L.A. Reichertz, W. Walukiewicz, *InGaN doping for high carrier concentration in plasma-assisted molecular beam epitaxy*, *Phys. Status Solidi C.* 11 (3-4) (2014) 381e384.
- [66]. A. Bhuiyan, K. Sugita, A. Hashimoto, and A. Yamamoto, *InGaN solar cells: present state of the art and important challenges*, *IEEE J. Photovolt.* 2 (3) (2012) 276e293.
- [67]. A. Yamamoto, K. Sugita, A. Bhuiyan, A. Hashimoto, N. Narita, *Metal-organic vapor-phase epitaxial growth of InGaN and InAlN for multi-junction tandem solar cells*, *Mater. Renew. Sustain. Energy* 2 (2) (2013) 1e9.
- [68]. I.K. Durukan, Ö. Bayal, G. Kurtulus, Y. Bas, A. Gültekin, M.K. Öztürk, S. Çorekçi, M. Tamer, S. Özçelik, E. Ozbay, *Examination of the temperature related structural defects of InGaN/GaN solar cells*, *Superlattices Microstruct.* 86 (2015) 379e389.
- [69]. N.G. Toledo, U.K. Mishra, *InGaN solar cell requirements for high-efficiency integrated III-nitride/non-III-nitride tandem photovoltaic devices*, *J. Appl. Phys.* 111 (11) (2012) 114505.

- [70]. S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kozaki, H. Umemoto, M. Sano, K. Chocho, Violet InGaN/GaN/AlGaIn-based laser diodes with an output power of 420 mW, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 37, L627 (1998).
- [71]. G.F. Brown, J.W. Ager, W. Walukiewicz, J. Wu, *Solar Energy Materials and Solar Cells* 94 (2010) 478-483.
- [72]. T. Kehagias, *Nanoscale indium variation along InGaIn nanopillars grown on (111) Si substrates*, *Phys. E Low-Dimensional Syst. Nanostructures.*, 42, 2197 (2010).
- [73]. H. Komaki, T. Nakamura, R. Katayama, K. Onabe, M. Ozeki, T. Ikari, *Growth of In-rich InGaIn films on sapphire via GaIn layer by RF-MBE*, *J. Cryst. Growth*, 301-302, 473 (2007).
- [74]. H.J. Kim, Y. Shin, S.-Y. Kwon, H. Jin Kim, S. Choi, S. Hong, C.S. Kim, J.W. Yoon, H. Cheong, E. Yoon, *Compositional analysis of In-rich InGaIn layers grown on GaIn templates by metalorganic chemical vapor deposition*, *J. Cryst. Growth*, 310, 3004 (2008).
- [75]. C. Du, Z. Ma, J. Zhou, T. Lu, Y. Jiang, P. Zuo, H. Jia, H. Chen, *Appl. Phys. Lett.* 105 (2014) 071108.
- [76]. J. Yang, T. Wei, Q. Hu, Z. Huo, B. Sun, R. Duan, J. Wang, *Mater. Sci. Semicond. Proc.* 29 (2015) 357.
- [77]. Y. Jiang, Y. Li, Y. Li, Z. Deng, T. Lu, Z. Ma, P. Zuo, L. Dai, L. Wang, H. Jia, W. Wang, J. Zhou, W. Liu, H. Chen, *Sci. Rep.* 5 (2015).
- [78]. H. Li, P. Li, J. Kang, Z. Li, Z. Li, J. Li, X. Yi, G. Wang, *Appl. Phys. Express* 6 (2013) 102103.
- [79]. S.J. Chua, C.B. Soh, W. Liu, J.H. Teng, S.S. Ang, S.L. Teo, *Phys. Stat. Sol. C* 5 (2008) 2189.
- [80]. H.-W. Lin, Y.-J. Lu, H.-Y. Chen, H.-M. Lee, S. Gwo, *Appl. Phys. Lett.* 97 (2010) 073101.
- [81]. H.F. Trung Nguyen, Q. Wang, Z. Mi, *J. Elec. Mat.* 43 (4) (2014).
- [82]. C.J. Stark, T. Detchprohm, S.C. Lee, Y.B. Jiang, S.R.J. Brueck, C. Wetzel, *Appl. Phys. Lett.* 103 (2013) 232107.
- [83]. Y. Taniyasu, K. Suzuki, D.H. Lim, A.W. Jia, M. Shimotomai, Y. Kato, K. Takahashi, *Phys. Stat. Sol. A* 180 (2000) 241.
- [84]. S.F. Chichibu, T. Onuma, T. Sota, S.P. DenBaars, S. Nakamura, T. Kitamura, Y. Ishida, H. Okumura, *J. Appl. Phys.* 93 (2003) 2051.
- [85]. S.F. Li, J. Schörmann, D.J. As, K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* 90 (2007) 071903.
- [86]. I.E. Orozco Hinostroza, M. Avalos-Borja, V.D. Compeán García, C. Cuellar Zamora, A.G. Rodríguez, E. López Luna, M.A. Vidal, *Journal of Crystal Growth* 435 (2016) 110–113
- [87]. Benmoussa Dennai, A Hemmani, H-Ben Slimane y A.Helmaoui, *International Journal of Engineering Research & Technology (IJERT)* Vol. 2 Issue 11, November – 2013.
- [88]. Nargis Akter, *IJRET: International Journal of Research in Engineering and Technology* eISSN: 2319-1163 | pISSN: 2321-7308 Vol. 03 | Jan-2014.
- [89]. A. Mesrane, F. Rahmoune, A. Mahrane y A. Oulebsir, *International Journal of Photoenergy*, Volume 2015, Article ID 594858, 9 pages.

Capítulo 2. Marco teórico

En este capítulo se muestra la teoría que sustenta a esta investigación, en este se describe el principio de funcionamiento de una celda solar, las características que éstas presentan así como las ecuaciones que en estas intervienen, además del modelo matemático para simulación de celdas solares.

2.1. Principio de funcionamiento de una celda solar.

La conversión de energía fotovoltaica es la producción directa de energía en forma de corriente y voltaje de la energía electromagnética que emite el sol (es decir, incluyendo infrarroja, visible y ultravioleta). Los cuatro pasos básicos necesarios para la conversión de energía fotovoltaica son:

1. Un proceso de absorción de luz que provoca una transición en un material desde un estado fundamental hasta un estado excitado.
2. La conversión del estado excitado en un par de portadores negativo libre y un par portador de carga positiva libre.
3. Un mecanismo de transporte discriminante, que hace que los portadores de carga negativa resultantes se muevan en una dirección (cátodo) y los portadores de carga positiva resultantes se muevan en otra dirección (ánodo).

Los portadores de carga negativa energizados y fotogenerados que llegan al cátodo dan como resultado electrones que viajan a través de una trayectoria externa (un circuito eléctrico). Mientras viajan por este camino, pierden su energía haciendo algo útil a una carga eléctrica y finalmente regresan al ánodo de la celda. En el ánodo, cada uno de los electrones que regresan completan el cuarto paso de conversión de energía fotovoltaica, que está cerrando el círculo.

4. Recombinación con un portador de carga positiva que llega, devolviendo de este modo el absorbedor al estado base.

En algunos materiales, el estado excitado puede ser un par hueco-electrón libres fotogenerados. En tal situación, al paso 1 y 2 se unen. En algunos materiales, el estado excitado puede ser un éxito, en cuyo caso los pasos 1 y 2 son distintos. En este trabajo nos enfocaremos a materiales que son fotogenerados un par electrón-hueco [1].

La absorción de luz genera un par electrón-hueco. El electrón y el hueco son entonces separados por la estructura del dispositivo-electrones a la terminal negativa y los huecos a la terminal positiva, generando así energía eléctrica.

Este proceso se ilustra en la figura 2.1 y 2.2 [2], donde muestra las principales características de las celdas solares típicas en uso en la actualidad. Un diagrama muestra la estructura física del dispositivo y los procesos de transporte eléctrico dominante que contribuyen al proceso de conversión de energía.

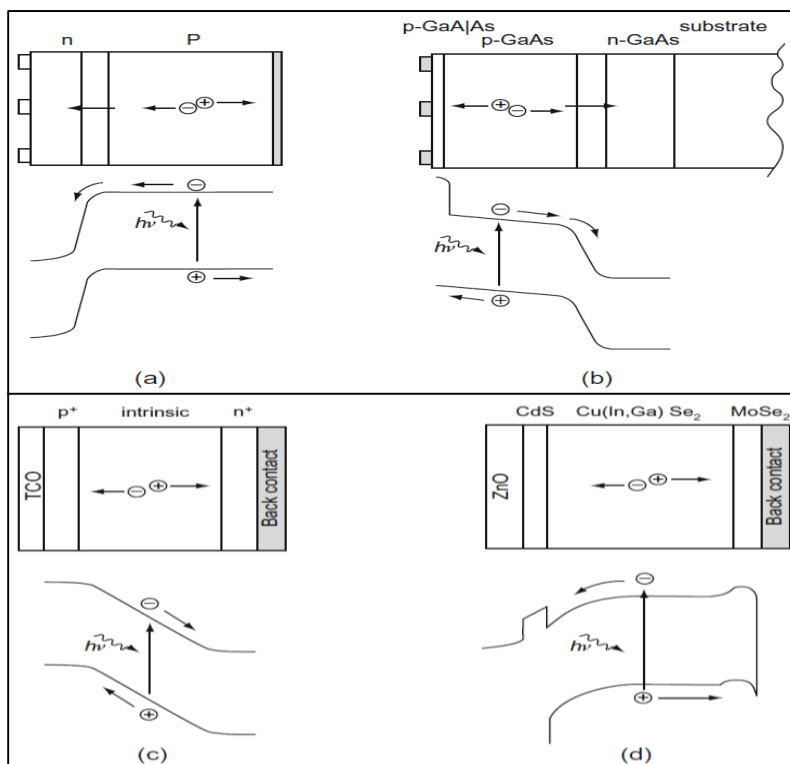


Figura 2. 1 (a) La estructura de CS de silicio cristalino, celda solar típica en uso hoy en día, b) CS de arseniuro de galio, c) estructura de una sola unión de CS de silicio amorfo.

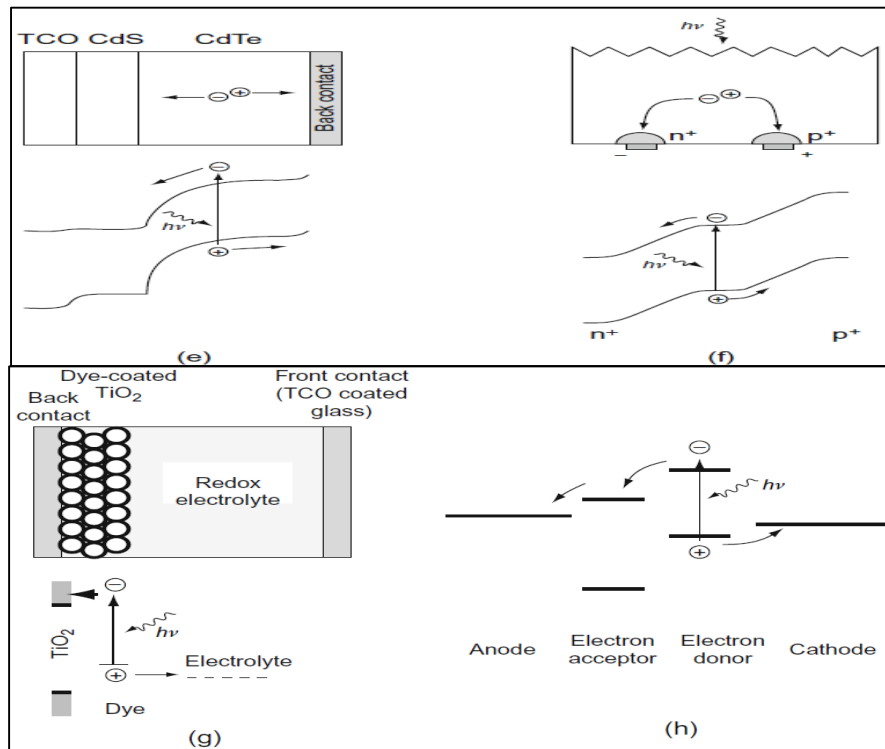


Figura 2. 2 d) y e) CS de semiconductores compuestos, f) contactos en CS, g) y h) CS basados en materiales moleculares.

La mayor parte de las celdas están formada por una base gruesa de tipo p en la que se absorbe la mayor parte de la luz incidente y se genera la mayor parte de la energía. Después de la absorción de la luz, los portadores minoritarios (electrones) se difunden a la unión donde son barridos a través de un campo eléctrico fuerte incorporado. La energía eléctrica se recoge mediante contactos metálicos en la parte delantera y trasera de la celda. (B) La celda solar típica de arseniuro de galio tiene lo que a veces se llama una estructura heterofacial, en virtud de la capa delgada de GaAlAs que cubre la superficie superior. La capa ventana de GaAlAs evita que los portadores minoritarios del emisor (electrones) alcancen la superficie y se recombinen, pero transmite la mayor parte de la luz incidente a la capa de emisor donde se genera la mayor parte de la potencia.

El funcionamiento de esta celda solar de unión p-n es similar en muchos aspectos al funcionamiento de la celda solar de silicio cristalino en (a), pero debe notarse la

diferencia sustancial en el espesor. (C) La estructura de una típica de una sola unión de celdas solares de silicio amorfo. Basándose en la unión p-i-n, esta celda contiene una capa de semiconductor intrínseco que separa dos regiones p y n fuertemente dopadas cerca de los contactos. La generación de electrones y huecos se produce principalmente dentro de la región de carga espacial, con la ventaja de que la separación de carga puede ser asistida por el campo eléctrico incorporado, mejorando así la eficiencia de recolección. Los contactos suelen estar formados por un óxido conductor transparente (TCO) en la parte superior de la celda y un contacto metálico en la parte posterior. Las características de captura de luz en TCO pueden ayudar a reducir el espesor y reducir la degradación.

El espesor de las celdas solares a-Si oscila normalmente de una fracción de micrómetro a varios micrómetros. (e) Las estructuras típicas de celdas solares basadas en semiconductores compuestos de cobre diseleniuro de indio-galio (d) y telurio de cadmio. La parte delantera de la unión está formada por un material de ancho de banda (ventana CdS) que transmite la mayor parte de la luz incidente a la capa absorbente (Cu (In, Ga) Se₂ o CdTe) donde virtualmente se producen pares electrón-hueco. El contacto superior está formado por un óxido conductor transparente. Estas celdas solares tienen típicamente unos pocos micrómetros de grosor. (F) Los contactos se pueden disponer en el mismo lado de la celda solar, como en este punto de contacto. Los pares de electrones-huecos se generan en el grueso de esta celda de silicio cristalino, que es casi intrínseca, usualmente ligeramente de tipo n. Debido a que esta celda es ligeramente más delgada que la celda solar de silicio cristalino habitual, la absorción de luz eficiente se ayuda aquí por la trampa de luz: una superficie superior texturizada y una superficie posterior reflectora. (G), (h) Los tipos más recientes de celdas solares están basados en materiales moleculares. En estas celdas, la luz es absorbida por una molécula de colorante, transfiriendo un electrón del estado fundamental a un estado excitado en lugar de la banda de valencia a la banda de conducción como en las celdas semiconductoras. El electrón se retira posteriormente a un aceptor de electrones y la deficiencia de electrones (huecos) en el estado fundamental se repone a partir de

un donador de electrones. Existen varias opciones para el aceptor de electrones y el donante.

En la celda sensibilizada por colorante, el donador de electrones es un electrolito reducido y el papel de aceptor de electrones es la banda de conducción de dióxido de titanio. En las celdas solares de plástico, tanto el donante de electrones como el aceptor de electrones son materiales moleculares [2].

2.2. Estructuras típicas de celdas solares.

2.2.1. Las celdas solares de unión p-n.

La conversión de energía fotovoltaica descrita anteriormente y los pasos que se requieren, se puede llevar a cabo gracias a la unión de dos materiales como a continuación se describe esta unión (n-p).

Al poner dos materiales en contacto, uno tipo p y otro tipo n, y observamos lo que sucede en la interfase entre ambos. En general, tanto los electrones como los huecos (cada uno en sus respectivas bandas) se estarán moviendo en todas direcciones, y por lo tanto al ponerse en contacto los dos materiales, uno con exceso de electrones (n) y otro con deficiencia de los mismos (p), veremos que en la banda de conducción habrá un flujo neto de electrones desde el material tipo n hacia el material tipo p. lo mismo ocurrirá en la banda de valencia con los huecos, pero en sentido inverso, es decir, los huecos se moverán desde la región tipo p hacia la n, como se ve en la figura 2.3 (a).

El proceso anterior de los flujos de portadores debido a la unión p-n, traen un desequilibrio de carga eléctrica en la interfase. En el material tipo n, las impurezas donadoras ionizadas positivamente no tendrán electrones cercanos que compensen su carga. De igual forma, en el material tipo p, las impurezas aceptoras ionizadas negativamente quedaran sin huecos que compensen su carga localmente. El flujo de portadores en la interfase trae consigo la aparición de regiones con carga neta

diferente de cero; por lo tanto, habrá una diferencia de potencial entre las regiones tipo n y p, por ello se genera un campo eléctrico dirigido desde la región n hacia la p, como se ilustra en la figura 2.3 (b).

La dirección del campo eléctrico es tal que tiende a oponerse a los flujos de electrones y huecos que originan el campo mismo. Y en la medida en que aumente la transferencia de electrones y huecos a través de la interfase, aumentara la intensidad del campo eléctrico, el cual tendrá a oponerse al flujo mismo de los portadores de carga libres. Después de un tiempo se alcanzara un nuevo estado de equilibrio: los portadores de carga libre tienen una barrera de potencial que se llamara en este caso V_{bi} como se en el la figura 2.3 (c).

Dicha barrera de potencial es tal que en estas condiciones ya no habrá un flujo neto de portadores en la interfase, de forma que se tiene un equilibrio dinámico que podrá romperse fácilmente, ya sea mediante un voltaje aplicado externamente, o por cualquier otro agente perturbador como la radiación electromagnética del sol, lo cual causa el efecto fotovoltaico.

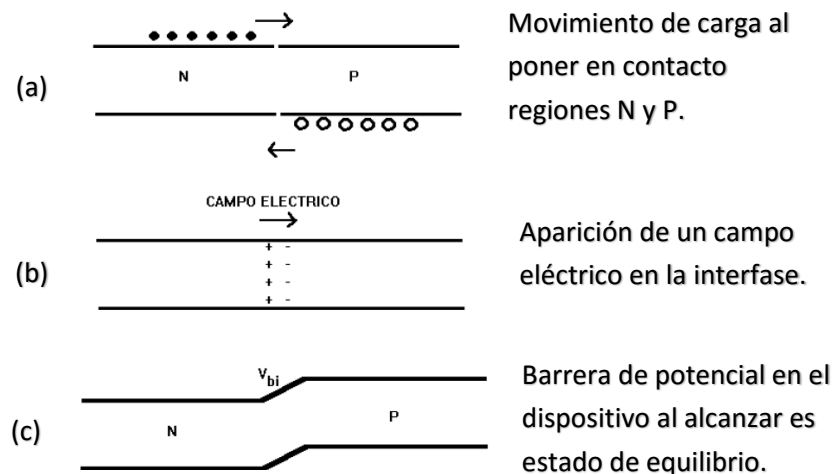


Figura 2.3 (a) representación de semiconductor tipo n y p al ponerse en contacto. (b) debido a la transferencia de carga entre estos aparece un campo eléctrico, hasta que (c) se alcanza un nuevo estado de equilibrio cuando el campo es suficientemente intenso para que ya no fluyan los portadores de carga en la interfase [3].

Al poner en contacto dos semiconductores de tipo diferente (n) y (p), sucede los fenómenos anteriormente descritos, pero la aparición del campo eléctrico en la interfase, se establece de forma que se alcanza el equilibrio interno, evitando cualquier flujo neto de portadores libres en las bandas de conducción y de valencia del semiconductor, cuando no hay perturbación externa alguna figura 2.4. Pero al polarizarlo directamente (figura 2.5a) el campo se reduce y por lo tanto ya no puede evitar los flujos de portadores que causan una corriente eléctrica a través del dispositivo. En tal caso, se observa que la corriente aumenta exponencialmente con el voltaje. Y para el caso de polarizar inversamente un diodo p-n. Es decir el campo eléctrico interno se verá acrecentado por el voltaje externo, de forma que se opone con mayor fuerza al flujo de electrones y huecos; por lo tanto, prácticamente no observaremos corriente alguna (en realidad habrá una corriente muy pequeña llamada corriente de saturación en oscuridad o corriente de fuga) figura 2.5b [3].

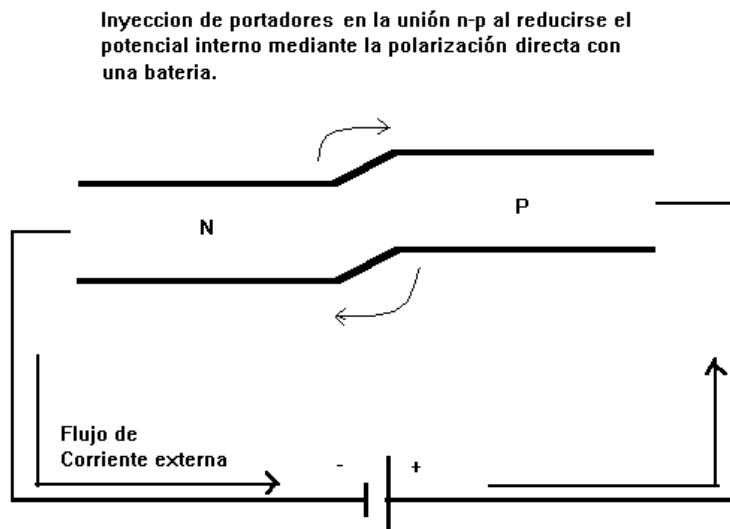


Figura 2. 4 Flujo de corriente en una unión de materiales tipo n y p cuando se aplica una polarización directa, El campo eléctrico interno se reduce. Cuando el diodo se polariza inversamente el campo interno se refuerza y se opone al movimiento de electrones y huecos por lo que no fluiría corriente (idealmente).

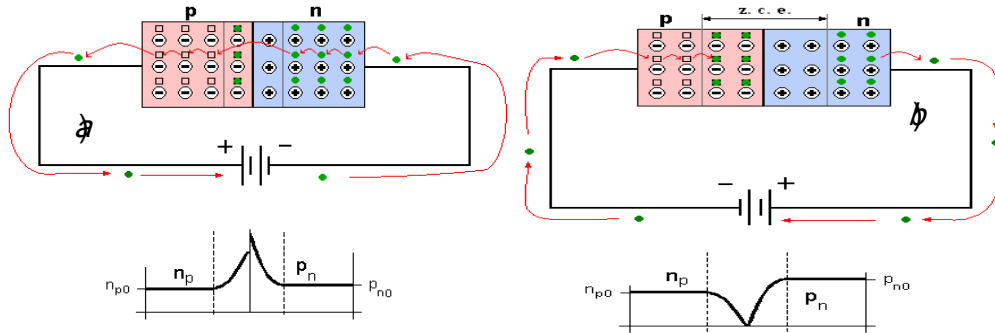


Figura 2.5 Esquema de polarización directa a) y b) polarización inversa en una unión p-n

2.3. Características eléctricas.

2.3.1. La celda solar ideal.

Una celda solar ideal puede ser representada por una fuente de corriente conectada en paralelo con un diodo rectificador, como se muestra en el circuito de la figura 2.6, la curva característica $I-V$ es descrita por la celda solar Shockley (ecuación 1).

$$I = I_{ph} - I_0 \left(e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right) \quad (1)$$

Donde k_B es la constante de Boltzman, T es la temperatura absoluta, q (>0) es la carga del electrón y V es la tensión en las terminales de la celda. I_0 es la corriente de saturación [4]. La corriente fotogenerada I_{ph} está estrechamente relacionada con el flujo de fotones incidentes en la celda y su dependencia de la longitud de onda de la luz se da frecuentemente en términos de rendimiento cuántico o respuesta espectral. La corriente fotogenerada suele ser independiente de la tensión aplicada con posibles excepciones en el caso del Si-a y algunos otros materiales de película delgada [5-7].

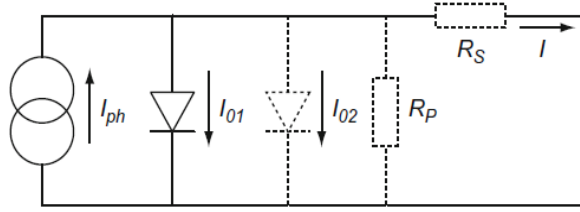


Figura 2. 6 Circuito equivalente de una celda solar ideal (líneas llenas). Los componentes no ideales se muestran con líneas punteadas.

En la figura 2.7 se muestra la curva $I - V$ característica de una celda solar. En el caso ideal, la corriente de cortocircuito I_{sc} es igual a la corriente fotogenerada I_{ph} y la tensión de circuito abierto V_{oc} está dada por:

$$V_{oc} = \frac{k_B T}{q} \ln \left(1 + \frac{I_{ph}}{I_0} \right) \quad (2)$$

Además en la figura 2.7, se muestran los posibles puntos de operación de la celda $I - V$, se muestra la densidad de corriente de cortocircuito I_{sc} la tensión de circuito abierto V_{oc} y el punto de máxima potencia, este punto de funcionamiento proporciona el producto de tensión y densidad de corriente máxima que puede obtenerse. Por lo tanto, la mejor eficiencia termodinámica η del proceso de conversión de energía fotovoltaica para la celda es [3]:

$$\eta = \frac{FF(I_{sc}, V_{oc})}{P_{IN}} \quad (3)$$

Donde P_{IN} es la potencia de entrada por área.

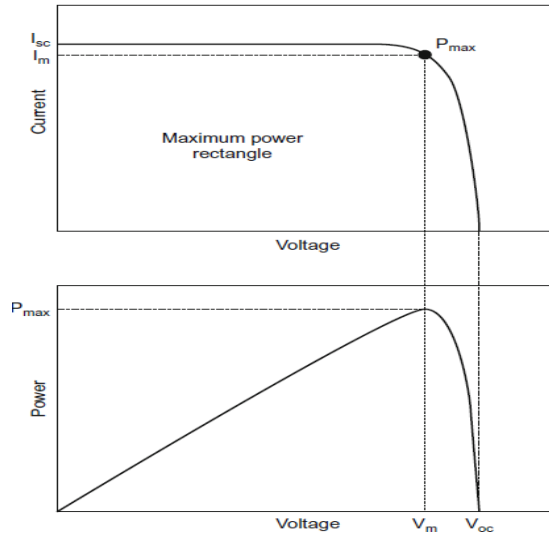


Figura 2. 7 Curva $I-V$ Característico de una celda solar ideal (a) y la potencia producida por la celda (b). La potencia generada en el punto de potencia máxima es igual al rectángulo sombreado en (a).

En la figura 2.8 se ve el esquema de una celda solar típica, con sus componentes principales para su funcionamiento.

Los valores máximos teóricamente alcanzables de la densidad de corriente de cortocircuito J_{ph} y de la corriente de circuito abierto para diferentes materiales se ven en la figura 2.6b. La potencia $P = IV$ producida por la celda se muestra en la figura 2.6b. La celda genera la potencia máxima (P_{max}) a una tensión V_m y corriente I_m y se define el factor de llenado para medir la proximidad de una característica dada a la forma rectangular I-V ideal, y el factor de llenado viene dado por:

$$FF = \frac{I_m V_m}{I_{sc} V_{oc}} = \frac{P_{max}}{I_{sc} V_{oc}} \quad (4)$$

Por definición, $FF \leq 1$.

El factor de llenado FF de una celda solar con la característica ideal será proporcionado por el subíndice 0. No se puede determinar analíticamente, pero

muestra que el FF_0 depende solo de la relación $v_{oc} = V_{oc}/k_B T$. FF_0 es determinado a una excelente precisión, por la expresión [6].

$$FF_0 = \frac{v_{oc} - \ln(v_{oc} + 0.72)}{v_{oc} + 1} \quad (5)$$

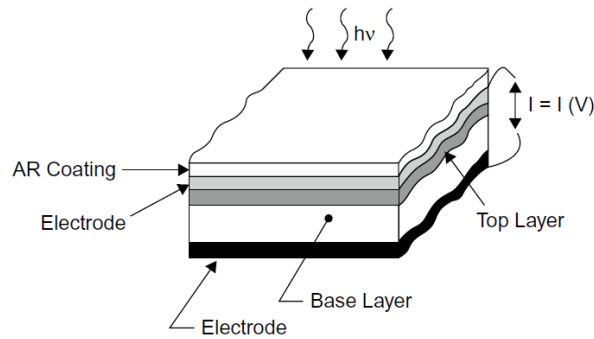


Figura 2. 8 Corte transversal de una celda solar típica. El área de impacto de fotones y el área de producción son los mismos. El recubrimiento anti-reflexión (AR) tiene la función de reducir pérdidas por reflexión [1].

Las características $I-V$ de una celda solar ideal cumplen con el principio de superposición: la dependencia funcional se puede obtener a partir de la característica correspondiente de un diodo en la obscuridad desplazando la característica de diodo a lo largo del eje de corriente por I_{ph} (figura 2.9) [8].

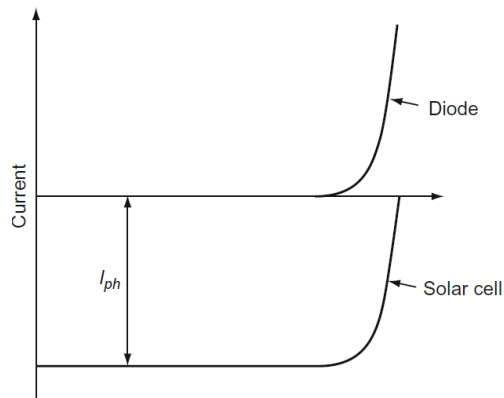


Figura 2.9 Principio de superposición para una celda solar

2.4. Simulación numérica de celdas solares.

La física del transporte de dispositivos puede ser capturada en tres ecuaciones de principales que son: la ecuación de *Poisson*, la ecuación de continuidad para huecos libres y la ecuación de continuidad para electrones libre, la determinación de las características de transporte en un dispositivo de celda solar se convierten en la tarea de resolver estas tres ecuaciones diferenciales no lineales sujetas cada una a condiciones de contorno apropiadas. A continuación se describe las ecuaciones antes mencionadas y de los parámetros involucrados en la operación de una celda solar.

2.4.1. Procesos de absorción.

A continuación se presentan las interacciones de los fotones con los sólidos que dan lugar a la absorción de estos. En la figura 2.10 es un esquema que muestra los diversos procesos en la absorción de la radiación electromagnética en los sólidos y su rango de influencia. El proceso 1 es la absorción de portadores libres; surge de transiciones de electrones (o huecos) inducidas por fotones dentro de una banda de un estado de una sola partícula a otra. Estas transiciones intrabandas, representadas en la figura 2.10, son importantes en metales y semiconductores siempre que haya una densidad significativa de portadores en una banda. Las transiciones intrabandas que se ven en la figura 2.11 estarían prohibidos en los sólidos cristalinos (debido a la conservación k), si no fuera por los procesos de dispersión (debidos a impurezas, defectos, fonones) que permiten la conservación del momento. En el proceso 2 es la absorción de fonones; es decir, la luz es absorbida por modos de fonon en la excitación en un material. Los electrones no están involucrados en este proceso. Debido a las bajas energías poseídas por los fotones, este proceso de absorción ocurre en la región infrarroja del espectro de luz.

En el proceso 3 incluye todas las transiciones inducidas por fotos entre estados en intervalo así como entre estados de una banda. Las transiciones de este ejemplo se muestran en la figura 2.11d y e. en el paso 4 es la absorción que producen excitones.

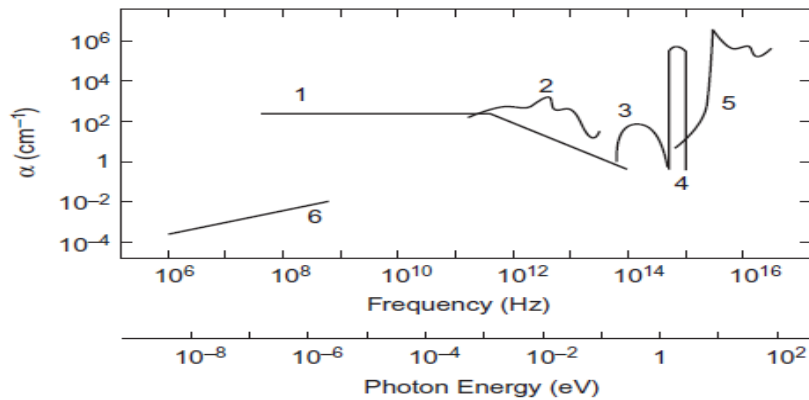


Figura 2.10 Representación esquemática de la gama de procesos de absorción óptica en sólidos.

Los excitones también pueden desempeñar el papel clave en la absorción en nanopartículas. El proceso 5 es las transiciones de banda-banda, que se observa en la figura 2.9. Y por último el proceso 6 es una pérdida que se observa en algunos materiales amorfos; probablemente se produce debido a los electrones que están saltando desde un sitio localizado a otro [9].

El coeficiente de absorción $\alpha(\lambda)$ o equivalente ha $\alpha(\nu)$, es crítico para el rendimiento de las celdas solares. Las contribuciones de los procesos 3, 4 y 5 (de la figura 2.9) a α son los mecanismos representativos porque pueden conducir electrones y huecos libres. Aunque el proceso 4 o 5 incluso ambos estarán presentes en un material absorbente, el proceso 3 puede o no estar presente en absoluto. Podemos definir una función $G(\lambda, x)$, que determina el número del proceso 3, 4 o 5, acontecimientos que tienen lugar en x por volumen o por tiempo por ancho de banda. Este ancho de banda está alrededor de la longitud de onda λ de la luz que impacta sobre el material absorbente.

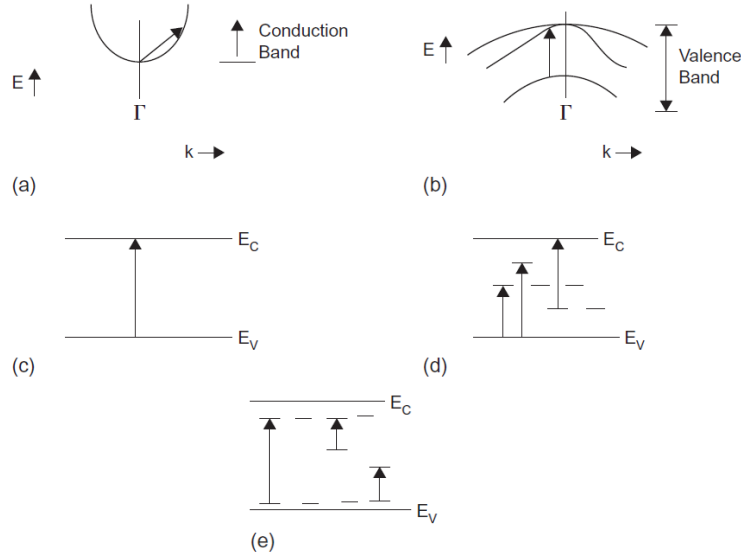


Figura 2.11 Transiciones electrónicas entre estados de un solo electrón que dan lugar a la absorción de la luz: (a, b) las transiciones de portador libre (intrabanda) dan lugar al Proceso 1 de la Figura 2.8; las transiciones de banda a banda dan lugar al Proceso 5; (D, e) las transiciones de estado localizadas en banda y las transiciones de estado localizadas-estado-localizadas son la fuente del Proceso 3. El tipo de Proceso 3 visto en (d) puede dar lugar a portadores libres.

Se puede demostrar que $G(\lambda, x) \propto \alpha(\lambda, x)\xi^2(\lambda, x)$ donde $\xi^2(\lambda, x)$ es el campo eléctrico (luz óptica) de la luz de la longitud de onda λ en el punto x del espectro solar [10].

Si los efectos de onda de reflexión y de interferencia no son importantes en una estructura de celda solar, se espera que la luz monocromática que ingresa en el absorbedor de la celda en $X = 0$ con intensidad $I_0(\lambda)$ (fotones por área y por ancho de banda) la intensidad $I(\lambda, x)$ en algún punto x del material está dado por [9],

$$I(\lambda, x) = I_0(\lambda)e^{-\alpha(\lambda)x} \quad (6)$$

Esta ecuación se conoce como la ley de Beer-Lambert. Cuando esta expresión, es válida, permite que $G(\lambda, x)$ se escribe como:

$$G(\lambda, x) = \alpha(\lambda)I_0(\lambda)e^{-\alpha(\lambda)x} \quad (7)$$

Ya que la derivada de la ecuación (2) da los fotones perdidos. Esta comparación la expresión general anterior muestra que la ley Beer-Lambert se basa en que $\xi^2(\lambda, x)$ cae exponencialmente en un material, como era de esperar si se desprecia la reflexión interna, la dispersión y la interferencia.

El comportamiento detallado de α por encima del borde de la banda absorción fundamental en estos solidos se ve en la figura 2.12, donde se representa los estados de electrones de una sola partícula disponible, en función del vector de momentum k , en un gap directo (GaAs) y en un semiconductor de gap indirecto (Si). En un material con ancho de banda directa, se puede excitar un electrón desde la parte superior de la banda de valencia hasta el fondo de la banda de conducción, sin ningún cambio en el vector de onda k .

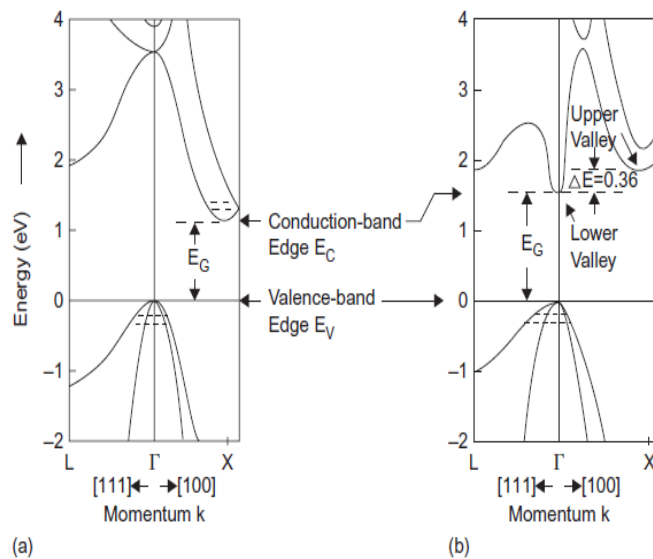


Figura 2. 12 Energías permitidas frente a vectores K (vector de onda) para dos semiconductores cristalinos e inorgánicos: a) silicio; b) arseniuro de galio.

El silicio es de banda prohibida indirecta (el máximo en la banda de valencia E_V y el mínimo en la banda de conducción E_C tienen diferentes valores k); El arseniuro de galio es de brecha directa (el máximo en la banda de valencia E_V y el mínimo en la banda de conducción E_C tienen el mismo valor k). Los bordes de la banda de valencia se alinean aquí en energía sólo por conveniencia [11].

Para contribuir a la transición, no hay ninguna dificultad en la conservación del vector k en las interacciones electrón -fotón que resulta en un electrón cuando es excitado de una banda de energía directa. Este no es el caso para un material con ancho de banda indirecta, como se muestra de la misma manera en la figura 2.10. En este caso, un electrón excitado a través de una banda de energía indirecta debe cambiar su vector k . el fotón no puede suministrar la suficiente energía para llevar a cabo la transición; por lo que la participación del fonon es necesario para llevar a cabo este proceso.

2.4.2. Ecuación de Poisson.

Una celda solar tiene diferentes procesos que suceden dentro: generación, recombinación, flujos de corriente y algunas cargas atrapadas. El campo eléctrico es modificado por las corrientes de fluyen y la carga en los estados deslocalizados, las trampas y los centros de recombinación. Toda esta actividad se incluye en la ecuación de Poisson.

La ecuación de Poisson relaciona poblaciones de portadores libres, poblaciones de carga atrapada y poblaciones de dopantes ionizados con el campo electrostático presente en un sistema material. En el espacio unidimensional, la ecuación de Poisson es dada por:

$$\frac{d}{dx} \left(-\varepsilon(x) \frac{d\Psi'}{dx} \right) = q \cdot [p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + pt(x) - nt(x)] \quad (8)$$

Donde Ψ' es el potencial electrostático, n los electrones libres, p huecos libres, nt electrones atrapados y pt los huecos atrapados, así como las concentraciones de donores N_D y aceptores N_A similares a los aceptores ionizados, son todas funciones de posición x , ε es la permitividad y q es la magnitud de carga del electrón [11].

Para la derivación del diodo ideal N_A se supone constante en la región p y cero en la región n. de forma similar, N_D se supone constante en la región n y cero en la región p [12].

Dado que los diagramas de bandas, muestran las energías permitidas a los electrones y el potencial electrostático Ψ' es definido para una partícula unitaria positiva, el uso de Ψ' en la ecuación anterior puede ser inconveniente. El nivel de vacío local E_{vL} que es la energía superior o de escape de la banda de conducción (en la figura 2.12 se muestra un esquema de una barrera Schottky), solo varia con la presencia de un campo electrostático [13]. Por lo tanto, su derivada es proporcional al campo electrostático ξ . De hecho, si se mide la posición del nivel de vacío local a partir de una referencia usando la cantidad Ψ medida en eV.

Entonces $\xi = d\Psi / dx$. Como se ve en la figura 2.13 el ejemplo de una barrera Schotky Ψ , se ve como una cantidad negativa en gran parte de la capa de contacto posterior n+ y una cantidad positiva a través del resto del dispositivo. Utilizando esta manera de localizar el nivel vacío local y recordando que su derivada espacial es el campo electrostático nos permite reescribir la ecuación de Poisson en términos del nivel e vacío local Ψ medido en eV.

$$\frac{d}{dx} \left(\varepsilon(x) \frac{d\Psi}{dx} \right) = q \cdot [p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + pt(x) - nt(x)] \quad (9)$$

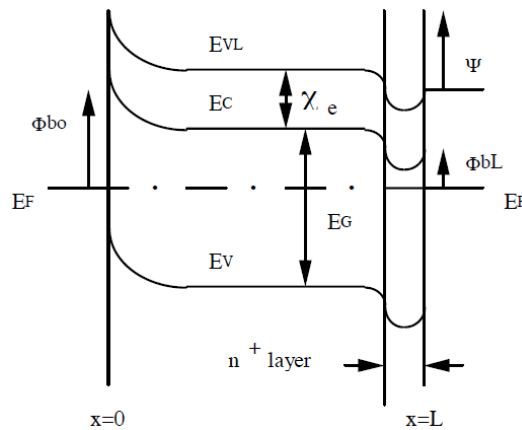


Figura 2. 13 Diagrama de bandas de una barrera Schottky en equilibrio termodinámico.

En los siguientes temas se describen las expresiones para las variables dependientes n , p , n_t , p_t , N_D^+ y N_A^+ , que son variables que están en la ecuación de Poisson.

2.4.3. Las poblaciones de estados deslocalizados (banda n y p).

Suponiendo que existe una relación parabólica entre la densidad de estados $N(E)$ de los estados deslocalizados de las bandas y la energía E - medida positivamente alejándose de cualquier borde de banda existe tal que $N(E) \propto E^{1/2}$ la concentración de portadores libres en equilibrio termodinámico o bajo un cambio de tensión, cambio de luz, o ambos se calculan utilizando las expresiones generales [13].

$$n = N_c F_{1/2} \exp\left(\frac{E_F - E_c}{kT}\right) \quad (10)$$

$$p = N_v F_{1/2} \exp\left(\frac{E_v - E_F}{kT}\right) \quad (11)$$

En estas expresiones N_c y N_v son las densidades efectivas de bandas de estados para las bandas de conducción y de valencia, respectivamente. Estos parámetros son variables en función del material. Para los materiales cristalinos están dados por:

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (12)$$

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (13)$$

Donde m_n^* es la masa efectiva del electrón, m_p^* es la masa efectiva del hueco, k es la constante de Boltzman y h es la constante de Planck.

La integral de Fermi de orden medio se define como,

$$F_{1/2}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{E^{1/2} dE}{1 + \exp(E - \eta)} \quad (14)$$

Donde $E^{1/2}$ el argumento de la integral de Fermi, η es expresado como:

$$\eta_n = \left(\frac{E_F - E_c}{kT} \right) \quad (15)$$

Para electrones libres y para huecos libres,

$$\eta_p = \left(\frac{E_v - E_F}{kT} \right) \quad (16)$$

Notamos que para $\eta_n > 3$ o $\eta_p > 3$ la función $F_{1/2}$ se reduce a los correspondientes factores de Boltzman [13].

$$\exp\left(\frac{E_F - E_c}{kT}\right) \quad (17)$$

O

$$\exp\left(\frac{E_v - E_F}{kT}\right) \quad (18)$$

El nivel de fermi es un término utilizado para describir la parte superior del conjunto de niveles de energía de electrones a la temperatura de cero absoluto.

2.4.4. Ecuación de continuidad.

En la sección anterior se describió la ecuación de Poisson donde se definen las expresiones en función de términos de las poblaciones de portadores libres de electrones (n) y huecos (p). Ahora se presentan información más detallada sobre los portadores n y p en base a las ecuaciones de continuidad para electrones en la banda de conducción y huecos de la banda de valencia, para determinar cómo cambia a través de un dispositivo y bajo tensiones diferentes. En estado estacionario, el tiempo de la tasa de cambio de las concentraciones de portadores

libres es igual a cero. Como resultado, la ecuación de continuidad para electrones libres en los estados deslocalizados de la banda de conducción tiene la forma:

$$\frac{1}{q} \left(\frac{dJ_n}{dx} \right) = -G_{op}(x) + R(x) \quad (19)$$

Y la ecuación de continuidad para huecos libres deslocalizados de la banda de valencia tiene la forma:

$$\frac{1}{q} \left(\frac{dJ_p}{dx} \right) = G_{op}(x) - R(x) \quad (20)$$

Donde J_n y J_p son la densidad de corriente de electrones y huecos respectivamente. El termino $R(x)$ es la tasa neta de recombinación resultante de la recombinación banda-banda (directa) y el tráfico de recombinación S-R-H (indirecta) a través de intervalos de estados. Las ecuaciones de continuidad incluyen el termino $G_{op}(x)$ que es la tasa de generación óptica en función de x debido a iluminación externamente impuesta [13].

2.5. Densidad de corriente de electrones y huecos.

Anteriormente se han descrito términos para para la ecuaciones como la de Poisson, ahora se describen las dos ecuaciones de continuidad. Retomando J_n y J_p , se nota que la teoría de transporte permite que incluso en los caso en que la población de electrones pueda degenerarse o el material pueda variar sus propiedades con la posición, la densidad de corriente electrónica J_n puede expresarse como;

$$J_n(x) = q\mu_n n \left(\frac{dE_{f_n}}{dx} \right) \quad (21)$$

Donde μ_n es la movilidad del electrón y n es definida en la ecuación 10.

De manera similar, en los casos en que las poblaciones de huecos pueden ser degenerados o las propiedades del material pueden variar con la posición, la densidad de corriente de huecos puede expresarse simplemente por

$$J_p(x) = q\mu_p p \left(\frac{dE_{fp}}{dx} \right) \quad (22)$$

Donde μ_p es la movilidad de huecos y p se define en la ecuación 2.1.1b. si es importante notar que la ecuación 21 y 22 son la formulaciones muy generales que incluye difusión, deriva y movimiento debido a campos efectivos que surgen del ancho de banda, la afinidad electrónica y los gradientes de densidad de estados [13].

2.6. Mecanismos de recombinación.

Hay algunos procesos básicos en los cuales los electrones y huecos pueden recombinarse uno con el otro. En el primero proceso, los electrones en la banda de conducción hacen transiciones directas a estados vacíos en la banda de valencia. Este proceso se denomina como recombinación banda-banda o directa R_D (también conocida como recombinación intrínseca). En el segundo proceso, los electrones y los huecos se recombinan a través de los estados de intervalo intermedio conocidos como centros de recombinación. Proceso investigado originalmente por Shockley, Read y Hall (SRH), se denomina recombinación indirecta R_I o recombinación S-R-H (también conocida como recombinación extrínseca). En las ecuaciones de continuidad toma en consideración ambos procesos, de manera que la recombinación neta $R(x)$ se define como,

$$R(x) = R_D(x) + R_I(x) \quad (23)$$

A continuación se describen tales procesos, así como el tercer proceso de recombinación llamado Auger.

2.6.2. Recombinación directa (banda a banda).

La recombinación directa banda-banda o recombinación radiativa neta, dado que este proceso de recombinación implica tanto los electrones ocupados en la banda de conducción como los estados vacíos huecos en la banda de valencia, puede expresarse como [13].

$$\mathfrak{R}^R = \left(\frac{g_{th}^R}{n_i^2} \right) (pn - n_i^2) \quad (24)$$

Donde n_i^2 , es el cuadrado de la densidad intrínseca de los números, es siempre igual a $n_0 p_0$ (el subíndice cero se refiere a los valores en equilibrio termodinámico (ET), si un material es intrínseco o extrínseco [14]. Las dimensiones de \mathfrak{R}^R (de huecos o electrones libres) aniquilados en volumen por tiempo. \mathfrak{R}^R es cero en ET, es decir la tasa de generación debe ser igual a la tasa de recombinación, n y p son las concentraciones de portadores presentes en las bandas.

Si un material es de tipo p y si, incluso bajo iluminación p es esencialmente p_0 , entonces se puede escribir como:

$$\mathfrak{R}^R = \left(\frac{g_{th}^R}{n_i^2} \right) (np_0 - n_0 p_0) \quad (25)$$

Definiendo a $\left[p_0 g_{th}^R / n_i^2 \right]^{-1}$ como τ_n^R finalmente la ecuación anterior se escribe,

$$\mathfrak{R}^R = \frac{n - n_0}{\tau_n^R} \quad (26)$$

Donde τ_n^R es la llamada tiempo de vida de recombinación radiativa electrónica o simplemente vida del electrón, n_0 y p_0 son las concentraciones de portadores en el equilibrio termodinámico. De manera similar, para un material de tipo n se deduce la ecuación para este:

$$\Re^R = \frac{P - P_0}{\tau_p^R} \quad (27)$$

2.6.3. Recombinación Shockley-Read-Hall (S-R-H).

El segundo proceso por el cual los electrones libres y huecos pueden relajarse a energías más bajas y recombinarse implica la emisión de un fonon. La recombinación a través de defectos, también llamada recombinación SRH, no ocurre en materiales perfectamente puros, no defectuosos. Este tipo de recombinación es un proceso de dos pasos que son:

- Un electrón (o hueco) queda atrapado por un estado de energía en la región prohibida que se introduce a través de defectos en la red cristalina (material extrínseco). Estos defectos pueden introducirse involuntariamente o añadirse al dopar el material.
- Si un hueco (o electrón) se mueve hasta el mismo estado de energía antes de que el electrón sea re-emitido térmicamente en la banda de conducción, entonces sucede la recombinación.

La velocidad a la cual un portador se mueve al nivel de energía en el espacio prohibido depende de la distancia del nivel de energía introducido desde cualquiera de los bordes de las bandas. Por lo tanto, si una energía se introduce cerca de los bordes de la banda, la recombinación es menos probable, ya que es probable que el electrón sea re-emitido al borde de la banda de conducción en lugar de recombinarse con un hueco que se mueve en el mismo estado de energía de la banda de valencia [15-16].

Los portadores de carga pueden entregar su energía en colisiones con la entidad física que da lugar a este nivel localizado y quedar atrapado por ella. La energía puede ser liberada en este evento de colisión (atrapamiento) como fonones o fotones o ambos. La captura de un electrón es lo que se denomina recombinación asistida estadísticamente. Utilizamos el símbolo \Re^L para la tasa neta de

recombinación de tales procesos. Este mecanismo es el que se ha denominado recombinación SRH [14].

Entonces deducimos que la recombinación neta de los estados de intervalo a la energía E, se puede expresar en estado estacionario como:

$$\mathfrak{R}^L = \frac{v\sigma_n\sigma_p N_T (np - n_i^2)}{\sigma_p(p + p_1) + \sigma_n(n + n_1)} \quad (28)$$

Donde σ_n es la sección transversal de captura (atracción) de estos estados para el electrón y σ_p es la sección transversal de captura (atracción) para huecos. Si un material es de tipo p y si, incluso bajo iluminación, p es esencialmente p_0 , entonces la ecuación anterior se escribe como,

$$\mathfrak{R}^L = \frac{v\sigma_n\sigma_p N_T (np_0 - n_0 p_0)}{\sigma_p(p_0 + p_1) + \sigma_n(n + n_1)} \quad (29)$$

O como

$$\mathfrak{R}^L = \frac{v\sigma_n\sigma_p N_T p_0 (n - n_0)}{\sigma_p(p_0 + p_1) + \sigma_n(n + n_1)} \quad (30)$$

Definiendo $\tau_n^L = [v\sigma_n\sigma_p N_T p_0 / \sigma_p(p_0 + p_1) + \sigma_n(n + n_1)]^{-1}$ y suponiendo que no depende fuertemente de n se puede finalmente escribir de forma linealizada como:

$$\mathfrak{R}^L = \frac{n - n_0}{\tau_n^L} \quad (31)$$

Donde τ_n^L es la llamada tiempo de vida de recombinación del electrón SRH o simplemente la vida del electrón, si este es el mecanismo de recombinación dominante. De manera similar, si un material es de tipo n sucede lo mismo con la expresión, se deduce que la ecuación se escribe como:

$$\mathfrak{R}^L = \frac{p - p_0}{\tau_p^L} \quad (32)$$

Donde $\tau_p^L = \left[v\sigma_n\sigma_p N_T n_0 / \sigma_p(p+p_1) + \sigma_n(n_0+n_1) \right]^{-1}$ es el tiempo de vida de recombinación de huecos o simplemente vida de huecos, se supone que no depende fuertemente de p , si este es el mecanismo de recombinación dominante.

Las ecuaciones anteriores para la recombinación SRH se han escrito para un grupo de estados localizados en alguna energía E en el espacio. Si está presente una distribución de estado de separación, debe haber estados correspondientes para los otros estados de separación en otras energías. Por lo tanto, la recombinación SRH total debe ser la suma de todas estas contribuciones. Esto requiere que las ecuaciones anteriores se conviertan en sumas sobre la distribución.

2.6.4. Recombinación Auger.

Las características distintivas de un mecanismo Auger es que los electrones y huecos o excitones toman energía o dan energía a otros electrones y huecos o excitones. Hay muchos tipos de procesos Auger. El proceso (a) de la figura 2.12 ([17] muestra un proceso de recombinación Auger de electrón-hueco en el cual un electrón pasa de la banda de conducción a la banda de valencia, dando su energía a otro electrón en la banda de conducción. Esperamos que la tasa de recombinación de Auger r_A^A para que esta trayectoria obedezca $r_A^A = A_{1A}^A n^2 p$. el proceso de generación correspondiente tiene un electrón energético en la banda de conducción que se relaja al borde de la banda y genera un par electrón-hueco con la energía liberada. Puede ser modelado como $g_A^A = A_{2A}^A n$. este proceso de generación correspondiente a menudo se llama ionización por impacto [14]. El proceso (b) de la figura 2.12b muestra el proceso equivalente de recombinación Auger para un caso en el que un hueco absorbe la energía.

Se esperaría entonces que $r_B^A = A_{1B}^A np^2$ para esta trayectoria. El proceso de generación correspondiente tiene un hueco energético en la banda de valencia que se relaja al borde de la banda y genera un par de electrón-hueco con la energía liberada. Puede ser modelado como $g_B^A = A_{2B}^A p$. Esto también puede denominarse

ionización de impacto. Los procesos (c)-(f) no son, por si mismos, procesos de recombinación, ya que un par de electrón-hueco no desaparece. En (c)-(e) puede obtener portadores dentro o fuera de estados localizados; es decir, causa el atrapamiento o el retiro de la trampa. El proceso (f) permite que un portador atrapado caiga a niveles de energía más bajo. Las partes (c), (d) y (f) de la figura muestran los análogos del estado localizado al proceso (a) con $r_C^A = A_{1C}^A n^2 p_T$, $r_D^A = A_{1D}^A \tilde{n}_T n p$ y $r_F^A = A_{1F}^A n \tilde{n}_T p_T$. El proceso (e), que da como resultado la separación de dos portadores, puede ser modelado por $r_E^A = A_{1E}^A \tilde{n}_T^2 p$.

Como se ve en la figura 2.14, hay dos procesos de recombinación Auger de portadores libres. Desarrollando un modelo usando el principio de equilibrio detallado para relacionar A_{1A}^A con A_{2A}^A para el proceso (a) y a la relación A_{1B}^A con A_{2B}^A para el proceso (b). Estas relaciones, con algún algebra directa, permite entonces la recombinación neta para el proceso (a), \mathfrak{R}^{AA} y la recombinación neta para el proceso (b), \mathfrak{R}^{AB} que se escribe como:

$$\mathfrak{R}^{AA} = A_{2A}^A \left[\frac{n^2 p}{n_0 p_0} - n \right] \quad (33)$$

Y

$$\mathfrak{R}^{AB} = A_{2A}^A \left[\frac{p^2 n}{n_0 p_0} - p \right] \quad (34)$$

La fuerte dependencia observada en las ecuaciones anteriores en n o p significa que la recombinación Auger puede llegar a ser dominante en celdas solares con altas concentraciones de portadores.

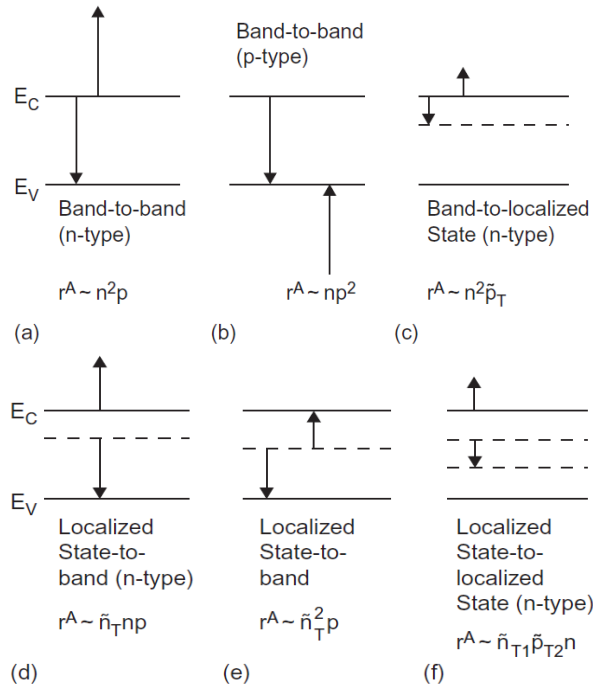


Figura 2. 14 Algunos posibles procesos de transición Auger [1].

En la figura 2.13 se indica la dependencia de las diferentes trayectorias de perdida de energía en las diversas densidades numéricas aplicadas. Aquí \tilde{P}_T da el número de estados localizados vacíos a la energía E por volumen y \tilde{p}_T da el número de estados localizados ocupados a la energía E por volumen [17].

De las expresiones anteriores para la recombinación Auger pueden ser representadas por un modelo linealizado y que pueden escribirse como,

$$\mathfrak{R}^A = \frac{n - n_0}{\tau_n^A} \quad (35)$$

Y para material p como,

$$\mathfrak{R}^A = \frac{n - n_0}{\tau_n^A} \quad (36)$$

Para material tipo n, cuando esto se hace τ_n^A y τ_p^A son las vidas de Auger de electrones y huecos.

2.7. Transporte.

2.7.1. Mecanismos de transporte de masa en sólidos.

Los semiconductores como compuesto de una masa y la interfaz (por ejemplo contactos y frontera de grano) nos permiten abordar el transporte sistemáticamente en estas regiones. El modelado de la banda de conducción de la región en masa y del transporte en la banda de valencia se describe con las ecuaciones siguientes donde por conveniencia se utiliza términos de deriva y difusión respectivamente. En materiales policristalinos, el transporte intragrano de deriva-difusión puede estar en serie con procesos de inyección, recombinación o tunelamiento en las fronteras de grano. Para materiales nanocristalinos, un modelo de difusión de deriva puede ser suficiente utilizado una movilidad efectiva, que depende del tamaño de grano [1].

2.7.2. Transporte de masa en las bandas de conducción y de valencia.

En general, el transporte de carga tiene lugar tanto en los electrones en la banda de conducción como de huecos en la banda de valencia en un semiconductor.

Podemos notar que n, es el número de electrones por volumen en la banda de conducción y p, el número de huecos por volumen en la banda de valencia, son, en general, definidos por:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \frac{g_e^c(E)dE}{[1 + \exp(E - E_{Fn}) / kT_n]} \quad (37)$$

Y

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} \frac{g_e^v(E) dE}{[1 + \exp(E_{Fp} - E) / kT_p]} \quad (38)$$

Aquí $g_e^c(E)$ es la densidad de estados de un solo electrón por volumen $g_e(E)$ para la banda de conducción y $g_e^v(E)$ es la densidad de estados para un solo electrón por volumen $g_e(E)$ para la banda de valencia. La cantidad E_{Fn} es el nivel de cuasi-fermi del electrón y E_{Fp} es el nivel de cuasi-fermi de huecos. La cantidad T_n y T_p es la temperatura efectiva de electrones y huecos respectivamente. El uso de un nivel de cuasi-fermi y la temperatura efectiva para describir los portadores en una banda supone que los portadores en esa banda se han equilibrado entre sí.

Estos niveles cuasi-fermi y las temperaturas efectivas se desarrollaron de modo que las expresiones de equilibrio termodinámico (ET) para n y p están dados por las estadísticas de Fermi-Dirac [14, 18-19].

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \frac{g_e^c(E) dE}{[1 + \exp(E - E_F) / kT]} \quad (39)$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} \frac{g_e^v(E) dE}{[1 + \exp(E_F - E) / kT]} \quad (40)$$

Los niveles cuasi-Fermi colapsan al nivel de Fermi E_F y las temperaturas efectivas a la temperatura T cuando se logra ET. Mientras que $g_e^c(E)$ y $g_e^v(E)$ pueden seguir siendo función de posición, E_F y T no pueden variar con la posición en ET en las ecuaciones anteriores.

En el caso de los semiconductores cristalinos inorgánicos, la densidad de estados cerca de sus respectivos bordes de banda se puede mostrar la energía parabólica, es decir [14],

$$g_e^c(E) = A_c (E - E_c)^{1/2} \quad (41)$$

Y

$$g_e^v(E) = A_v (E_v - E)^{1/2} \quad (42)$$

Las cantidades A_c y A_v son propiedades del material y por lo tanto varían con la posición. Estas expresiones nos ayudan a evaluar las ecuaciones 1 y 2, ya que la mayoría de los portadores estarán cerca de sus respectivos bordes de banda.

Usando las ecuaciones 5 y 6 en las ecuaciones 1 y 2 obtenemos:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \frac{A_c (E - E_c)^{1/2} dE}{[1 + \exp(E - E_{Fn}) / kT_n]} \quad (43)$$

Y

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} \frac{A_v (E_v - E)^{1/2} dE}{[1 + \exp(E_{Fn} - E) / kT_p]} \quad (44)$$

Estas expresiones pueden ahora integrarse analíticamente si es posible utilizar aproximaciones de Boltzman en lugar de los términos de la función de Fermi y obtenemos:

$$n = N_c \exp-(E_c - E_{Fn}) / kT_n \quad (45)$$

Y

$$p = N_v \exp-(E_{Fn} - E_v) / kT_p \quad (46)$$

Donde N_c y N_v son propiedades del material dependiente de la temperatura llamadas las densidades de estados efectivas de la banda de conducción y de valencia respectivamente.

En ET las ecuaciones con aproximaciones de Boltzman colapsan a la siguiente expresión,

$$n = N_c \exp-(E_c - E_F) / kT \quad (47)$$

Y

$$p = N_v \exp-(E_F - E_v) / kT \quad (48)$$

Los electrones por volumen n en la banda de conducción y los huecos por volumen en la banda de valencia pueden transportar una corriente eléctrica convencional. En equilibrio termodinámico tanto la densidad de corriente de electrones J_n como la

densidad de corriente J_p son idénticamente cero. Cuando el sistema de materiales es expulsado de ET por iluminación, voltaje, gradiente de temperatura o alguna combinación de estos, ni J_n ni J_p necesitan ser cero.

Cuando un sistema de materiales es expulsado de ET, entonces J_n está dado por [20-23],

$$J_n = e\mu_n n dE_{Fn} / dx - en\mu_n S_n dT_n / dx \quad (49)$$

Aquí μ_n es la movilidad del electrón y S_n es el coeficiente de Seebeck para electrones, una cantidad negativa. El coeficiente de Seebeck también se denomina potencia termoeléctrica.

Observando la figura 2.15 podemos escribir la ecuación de la densidad de corriente J_n introduciendo un término de campo electrostático, uno de campo de fuerza efectivo y un término de gradiente de concentración. Obtenemos la expresión siguiente,

$$E_{VL}(x) = \chi(x) + V_n(x) + E_{Fn}(x) \quad (50)$$

Ahora introduciendo esta expresión en J_n se obtiene:

$$J_n = e\mu_n n \left(\xi - \frac{d\chi}{dx} - \frac{dV_n}{dx} \right) - en\mu_n S_n \frac{dT_n}{dx} \quad (51)$$

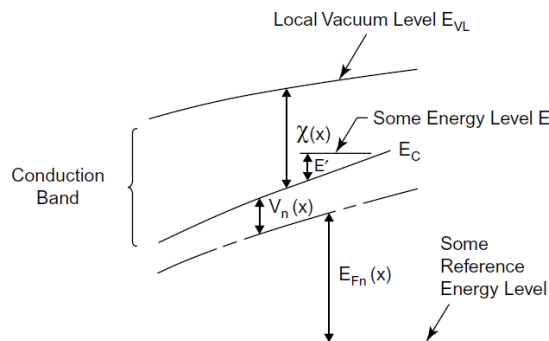


Figura 2.15 Una banda de conducción muy general de semiconductores con una afinidad electrónica que es una función de posición.

La situación de la figura 2.15 podría surgir en un semiconductor de aleación cuya composición varía con la posición. La parte superior de la banda de conducción se denomina nivel de vacío local. Se muestra una energía de referencia constante.

Si incorporamos la ecuación 45, con esto nos limita a un modelo específico de densidad de estado y a una banda de conducción no degenerativa (idealmente).

$$J_n = e\mu_n n \left(\xi - \frac{d\chi}{dx} - kT_n \frac{d \ln N_c}{dx} \right) + ekT_n \mu_n \frac{dn}{dx} - \left(\frac{eV_n \mu_n n}{T} + e\mu_n n S_n \right) \frac{dT_n}{dx} \quad (52)$$

La densidad de corriente en la banda de conducción J_n se expresa como [23,24],

$$J_n = e\mu_n n \left(\xi - \frac{d\chi}{dx} - kT_n \frac{d \ln N_c}{dx} \right) + ekT_n \mu_n \frac{dn}{dx} + eD_n^T \frac{dT_n}{dx} \quad (53)$$

En esta expresión para J_n , se ha introducido el coeficiente de difusión D_n y el coeficiente de difusión térmica de electrones (o coeficiente de electrón de Soret) D_n^T no se ha introducido donde:

$$D_n = kT_n \mu_n \quad (54)$$

Y

$$D_n^T = -\mu_n n (V_n + S_n T_n) / T_n \quad (55)$$

Volviendo ahora a J_p y observamos que las expresiones análogas a la ecuación 49, para este componente de la densidad de corriente total transportada por huecos en la banda de valencia. Comenzando con la formulación del potencial electroquímico, obtenemos la formulación análoga de la ecuación de J_n y define para J_p [20-26],

$$J_p = e\mu_p p \frac{dE_{FP}}{dx} - ep\mu_p S_p \frac{dT_p}{dx} \quad (56)$$

J_p dado en términos del nivel cuasi-Fermi de huecos y la temperatura efectiva de huecos T_p . La movilidad de huecos y el coeficiente de Seebeck es una cantidad positiva. Para la formulación en términos del campo eléctrico ξ , gradientes en la

afinidad de huecos ($\chi + E_g$) y densidad efectiva en las bandas de estados, gradiente de concentración de portadores y gradiente efectiva de temperatura de huecos, se expresa como;

$$J_p = e\mu_p P \left(\xi - \frac{d(\chi + E_g)}{dx} + kT_p \frac{d \ln N_V}{dx} \right) - ekT_p \mu_p \frac{dp}{dx} + \left(\frac{eV_p \mu_p P}{T_p} - e\mu_p P S_p \right) \frac{dT_p}{dx} \quad (57)$$

Una reformulación de esta ecuación en términos del campo electrostático ξ , el campo de fuerza efectiva ξ'_p , el gradiente de concentración dp/dx , y el gradiente de temperatura (dT_p/dx) obtenemos;

$$J_p = e\mu_p p \xi + e\mu_p p \xi'_p - eD_p \frac{dp}{dx} - eD_p^T \frac{dT_p}{dx} \quad (58)$$

El campo de fuerza efectivo de huecos ξ'_p utilizado en la ecuación tiene la definición,

$$\xi'_p = -\frac{d(\chi + E_g)}{dx} + kT_p \frac{d \ln N_V}{dx} \quad (59)$$

De la misma forma que se realizó la definición del coeficiente de difusión para electrones, ahora se define para huecos D_p y el coeficiente de difusión térmica de huecos (o el coeficiente de Soret de huecos) D_p^T donde;

$$D_p = kT_p \mu_p \quad (60)$$

Y

$$D_p^T = \mu_p p (S_p T_p - V_p) / T_p \quad (61)$$

La ecuación de densidad de corriente total transportada por huecos en la banda de valencia. Muestra que J_p puede ser visto como siendo impulsado por una fuerza total [24],

$$F_h = e \left(\xi - \frac{d(\chi + E_g)}{dx} + kT_p \frac{d \ln N_V}{dx} \right) \quad (62)$$

Esta ecuación describe cómo actúa sobre huecos (termino de deriva total), por un gradiente de temperatura de concentración de huecos (difusión) y por un gradiente

de temperatura (difusión térmica). La fuerza total F_h es simplemente la fuerza electrostática $e\xi$ excepto para aquellos materiales que tienen propiedades (afinidad, densidad de estados) que varían con la posición [24-26].

2.7.3. Procesos de transporte en interfase.

Hay un número de procesos en las interfases que permiten a los portadores cruzar la frontera entre dos materiales o entre dos granos. Estos procesos están en serie con los mecanismos de transporte masivo. A continuación se mencionan los mecanismos de transporte de interfase. La figura 2.16 se muestra una estructura metal-semiconductor que se encuentra polarizado directamente para ilustrar estos procesos. En esta figura se observa los mecanismos a-e que implican a los portadores mayoritarios del semiconductor, mientras que el proceso f implica tanto portadores mayoritarios como minoritarios. El mecanismo del proceso g solo involucra a portadores minoritarios.

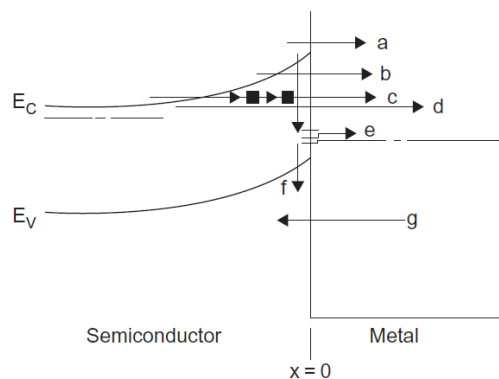


Figura 2. 16 Mecanismos de transporte de interfaz ilustrados usando una unión metal-semiconductor polarizada directamente.

La trayectoria a es la emisión termiónica, la trayectoria b es la emisión de campo mejorada térmicamente, la trayectoria c es el túnel de paso múltiple, la trayectoria d es la emisión de campo, la trayectoria e implica la captura y emisión posterior, la

trayectoria f es la recombinación de interfaz y la trayectoria g es una inyección minoritaria.

2.7.3.1. Emisión termoiónica.

La emisión termoiónica es un proceso clásico (sin tunelización) mediante el cual un portador se transfiere de un estado permitido en un material al de otro material, idealmente ningún cambio en la energía total. El modelo general, válido para interfases semiconductor-semiconductor o semiconductor-metal, para la densidad de corriente neta J_{OB} al pasar por la barrera en una interfaz, para electrones puede escribirse como [27]:

$$J_{OB} = -A^*T^2 e^{-\phi_B/KT} [e^{E_{Fn}(0^-)/KT} - e^{E_{Fn}(0^+)/KT}] \quad (63)$$

Aquí ϕ_B es la altura de barrera, $E_{Fn}(0^-)$ es el desplazamiento de la posición del nivel de cuasi-Fermi en $X = 0^-$, y $E_{Fn}(0^+)$ es el cambio en la posición del nivel de cuasi-Fermi en $X = 0^+$ con el flujo de corriente. Estos se miden positivamente desde la posición en ET del nivel de Fermi en la interfaz.

En esquema de la figura 2.8 para la trayectoria a se puede expresar como:

$$J_{OB} = -A^*T^2 e^{-\phi_B/KT} [e^{V/KT} - 1] \quad (64)$$

En el primer modelo de J_{OB} para electrones la expresión $E_{Fn}(0^+) = 0$ en el metal (es decir el nivel de cuasi-Fermi de electrones está en el nivel de Fermi) debido a que la alta población de portadores en el metal no es perturbada por el flujo de corriente.

A demás en esta expresión A^* es la constante de Richardson efectiva; es una función de los materiales involucrados en la interfaz.

2.8. Sistema matemático.

Con las ecuaciones definidas anteriormente, se escribe el sistema matemático completo que describe toda la física que tiene lugar en una celda solar en estado estacionario. Este sistema se compone de un gran conjunto de ecuaciones no lineales acopladas. En este conjunto incluye las ecuaciones de continuidad para electrones y huecos, la ecuación de Poisson. Se necesita establecer la solución para establecer las características de la densidad-tensión de corriente de la celda (J-V), que se requiere para la evaluación, el diseño y la optimización de la celda. La densidad de corriente convencional total J de la característica J-V es una constante y se obtiene de donde las componentes J_n y J_p se evalúan en el mismo plano en la celda. La tensión nominal V producida por la celda en algún punto de funcionamiento mientras se entrega la densidad de corriente J viene dada por la integral sobre la estructura de la diferencia entre la distribución de campo eléctrico presente en el punto de funcionamiento seleccionado $\xi(x)$ y la distribución del campo eléctrico presente en ET que se denomina $\xi_0(x)$; es decir,

$$V = \int_{\text{estructura}} [\xi(x) - \xi_0(x)] dx \quad (65)$$

Esta expresión, es válida para todos los tipos de celdas. Ya que esta ecuación calcula el desplazamiento relativo de los niveles de Fermi de contacto presente en el punto de funcionamiento seleccionado, por la convención de signos se asume que el cátodo es el contacto izquierdo.

En este modelo numérico, las versiones específicas de las ecuaciones (J_n y J_p) del sistema matemático que se utilizarán son las siguientes:

$$J_n = e\mu_n n \left(\xi - \frac{d\chi}{dx} - kT \frac{d \ln N_c}{dx} \right) + eD_n \frac{dn}{dx} \quad (66a)$$

$$J_p = e\mu_p p \left(\xi - \frac{d(\chi + Eg)}{dx} - kT \frac{d \ln N_v}{dx} \right) - eD_p \frac{dp}{dx} \quad (66b)$$

$$\frac{\partial J_n / \partial x}{e} = - \int_{\lambda} G_{ph}(\lambda, x) d\lambda + \Re \quad (66c)$$

$$\frac{\partial J_p / \partial x}{e} = \int_{\lambda} G_{ph}(\lambda, x) d\lambda - \Re \quad (66d)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon\xi)}{\partial x} = e(p - n + \sum P_T - \sum n_T + N_D^+ - N_A^-) \quad (66e)$$

En estas ecuaciones, \Re puede ser cualquiera de los mecanismos de recombinación unimolecular o bimolecular. En el modelo matemático se emplea las formulaciones completas no linealizadas. A menudo se asume que \Re está controlado por la recombinación SRH y se usa como,

$$\Re^L = \frac{V \sigma_n \sigma_p N_T (np - n_i^2)}{\sigma_p (p + p_1) + \sigma_n (n + n_1)} \quad (67)$$

Sumando a una distribución de estado de ancho de banda. Las cargas atrapadas n_T y p_T en la energía E así como las concentraciones de contaminantes ionizados N_A^- y N_D^+ se calculan usando las estadísticas de Fermi-Dirac. Estas cantidades se convierten en función de n y p en estado estacionario. Teniendo esto en cuenta se puede ver que el conjunto de ecuaciones de (J_n y J_p) tiene 5 ecuaciones y 5 incógnitas.

La cantidad $G_{ph}(\lambda, x)$ en este conjunto es la función de fotogeneración. En el caso de la absorción por el par de electrones y huecos libres, se modela en las simulaciones numéricas usando $\alpha(\lambda)I_0(\lambda)e^{-\alpha(\lambda)x}$ es decir, el mecanismo de absorción se toma para seguir la ley de Beer-Lambert. Y en el caso de la absorción causada por excitones, $G_{ph}(\lambda, x)$ es modelado por distribuciones de tipo delta en la región de disociación de excitones.

Para la solución numérica de las ecuaciones, se resuelven sujetas a las condiciones de contorno,

$$J_n(L) = eS_n[n(L) - n_0(L)] \quad (68)$$

Y

$$J_p(L) = -eS_p[p(L) - p_0(L)] \quad (69)$$

Para el contacto izquierdo (L) con la estructura de la celda y sujeto a las condiciones de frontera.

$$J_n(R) = -eS_n[n(R) - n_0(R)] \quad (70)$$

Y

$$J_p(R) = eS_p[p(R) - p_0(R)] \quad (71)$$

Para el contacto derecho (R). Las soluciones numéricas nos dan el comportamiento de J-V pero también nos permiten observar dentro de una celda y así permite explorar los efectos o aportes de difusión, campos electrostáticos, campos efectivos, deriva, recombinación, interfases, etc.

2.9. Condiciones de frontera.

La ecuación de Poisson y las dos ecuaciones de continuidad (para electrones y huecos) deben mantenerse en todas las posiciones de un dispositivo y la solución a estas ecuaciones implica determinar las variables de estado $\Psi(x)$, $E_{Fn}(x)$ y $E_{Fp}(x)$ o $\Psi(x)$, $n(x)$ y $p(x)$ que definen completamente al sistema en cada punto de x . porque las ecuaciones de referencia para $\Psi(x)$, $E_{Fn}(x)$, $E_{Fp}(x)$ no son lineales y acopladas, no se pueden resolverse analíticamente. Por lo tanto, los métodos numéricos deben ser utilizados. Como cualquier otro análisis matemático, debe haber condiciones de frontera impuestas en el conjunto de ecuaciones. Estos se expresan en términos de condiciones en el nivel de vacío local y las corrientes en los contactos, las ecuaciones mencionadas deben satisfacer las siguientes condiciones de frontera:

$$\Psi(0) = \Psi_0 - V \quad (72a)$$

$$\Psi(L) = 0 \quad (72b)$$

$$J_p(0) = -qS_{p0}(p_o(0) - p(0)) \quad (72c)$$

$$J_p(L) = qS_{pL}(p(L) - p_o(L)) \quad (72d)$$

$$J_n(0) = qS_{n0}(n(0) - n_o(0)) \quad (72e)$$

$$J_n(L) = -qS_{nL}(n_o(L) - n(L)) \quad (72f)$$

Donde $x=0$ se refiere al lado izquierdo y $x=L$ al lado derecho de cualquier estructura en general de un dispositivo bajo consideración.

2.10. Depósito de películas delgadas por baño químico (DBQ).

Existen muchas técnicas de depósito utilizadas para películas delgadas de CdS [28]. Entre las que el DBQ se caracteriza por ser una técnica muy sencilla, de bajo costo, se obtienen películas de buena calidad. En DBQ, el CdS se obtiene preparando la descomposición de thiourea en una solución alcalina de sales de cadmio de acuerdo con la siguiente reacción de la ecuación [29, 30, 31]:



Donde el primer término es acetato de cadmio, el segundo es thiourea más hidróxido el cual forma en CdS, diazomethane, amoniaco y agua oxigenada.

Para llegar a esta reacción se parte de una solución acuosa de sales de los elementos del compuesto que se desea obtener. Se requiere que el compuesto a depositar sea relativamente insoluble y químicamente estable en la solución para que se dé una precipitación simple en una reacción iónica. El sustrato es sumergido en esta solución y a la vez la solución es sometida a calentamiento constante por un tiempo determinado, siendo estos los parámetros que se controlan o varían en el depósito y los que proporcionan las propiedades de película, juntos con las concentraciones de elementos en la solución. Y como antes se mencionó para su implementación es relativamente simple; no requiere atmosfera especial, se puede realizar desde temperaturas bajas-altas, en la superficie del sustrato ocurre la

reacción antes plasmada, llevando a la formación de la película, y es posible obtener desde pequeñas hasta grandes áreas y de buena calidad cristalina [32,33].

En la figura 2.16 se muestra el esquema del sistema de DBQ, donde se presentan los componentes necesarios para realizar depósito de películas delgadas.

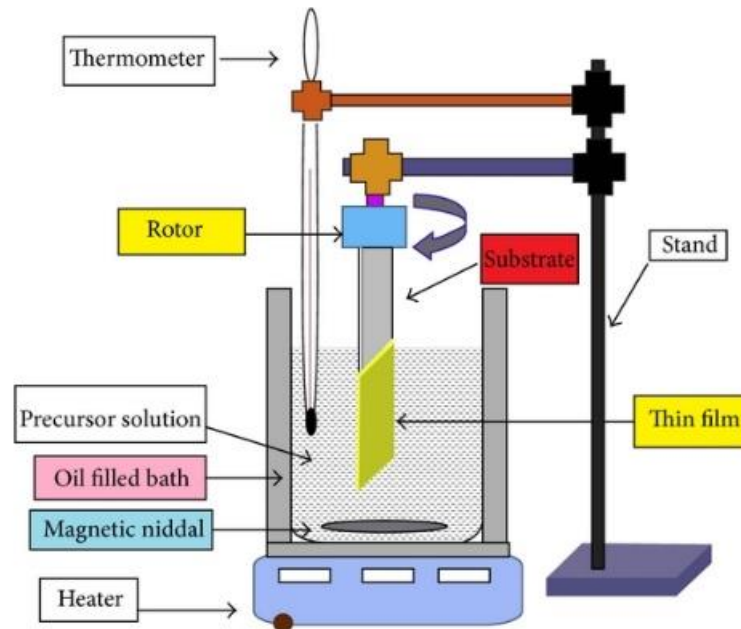


Figura 2. 17 . Esquema del montaje experimental para el depósito de baño químico

Referencias

- [1]. Stephen J. Fonash, *Solar cell device physics*, 2nd ed. Academic press is an imprint of Elsevier, 2010, cap. (2-3).
- [2]. Tom Markvart, and Luis Castañer, *Principles of Solar Cell Operation, practical handbook of photovoltaics, chapter IA-1*, 2012.
- [3]. Arturo Morales Acevedo, *la electricidad que viene del sol*, 1ª Edición Revisada, © México D.F. (2003).
- [4]. S.M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, second ed., John Wiley & Sons, New York, 1981.
- [5]. Y. Hishikawa, Y. Imura, T. Oshiro, *Irradiance dependence and translation of the I-V characteristics of crystalline silicon solar cells*, Proc. 28th IEEE Photovoltaic Specialists Conf., Anchorage, 2000, pp. 1464-1467.
- [6]. J.E. Philips, J. Titus, D. Hofmann, *Determining the voltage dependence of the light generated current in CuInSe₂-based solar cells using I-V measurements made at different light intensities*, Proc. 26th IEEE Photovoltaic Specialist Conf., Anaheim, 1997, pp. 463-466.
- [7]. S.S. Hegedus, *Current-voltage analysis of a-Si and a-SiGe solar cells including voltage-dependent photocurrent collection*, Prog. Photovolt: Res. Appl. 5 (1997) 151-168.
- [8]. M.A. Green, *Silicon Solar Cells: Advanced Principles and Practice*, Centre for Photovoltaic Devices and Systems, University of New South Wales, 1995.
- [9]. E.A. Davis, in: P.G. Le Comber, J. Mort (Eds.), *Electronic and Structural Properties of Amorphous Semiconductors*, Academic Press, New York, 1973.
- [10]. N.-K. Persson, in: O. Inganäs, S.-S. Sun, N.S. Sariciftci (Eds.), *Organic Photovoltaics*, CRC Press, Boca Raton, FL, 2005, pp. 114–129.
- [11]. S. Sze, K.K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, third ed., John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, 2007, pp. 7-56, 246–258.
- [12]. P. A. Basore, *Numerical modeling of textured silicon solar cells using PC-1D*, Electron Devices, IEEE Transactions on, vol. 37, pp. 337 -343, 1990.
- [13]. Stephen J. Fonash, *AMPS-1D Manual*, CNEU, Pennsylvania state university, 2010.
- [14]. S. Sze, K.K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, third ed., John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, 2007, pp. 7-56, 246–258.
- [15]. W. Shockley y Read, W. T., *Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons*, Physical Review, vol. 87, p. 835, 1952.
- [16]. R. N. Hall, *Electron-Hole Recombination in Germanium*, Phys. Rev., vol. 87, p. 387, 1952.
- [17]. P.T. Landsberg, *Non-radiative transitions in semiconductors*, Phys. Status Solidi. 41, 457 (1970).
- [18]. S. Wang, *Fundamentals of Semiconductor Theory and Device Physics*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1989.
- [19]. S. Fonash, *Solar Cell Device Physics*, Academic Press, NY, 1981.
- [20]. C.T. Sah, F.A. Lindholm, *Solid-State Electron.* 16 (1973) 1447.
- [21]. A.H. Marshak, K.M. van Vleet, *Solid-State Electron.* 21 (1978) 417; K.M. van Vliet, A.H. Marshak, *Solid-State Electron.* 23 (1980) 49.
- [22]. B.R. Nag, *Theory of Electrical Transport in Semiconductors*, Pergamon, Elmsford, NY, 1972;
- [23]. J. Bardeen, in: E.V. Condon (Ed.), *Handbook of Physics*, McGraw-Hill, NY, 1967.
- [24]. See, for example, H. Kromer, *RCA Rev.* 18 (1957) 332; J. Tauc, *Rev. Mod. Phys.* 1957) 308; P.R. Emtage, *J. Appl. Phys.* 33 (1962) 1950; L.J. Van Ryuyen, F.E. Williams, *Am. J.*

- Phys.* 35 (1967) 705; Y. Marfaing, J. Chevallier, *IEEE Trans. Electron. Devices* 18 (1971) 465.
- [25]. S.J. Fonash, *CRC Crit. Rev. Solid State Mater. Sci.* 9 (1980) 107.
- [26]. S.J. Fonash, S. Ashok, *Appl. Phys. Lett.* 35 (1979) 535.
- [27]. S.J. Fonash, *General formulation of the current voltage characteristic of a p-n heterojunction solar cell*, *J. Appl. Phys.* 51, 2115, (1980).
- [28]. J.P. Enríquez, X. Mathew / *Solar Energy Materials & Solar Cells* 76 (2003) 313–322.
- [29]. C. Guillén, M.A. Martínez, J. Herrero, *Thin Solid Films* 335 (1998) 37.
- [30]. N.G. Dhere, D.L. Waterhouse, K.B. Sundaram, O. Melendez, N.R. Parikh, B. Patnaik, *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* 6 (1995) 52.
- [31]. X. Mathew, P.J. Sebastian, *Solar Energy Mater. Solar Cells* 59 (1999) 85.
- [32]. Gary Hodes, *Chemical Solution Deposition of Semiconductor Films*, Marcel Dekker, 2002.
- [33]. S. J. CASTILLO, T. MENDIVIL-REYNOSO, et. al. *Formation of ZnO in or on glasses by using the Sol-Gel and Chemical Bath Deposition Techniques*, *WSEAS TRANSACTIONS ON CIRCUITS and SYSTEMS*, 2010, 143-152

Capítulo 3. Metodología.

En este capítulo se describe el procedimiento, los métodos y técnicas de simulación, depósito de CdS y caracterización que se utilizaron para realizar las actividades que nos llevaron en el cumplimiento de los objetivos específicos y con estos lograr el objetivo general, que en este trabajo se planteó, en la figura 3.1 puede verse el diagrama de flujo de las actividades en resumen, de cómo se realizó el proyecto.

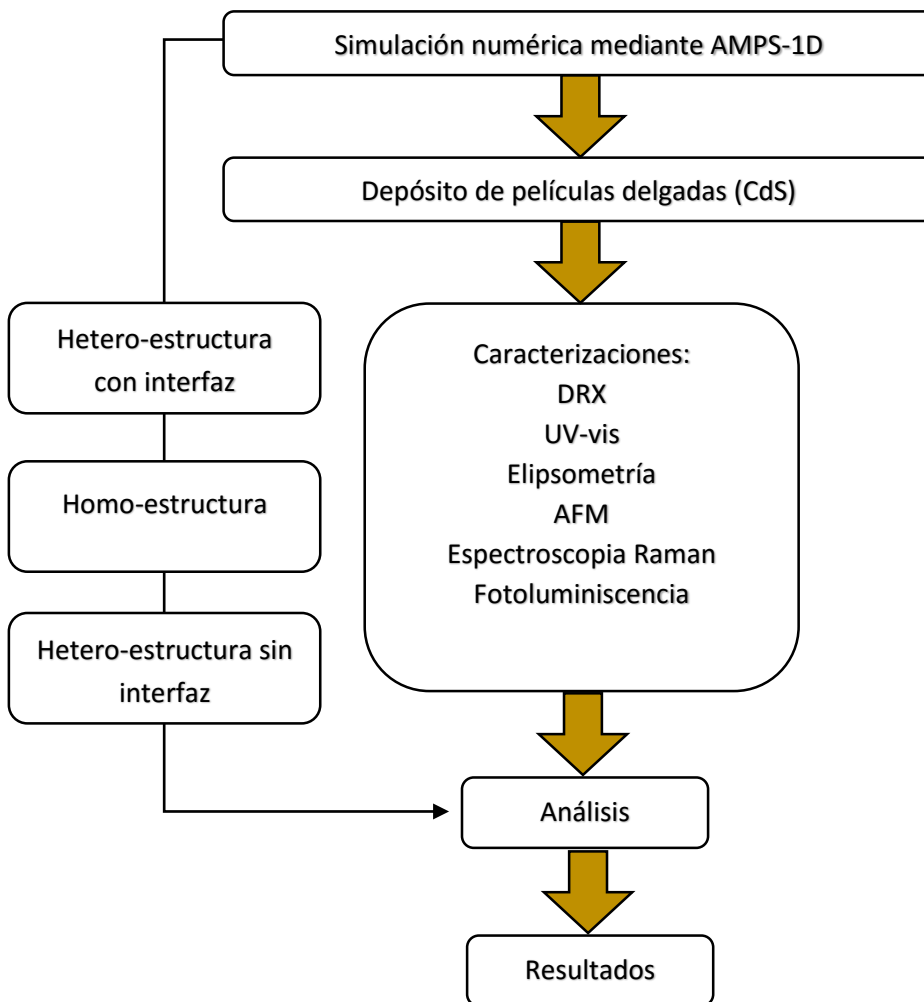


Figura 3.1 Diagrama de flujo de las etapas de las actividades

3.1. Simulación.

En este trabajo, todos los cálculos se realizaron con iluminación AM1.5 de 1 sol y una temperatura de 300 K, usando el modelo de diodo ideal que fue descrito en el capítulo 2. AMPS-1D es la herramienta de simulación de primeros principios desarrollada por el Penn State/Electric Power Research Institute (EPRI). AMPS es un programa muy general para analizar y diseñar el transporte en microelectrónica y estructuras fónicas.

Este software utilizado en este estudio se basa en los primeros principios, ecuaciones básicas de semiconductores y celdas solares: la ecuación de Poisson, la ecuación de continuidad para los huecos libres y la ecuación de continuidad para los electrones libres.

La determinación de las características de transporte se convierte entonces en una tarea de resolver las tres ecuaciones diferenciales no lineales acopladas, cada una de las cuales tiene dos condiciones de frontera asociadas. En AMPS, estas tres ecuaciones acopladas se resuelven simultáneamente para obtener un conjunto de tres variables de estados desconocidas en cada punto del dispositivo: el nivel de vacío local, el electrón y niveles de huecos cuasi-Fermi. A partir de estas tres variables de estado, pueden calcularse las concentraciones de portadores libres, campos, corrientes, etc [1].

AMPS-1D proporciona dos enfoques diferentes para el proceso de recombinación/generación. Uno es la densidad de estados/capturar el modelo de sección transversal y el otro es el modelo de tiempo de vida media de los portadores [2], este último es modelo que se utilizó en la presente investigación.

3.1.1. Cálculo de parámetros para la simulación.

Para la simulación en el programa AMPS-1D, se especifican parámetros de los materiales a estudiar. Para el caso del material ternario InGaN, los parámetros, se calcularon con las fórmulas de las referencias [3-6]. En la figura 3.2 se observa el esquema del diseño de la hetero-estructura de celda solar que se modela, con sus contactos superior y posterior. En la figura 3.3 se ve el diagrama para llevar a cabo la simulación desde el diseño de la hetero-estructura.

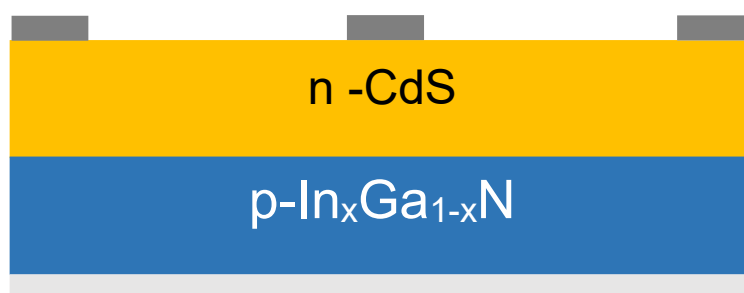


Figura 3.2 Esquema de la hetero-estructura de celda solar n-CdS/p-InGaN, con sus contactos superior y posterior.

En la simulación se realizaron a diferentes configuraciones de diseño, como en la tabla 3.1 se presentan.

Tabla 3.1 configuraciones en la simulación.

Configuraciones	Objetivo
Hetero-estructura con interfaz (CdS-interfaz-InGaN)	Ver la eficiencia máxima que se puede obtener con una interfaz.
Homo-estructura (InGaN-InGaN)	Optimizar parámetros del material ternario InGaN
Hetero-estructura sin interfaz (CdS-InGaN)	Acoplar parámetros optimizados de las configuraciones anteriores.

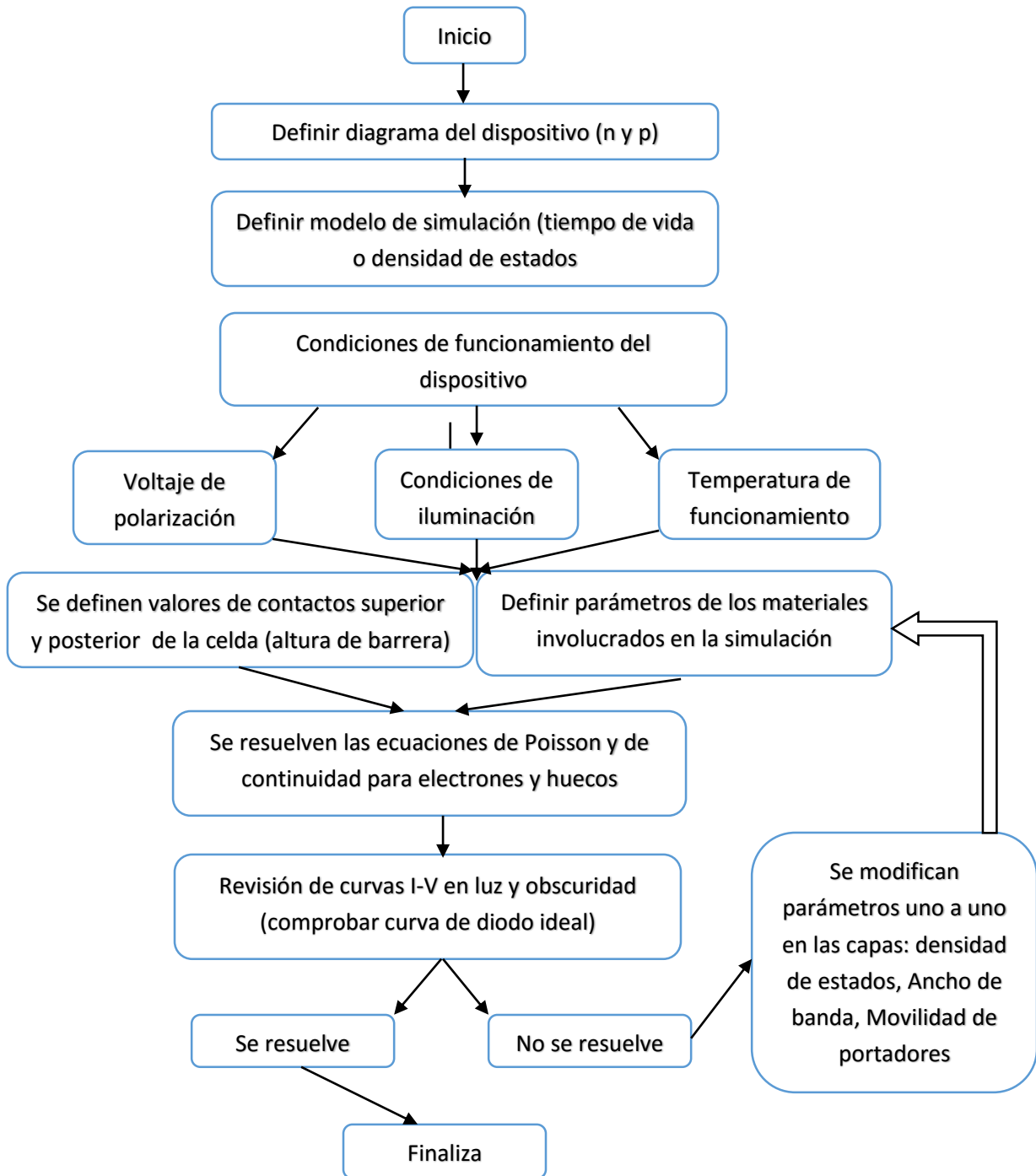


Figura 3.3 Diagrama de simulación.

3.2. Depósito de película delgada de CdS mediante depósito de baño químico (DBQ).

A continuación se presenta un diagrama del proceso en el depósito de películas de CdS (figura 3.4). El proceso del método (DBQ) se describe a continuación con la cantidad de sustancias utilizadas, etc.

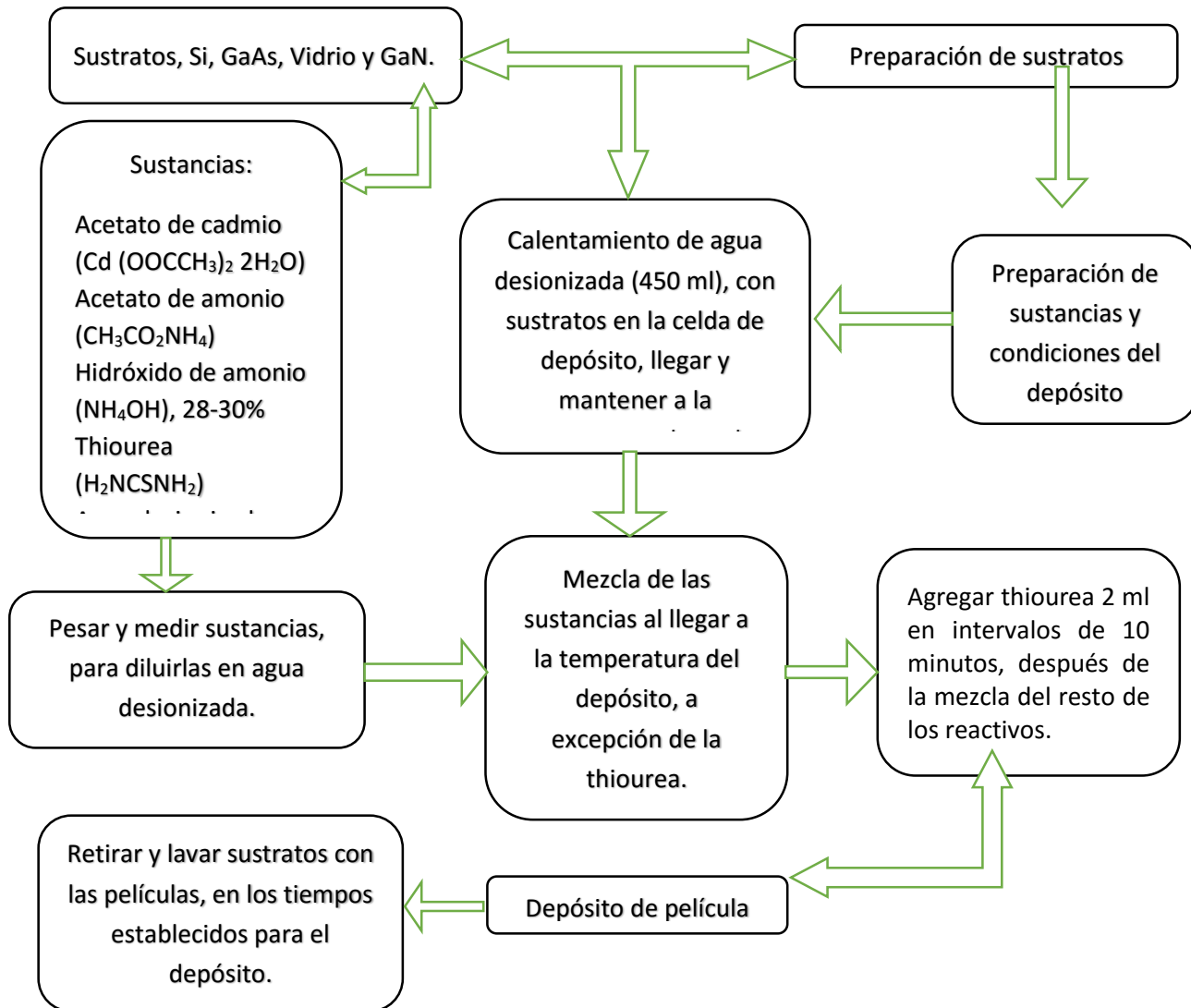


Figura 3.4 Esquema del proceso del proceso de depósito en baño químico de películas de CdS.

3.2.1. Depósito por baño químico.

El método utilizado para el depósito se tomó del trabajo de J.P. Enríquez, X. Mathew [7], donde realizan un estudio de las propiedades de películas de CdS.

3.2.2. Limpieza de sustratos.

Primero roturar los sustratos (vidrio conductor) para evitar confusión (si se van a utilizar más de un sustrato en el depósito), con un voltímetro se determina qué lado es conductor el vidrio, para roturar los vidrios del lado no conductor.

Para la limpieza de los sustratos se prepara una solución de 5 ml de jabón neutro en un vaso de precipitado de 500 ml y se calienta a 80-90 °C, luego se colocan los vidrios y se mantienen por 10 minutos a la misma temperatura, para después meterlos al baño ultrasónico por 10 minutos, después de ese tiempo se sacan y se colon en otro vaso de precipitado con agua destilada caliente, y nuevamente se meten al baño ultrasónico por 10 minutos, este proceso se repite 3 a 4 veces todo con agua destilada.

Después de este proceso se colocan los sustratos en agua des-ionizada a temperatura ambiente, luego se retiran para secarlos.

Para la limpieza de los sustratos de Si, GaAs y GaN se realizó el mismo procedimiento anteriormente descrito para los sustratos de vidrio.

3.2.3. Preparación de las soluciones.

Para la preparación de las soluciones se pesan o miden según corresponda las cantidades de sustancias siguientes que se muestran en la tabla 3.2.

Tabla 3.2 Reactivos y cantidades para realizar el proceso de DBQ de películas de CdS.

Sustancia o reactivo	Cantidad
Acetato de cadmio	57.5 mg
Acetato de amonio	334.2 mg
Hidróxido de amonio	12.3 ml
Thiourea	33.4 mg
Agua des-ionizada	450 ml

Los reactivos que correspondan se disuelven en agua des-ionizada, para la thiourea y acetato de cadmio se disuelven en 8 mililitros y para el acetato de amonio en 5 mililitros.

3.2.4. Proceso del depósito.

El depósito por baño químico es una técnica de depósito con la cual se logra películas delgadas semiconductoras policristalinas, mediante un proceso de ión por ión, cuyo espesor no rebasa algunas micras.

Se coloca los sustratos dentro del sistema donde se lleva a cabo el depósito de las películas de CdS. Luego se le agrega el agua desionizada (450 ml) y se pone a calentar hasta llegar a los 90 °C y al momento de llegar a esa temperatura se debe mantener por 15 minutos antes de iniciar el depósito de las soluciones.

Cuando la temperatura se mantiene constante a 90 °C se añaden el agitador magnético y las soluciones, iniciando con el acetato de cadmio, acetato de amonio e hidróxido de amonio en este orden, la thiourea es añadida en cantidades iguales con intervalos de tiempo de 10 minutos, lo cual ayuda a evitar la precipitación. Después de haber agregado las tres primeras soluciones se espera 2 minutos para agregarle 2 ml de thiourea, luego se espera 10 minutos para agregar 2 ml más y así en intervalos de 10 minutos hasta terminar con la solución.

Ya que fue agregado los 2 últimos ml de thiourea se esperan 10 minutos más, para sacar todos los sustratos o variar el tiempo de depósito y sacar los sustratos en tiempos diferentes no mayor a 45 minutos después de haber agregado toda la thiourea (máximo de tiempo 50 minutos).

Cuando se retiran los sustratos (todos) o se retiran a diferentes tiempos (según el espesor deseado) se colocan en agua des-ionizada para meterlos al baño ultrasónico y quitar el exceso de material. Y finalmente se procede a secar los vidrios con el depósito de CdS y se guardan.

3.3. Técnicas de caracterización.

3.3.1. Difracción de rayos X (DRX).

La técnica de difracción de rayos X se utiliza en análisis relacionado con la estructura cristalina de los sólidos, incluyendo la geometría y constantes de red para identificación de materiales desconocidos, la orientación de planos en monocristales y las orientaciones preferenciales de planos cristalinos en policristalinos. La difracción de rayos x es una de las herramientas más útiles en el campo de la cristalografía [8].

Como toda radiación electromagnética, los rayos x dan patrones de difracción cuando estos son dispersados por los planos atómicos de los sólidos cristalinos.

El método de Bragg de difracción de los rayos X utiliza la radiación monocromática característica, como la línea K_{α} del cobre ($\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$), haciendo incidir un haz colimado sobre una superficie del cristal paralela a uno de los planos principales. La interferencia en los patrones de difracción de rayos x para un sólido ocurre debido a la reflexión de la radiación incidente en una familia de planos de la red cristalina, como se muestra en la figura 3.1.

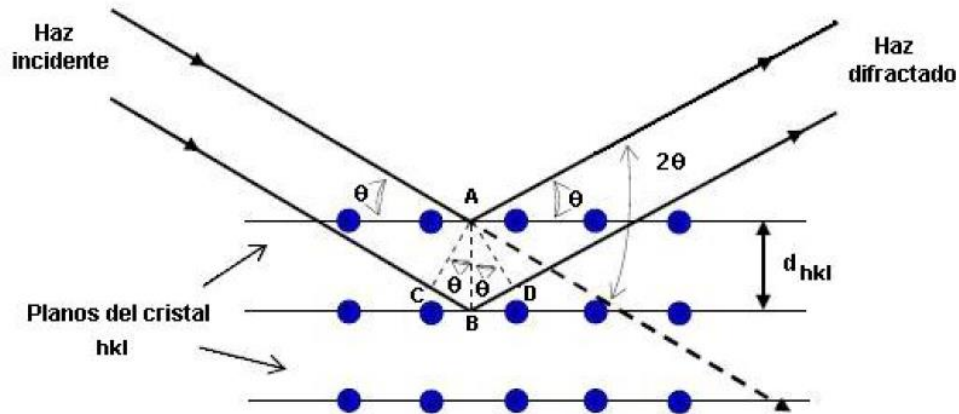


Figura 3.5 Difracción de rayos X en los planos cristalinos de un sólido.

La radiación reflejada en un plano y la reflejada en los adyacentes diferirán en un factor de fase que depende de los distintos caminos recorridos. La diferencia de camino recorrido por dos haces reflejados en planos adyacentes es $2d \sin\theta$, donde d es la distancia interplanar y θ es el ángulo de incidencia.

Para que estos haces interfieran constructivamente dicha diferencia de camino debe ser igual al número entero de longitudes de onda, condición conocida como ley de Bragg [8]:

$$n\lambda = 2d \sin\theta \quad (3.1)$$

Donde d es la distancia interplanar correspondiente a la familia de planos de índices de Miller (hkl), λ es la longitud de onda de los rayos x, θ es el ángulo de incidencia de la radiación y n representa un índice entero, conocido como orden de la reflexión.

A partir de los patrones de rayos x se utilizan para determinar el tamaño del cristal a partir del ensanchamiento de la línea de difracción a la mitad de la línea de intensidad del pico máximo.

3.1.1. Formula Debye-Scherrer.

La ecuación de Scherrer es un método bien establecido ampliamente para calcular el tamaño de partícula (D) a partir de los patrones de difracción de rayos X. con la ecuación siguiente:

$$D = \frac{K\lambda}{FWHM \cdot \cos \theta} \quad (3.2)$$

Donde λ es la longitud de onda de los rayos X utilizados, θ es el ángulo de difracción de Bragg, FWHM es el ancho medio de la intensidad máxima y K es una constante adimensional que varía en el rango de 0.89-1.39 dependiendo de la geometría del material dispersado (generalmente para semiconductores, se utiliza K=1). La ampliación de un pico está relacionado con el tamaño del cristal y con la longitud de onda proporcionada con el equipo utilizado.

Para realizar la caracterización de rayos X de las películas de CdS, se utilizó un equipo de rayos X del laboratorio de caracterización de materiales del CIDTER-UNICACH, DIFRACTOMETRO de la marca RIGAKU ULTIMA IV, y trabajando con una línea de cobre (CuK_{α} , $\lambda=1.5406 \text{ \AA}$), con método de Bragg ventano y haz rasante, con la fuente de rayos X en la posición θ y el detector 2θ , en un rango fue de 20° a 60° .

3.3.2. Caracterización óptica.

3.3.2.1. UV-vis.

El estudio óptico de las películas juega un papel muy importante para la determinar las propiedades de un material, que es parámetro para predecir el rendimiento en celdas solares. El espectro de transmitancia se ha obtenido utilizando un

espectrofotómetro UV-vis (SHIMADZU UV-3600) en el intervalo de 300-1400 nm (equipo de la SEES, Cinvestav-IPN, México).

Con los espectros de transmisión se determinó el ancho de banda óptico con el método de Tauc que relaciona el coeficiente de absorción (α) y la energía del fotón incidente $h\nu$ como se describe a continuación:

$$\alpha h\nu = A(h\nu - E_g)^n \quad (3.3)$$

Donde α es el coeficiente de absorción, $h\nu$ es la energía del fotón, E_g es el ancho de banda prohibida, A es una constante y $n = 2$ para materiales de ancho de banda indirecta y $n = 1/2$ para ancho de banda directa.

3.3.3. Elipsometría.

Para determinar los espesores de las películas de CdS y el índice de refracción, se utilizó un elipsómetro de la marca GAERTNER-SCIENTIFIC Corporation (Chicago), del departamento de la Sección de Electrónica del Estado Sólido del Cinvestav-IPN (SEES, Cinvestav-IPN, México). Esta técnica se mide los cambios en la polarización de un haz de luz reflejada por una superficie (en este caso películas delgadas de CdS). La elipsometría es una técnica óptica para la caracterización de superficies y recubrimientos de medios, basada en la medida del cambio de la polarización de la luz al ser reflejada o transmitida por la superficie o el recubrimiento [9]. Debido a interacción entre varios haces de luz reflejados se puede obtener un máximo y un mínimo de la longitud de onda o del ángulo incidente. En estas mediciones depende del ángulo de medición, y las variables ópticas (índice de refracción) pueden ser medidas con gran precisión siendo independientes de la intensidad de la luz, de la luz reflejada y la precisión del detector [10], además del espesor de las capas. El análisis de las medidas elipsométricas se basa en el cálculo de los coeficientes de reflexión de Fresnel [9].

3.3.4. Caracterización morfológica mediante AFM.

La caracterización morfológica de las películas se realizó con dos Microscopios de Fuerza Atómica (Atomic Force Microscopy por sus siglas en inglés), el primero de la marca INTEGRA-Spectra (NT-MDT) con un haz luz de 546 nm. La medición fue tomada en un área de las muestras de $5 \times 5 \mu\text{m}$ (equipo de la SEES, Cinvestav-IPN, México) y el segundo equipo de la marca Veeco modelo 3100, en modo contacto (equipo del IER-UNAM-Temixco, Morelos).

El microscopio de fuerza atómica monitorea la superficie de la muestra con una punta de radio de curvatura de 20 a 60 nm que se localiza al final de un cantiléver. Las fuerzas entre la punta y la muestra provoca la deflexión del cantiléver, simultáneamente un detector mide esta deflexión a medida que la punta se desplaza sobre la superficie de la muestra generando una micrografía de la superficie. La fuerza interatómica que contribuye a la deflexión del cantiléver es la fuerza de Van der Waals [11].

En la figura 3.6a se muestra los componentes necesarios de un microscopio de fuerza atómica y en la figura 3.6b la deflexión del cantiléver como función de la distancia entre la punta y la muestra.

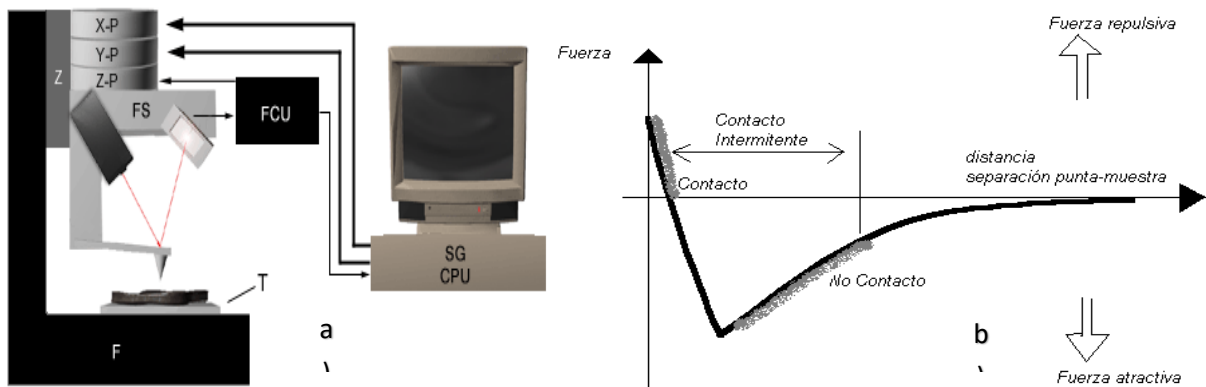


Figura 3.6 a) esquema de componentes y subsistemas de un microscopio de fuerza atómica, b) magnitud de deflexión del cantiléver como función de la distancia entre la punta y la muestra.

3.3.5. Espectroscopía Raman.

En la caracterización Raman se utilizaron dos equipos uno de la marca INTEGRA-Spectra (NT-MDT) (equipo de la SEES, Cinvestav-IPN, México), que tiene acoplado en el mismo la función de AFM y cuenta con un haz de luz con una longitud de onda de 532 nm. La medición de las muestras se realizó en un rango de 200 a 800 nm y una área de 5 X 5 micras (CdS sobre vidrio).

El segundo equipo de espectroscopía Raman se utilizó para la medición de las muestras de CdS depositado sobre los sustratos de Si, GaAs y GaN. Los espectros de Raman se registraron en una geometría de dispersión, usando un sistema construido en casa. La configuración consiste en un microscopio confocal con 60x objetivo (apertura numérica NA = 0.85), un láser DPSS de una sola frecuencia de 515 nm (Excelsior, Spectra-Physics) como fuente de luz y un espectrómetro Horiba iHR550 con 1200 líneas / mm rejilla y detector CCD enfriado por Peltier. La calibración del sistema se verificó antes de cada medición mediante la adquisición de espectros Raman de una oblea de silicio estándar (equipo del IER-UNAM, Temixco, Morelos).

La espectroscopía Raman se basa en el fenómeno de dispersión de luz, esto se produce debido a la interacción entre fotones y moléculas. Por lo general, un fotón colisiona con una sustancia (no necesariamente solo con una molécula), pero por simplificación se considera una colisión fotón-molécula. Mediante la medición de una dispersión Raman se examinan los cambios energéticos que acompañan a la transición de un nivel de energía molecular a otro [12-14].

Cuando un material se irradia con luz monocromática, la luz dispersada contiene un espectro de longitudes de onda en la que los picos de intensidad son desplazados de la longitud de onda de excitación por cantidades de energía equivalentes que corresponden a la excitación de los modos de vibración molecular o fonones de un cristal. La pérdida de energía de los fotones incidentes se analiza con un espectro óptico. La intensidad de radiación dispersada contra el desplazamiento Raman

forma un espectro que es único para cada material. Que es con lo que una sustancia o material es identificado. La espectroscopía Raman, por lo tanto, hace posible identificar la composición de una sustancia en función a los picos característicos a partir de un banco de datos [15].

La figura 3.7 se muestra los fenómenos de dispersión de la luz, debido a la interacción con las moléculas de un material, y se presentan la dispersión elástica (dispersión Rayleigh) e inelástica (dispersión Raman Stokes y anti-Stokes) de la luz.

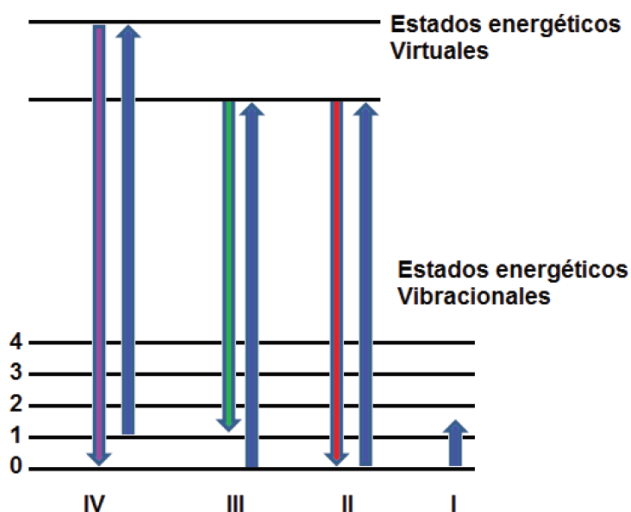


Figura 3.7 Descripción del fenómeno Raman I) absorción infrarroja, II) dispersión Rayleigh, III) dispersión Raman Stokes y VI) dispersión Raman anti-Stokes.

3.3.6. Fotoluminiscencia.

Los detalles montaje experimental usado para la medición de la fotoluminiscencia se describen a continuación. Para la medición se utilizó un sistema que consta de un láser con una línea de excitación de 325 nm, de la marca Omnichrome serie 56, con un monocromador de doble rejilla de la marca Spex modelo 1403 y un detector, fue utilizado un tubo fotomultiplicador de la marca Spex. La medición se realizó de 280 a 990 nm. La señal se amplificó por medio de un loquin de la marca EGIG-

Princeton modelo 5610 (equipo del departamento de Física, Cinvestav-IPN, México).

Esta técnica es conveniente para el estudio de materiales semiconductores, para determinar niveles de impurezas poco profundos como impurezas profundas, pero siempre y cuando las recombinaciones que se lleven a cabo sean radiativas banda-banda.

El haz de luz que se utiliza para excitar la muestra, tiene mayor energía que el ancho de banda prohibida del material (es decir $E_i > E_g$) para que este pueda absorber energía y generar pares de electrón-hueco [16]. Al realizar este proceso y recombinarse radiativamente emiten fotones que son recolectados por el detector y generar la curva de emisión en la energía que el material emita. La fotoluminiscencia es una herramienta espectroscópica ampliamente utilizada en la caracterización de las transiciones ópticas en semiconductores en la figura 3.8 se muestra un esquema de este proceso.

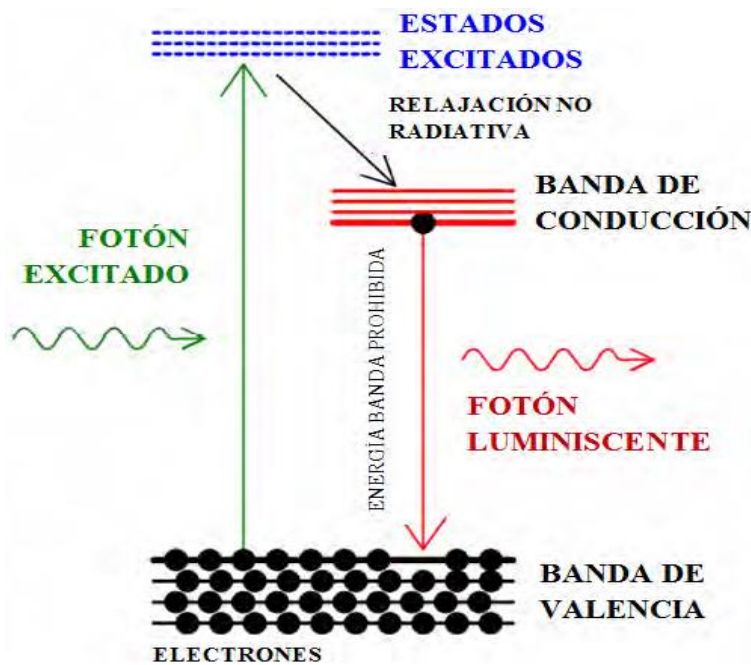


Figura 3.8 Esquema del proceso de fotoluminiscencia

Referencias

- [1]. Stephen J. Fonash, *AMPS-1D Manual*, CNEU, Pennsylvania state university, 2010.
- [2]. Hamzaoui, H., Bouazzi, A. S. and Rezig, B., "Theoretical possibilities of InxGa1-xN tandem PV structures," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 87, 595-603(2005).
- [3]. Adaine et al. / *Superlattices and Microstructures* 96 (2016) 121e13.
- [4]. A. Mesrane, F. Rahmoune, A. Mahrane and A. Oulebsir, *Hindawi Publishing Corporation International Journal of Photoenergy*, Volume 2015.
- [5]. Nargis Akter, *International Journal of Research in Engineering and Technology*, Volume: 03 Issue: 01 | Jan-2014.
- [6]. Benmoussa Dennai, A Hemmani, H-Ben Slimane and A.Helmaoui, *International Journal of Engineering Research & Technology (IJERT)*, Vol. 2 Issue 11, November – 2013.
- [7]. J.P. Enríquez, X. Mathew / *Solar Energy Materials & Solar Cells* 76 (2003) 313–322.
- [8]. Cullity D. B. *Elements of X-ray diffraction*, 2th edition, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., London, England, 1959.
- [9]. R. M. A. Azzam, N. M. Bashara, " *Ellipsometry and polarized light*", Nort-Holland, Amsterdam (1997)
- [10]. Dieter K. Schroder, " *Semiconductor material and device characterization*" 3rd. Edition, John Wiley and sons Inc. (2006) pp. 583.
- [11]. Mary Cruz Reséndiz González y Jesús Castellón-Uribe, *Encuentro de Investigación en Ingeniería Eléctrica*, Zacatecas, Zac, Marzo 17 —18, 2005
- [12]. D Schroder, *Semiconductor Material and Device Characterization*, Iee, Wiley, 2006.
- [13]. John R. Ferraro, Kazuo Nakamoto and Chris W. Brown, *Introductory Raman Spectroscopy*, Second edition, Elsevier, 2003.
- [14]. Ian-R. Lewis, *Handbook of Raman Spectroscopy*, CRC Press, 2001
- [15]. Ewen Smith, Geoffrey Dent, *Modern Raman Spectroscopy A Practical Approach*, John Wiley & Sons, 2005.
- [16]. Dieter K. Schroder, " *Semiconductor material and device characterization*" 3rd. Edition, John Wiley and sons Inc. (2006) pp. 604

Capítulo 4. Resultados.

En este capítulo se presentan resultados del proyecto de investigación. Primero se discute lo que se obtuvo en la simulación de parámetros de la hetero-estructura CdS/InGaN, con las diferentes configuraciones que se realizaron. Los resultados presentados se limitan únicamente a la eficiencia máxima obtenida en este trabajo con los parámetros optimizados. Posteriormente se analizan y discuten los resultados del depósito por baño químico de películas de CdS, sobre diferentes sustratos tales como; caracterización estructural, morfológica, óptica, etc., de las películas delgadas sintetizadas.

4.1. Simulación.

Los parámetros para la simulación de la hetero-estructura CdS/InGaN, se obtuvieron de la literatura y algunos parámetros faltantes tuvieron que ser calculados, al no estar reportados experimentalmente. En el caso de los parámetros del CdS fueron tomados de literatura de la referencia [1]. Para los parámetros del material ternario InGaN se realizó el cálculo de estos. En la tabla 4.1 se presentan los parámetros calculados del material InGaN, donde se realizaron diferentes cálculos a diferentes concentraciones de indio en el material. En la tabla 4.2 se presentan los parámetros del material CdS obtenidos de literatura, el espesor de la capa de CdS se tomó de la referencia [2] donde hacen el estudio del espesor del material, y reportan las mejores eficiencias a un espesor de 25 nm y a medida que el espesor aumenta la eficiencia disminuye.

El modelo matemático para la simulación se describe en el capítulo 2 y el método que se utilizó para la simulación descrita en el capítulo 3. En este último se describe el programa AMPS-1D y las ecuaciones en las que se basa: ecuación de Poisson, ley de acción de masas y ecuación de continuidad para electrones y huecos.

La primera configuración que se realizó fue un estudio de la hetero-estructura CdS/InGaN, con una interfaz para ver la eficiencia que se obtenía. Posteriormente se realizó el estudio de las propiedades del material ternario InGaN, para optimizar los parámetros, en función de resultados y parámetros reportados para este material. En la última etapa se simularon los parámetros del InGaN con mejor respuesta en cuanto eficiencia y los parámetros del material venta CdS reportados en literatura, además se optimizaron los parámetros de este último material, principalmente en los espesores obtenidos experimentalmente de diferentes trabajos, así como los obtenidos en este trabajo, ya que con los primeros resultados se pasó al depósito de CdS, para obtener una película con las características que se simularon.

La tabla 4.1 contiene los parámetros calculados para el material $p\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, con las ecuaciones que se han reportado en trabajos anteriores [3], se realizó los cálculos para obtener la brecha energética en un rango de 2 eV a 2.6 eV que corresponden a una concentración de In en la aleación ternaria InGaN de 34 % y 16 % respectivamente. El ancho de banda prohibida utilizada fue debido a que es aproximadamente la región del verde, del espectro visible donde la intensidad es mayor. Como se observa en la tabla todos los parámetros están en función de la concentración de In. A demás se realizó el cálculo del coeficiente de absorción para diferentes energías [3] como se ve en la figura 4.1 donde se utilizó para cada brecha de energética calculada de la tabla 4.1. Debido a que en trabajos anteriores reportados solo utilizan un coeficiente de absorción para diferentes concentraciones de In, en este trabajo se ajustaron los parámetros para que la simulación fuera en las condiciones de simulación más reales posibles.

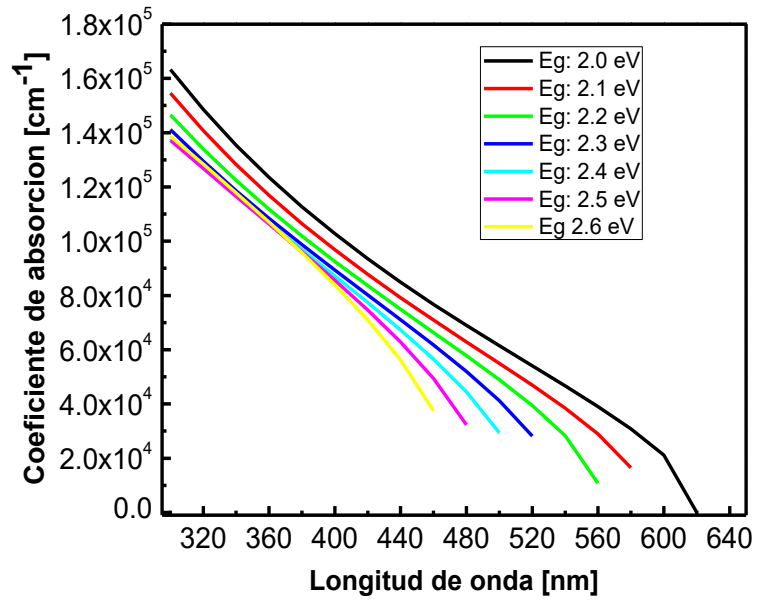


Figura 4.1 Coeficiente de absorción calculado del material InGaN en función de la concentración de indio

Tabla 4.1 Parámetros calculados del material InGaN en función de la concentración de In.

Parámetros	Valores en función de concentración de indio							unidades
	34	31.5	28	25	22	19	16	
Concentración de In(x)	34	31.5	28	25	22	19	16	%
Ancho de banda	2	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6	eV
Permitividad relativa	11.076	10.916	10.692	10.5	10.308	10.116	9.924	cm ² /Vs
Movilidad de electrones	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000	cm ² /Vs
Movilidad de huecos	170	170	170	170	170	170	170	cm ⁻³
Concentración de aceptores	1.00E+18	1.00E+18	1.00E+18	1.00E+18	1.00E+18	1.00E+18	1.00E+18	cm ⁻³
Concentración de donores	100	100	100	100	100	100	100	cm ⁻³
densidad de estado B.C	1.82E+18	1.86E+18	1.91E+18	1.95E+18	1.99E+18	2.03E+18	2.08E+18	cm ⁻³
densidad de estado B.V	2.99E+19	2.91E+19	2.78E+19	2.68E+19	2.57E+19	2.47E+19	2.36E+19	cm ⁻³
Afinidad electrónica	4.94	4.87	4.8	4.73	4.66	4.59	4.52	eV

Tabla 4.2 Parámetros del material CdS [1].

Parámetros	Valores	Unidades
Ancho de banda	2.42	eV
Permitividad relativa	8.9	cm ² /Vs
Movilidad de electrones	17	cm ² /Vs
Movilidad de huecos	5	cm ⁻³
Concentración de aceptores	10	cm ⁻³
Concentración de donores	1E+18	cm ⁻³
Densidad de estados B.C	1E+20	cm ⁻³
Densidad de estados B.V	1E+20	cm ⁻³
Afinidad electrónica	4.6	eV
Espesor	25	nm

4.1.1. Hetero-estructura CdS/InGaN con interfaz.

Esta primera configuración para la simulación de los parámetros de la hetero-estructura CdS/InGaN, con una interfaz como se ve en la figura 4.2 y con los parámetros de la tabla 4.3 se obtuvo una pequeña eficiencia de 2.423% y densidad de corriente de J_{sc} : 3.44 mA/cm², como se ve en la figura 4.3. El factor llenado (FF) de la curva I-V, como fue descrito en el capítulo 2 es un parámetro que, en conjunto con V_{oc} y J_{sc} , determinan la potencia máxima de una celda solar. Gráficamente el FF se observa en la figura 4.3, con un valor de 0.687, es una medida de la cuadratura de la celda solar, debido a que no se tiene una buena unión entre estos materiales se obtiene un FF bajo, se atribuye a pérdidas resistivas en nuestra unión, otro factor que afecta es la variación del V_{oc} donde obtuvimos un valor de 1.025 V, que nos indica la tensión máxima disponible en esta configuración, esto puede atribuirse a recombinaciones que fueron descritas en el modelo para la simulación, en trabajos anteriores para heterouniones han reportado como afectan principalmente el V_{oc} y el FF, tales recombinaciones que afectan son de efecto túnel, radiativas y no radiativas, de efecto túnel, termiónicas, recombinaciones en la interfaz de una unión de los materiales, y pérdidas por difusión, para confirmar estos efectos que causan la variación del V_{oc} y este al FF, se necesita un estudio más detallado. En este trabajo nos limitaremos a la eficiencia que podemos predecir en las diferentes configuraciones.

La baja eficiencia obtenida se atribuye a diversos factores tales como los parámetros de los materiales, las pérdidas en la interfaz, las pérdidas por difusión, etc., puesto que es la primera simulación el acople de los parámetros no están optimizados, como ya se mencionó se requiere de un estudio más detallado para obtener una mejor respuesta en la eficiencia en esta unión.

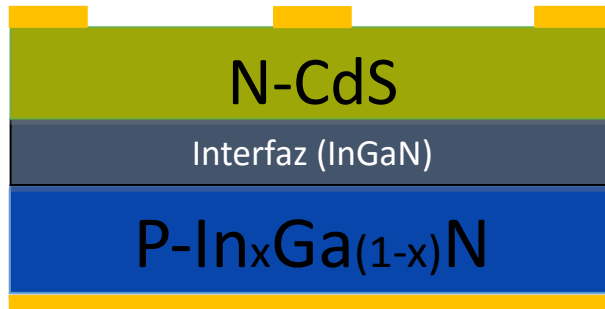


Figura 4.2 Diseño de la hetero-estructura n-CdS/p-InGaN/p-InGaN con una interfaz

Tabla 4.3 Parámetros de la simulación del diseño con interfaz.

Parámetros	n-CdS	Interfaz (In. ₂₂ Ga. ₇₈ N)	p-In. ₂₂ Ga. ₇₈ N	Unidades
Permitividad relativa	8.9	10.31	10.31	-
movilidad de electrones	17	1000	1000	cm ² /Vs
movilidad de huecos	5	170	170	cm ² /Vs
concentración de aceptores	10	3.00E+15	3.00E+17	cm ⁻³
concentración de donores	1.00E+18	10	10	cm ⁻³
ancho de banda	2.42	2.39	2.38	cm ⁻³
densidad de estados B.C.	1.00E+20	1.99E+18	1.99E+18	cm ⁻³
densidad de estados B. V.	1.00E+20	2.57E+19	2.57E+19	cm ⁻³
afinidad electrónica	4.6	4.6	4.6	eV

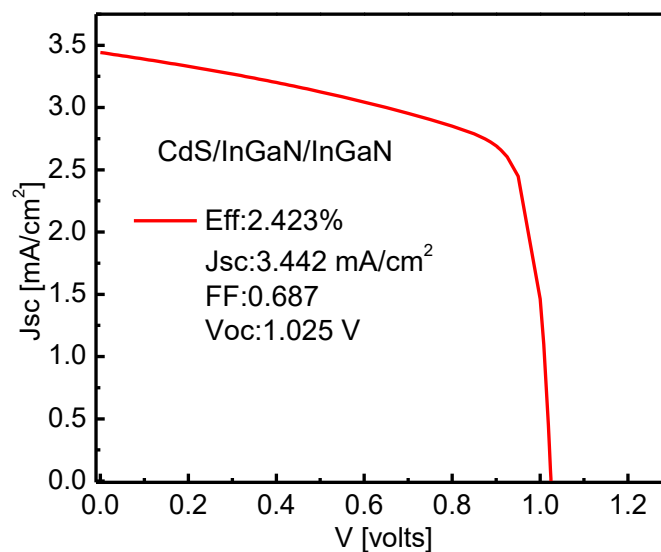


Figura 4.3 Curva I-V eficiencia de la hetero-estructura CdS/InGaN con interfaz.

Por la baja eficiencia obtenida en esta configuración, se procedió a realizar un estudio de la variación de los parámetros del material ternario InGaN, para ver los mejores parámetros que puedan ser acoplados con el material CdS, como se presenta a continuación.

4.1.2. Homo-estructura n-InGaN/p-InGaN.

Se realizó el estudio de los parámetros del material ternario InGaN, con el objetivo de optimizar los parámetros de la capa p-InGaN, principalmente la influencia en la eficiencia de espesores, movilidad de electrones y huecos, concentración de aceptores y donores, densidad de estados en las bandas de conducción y valencia. Los parámetros optimizados se utilizaron para la simulación en la hetero-estructura n-CdS/p-InGaN. Debido a que en la configuración con interfaz se obtuvo una eficiencia baja, surgió la necesidad de realizar un estudio del material InGaN, por lo que los parámetros utilizados son teóricos, esto nos ayuda a tener un mejor acople con los parámetros del CdS. En la figura 4.4 se presenta un esquema de la estructura de la celda.

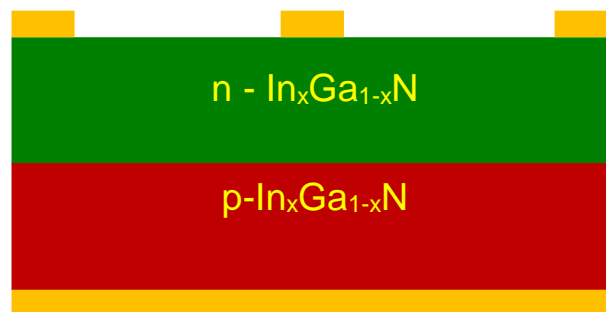


Figura 4.4 Diseño de la homo-estructura n-InGaN/p-InGaN.

Al realizar diferentes variaciones de los parámetros del material InGaN, principalmente estudio de espesor como se ve en la figura 4.5 a medida que incrementó en la capa tipo p, hasta un máximo de 400 nm, con el cual se obtuvo la

mejor eficiencia, esto se debe que a mayor espesor, la concentración de portadores de carga es mayor. Otros parámetros como la densidad de estados, movilidad, concentración In con el cual cambia el ancho de banda prohibida. Con estos valores optimizados se realizó la tercera configuración para la simulación de los parámetros de la hetero-estructura CdS/InGaN.

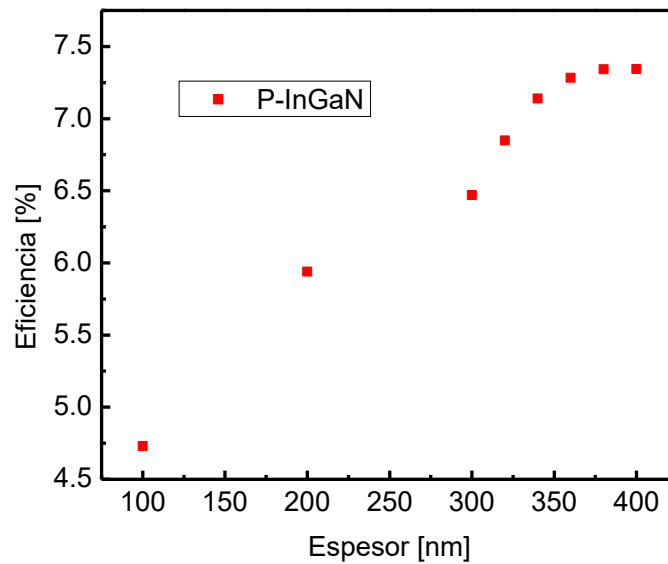


Figura 4.5 Aumento de la eficiencia con la variación del espesor de la capa p-InGaN, en la homo-estructura.

4.1.3. Hetero-estructura CdS/InGaN sin interfaz.

Anteriormente se presentaron resultados de configuraciones en el diseño de la hetero-estructura n-CdS/p-InGaN con una interfaz y una homo-estructura (n-InGaN/p-InGaN). En la configuración de la hetero-estructura n-CdS/p-InGaN sin interfaz, se realizó el estudio con los valores de las configuraciones anteriores principalmente del material InGaN. En la tabla 4.4 se presentan los parámetros optimizados, donde se obtuvo la mayor eficiencia de $\eta : 8.47\%$ y una densidad de corriente de $J_{sc} : 10.224 \text{ mA/cm}^2$ con la variación de los parámetros en la capa p, manteniendo constantes los valores del material tipo n (CdS), en la figura 4.7 se observa El esquema del diseño de la hetero estructura se observa en la figura 4.6.

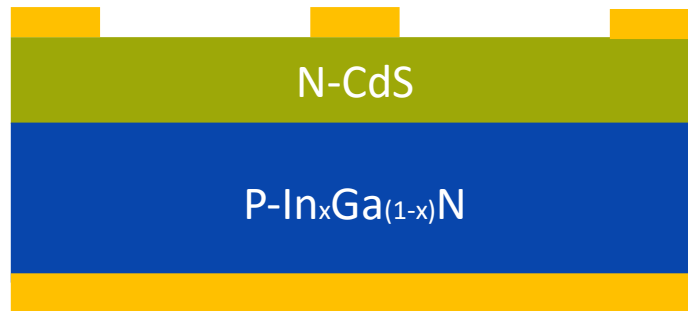


Figura 4.6 Diseño de la hetero-estructura CdS/InGaN.

Tabla 4.4 Parámetros optimizados.

Parámetros	n-CdS	p-InGaN
Permitividad relativa	8.9	11.08
Movilidad de electrones (cm ² /Vs)	17	170
Movilidad de huecos (cm ² /Vs)	5	1000
Concentracion de aceptores (cm ⁻³)	10	1e16
Concentracion de donores (cm ⁻³)	9E17	10
Ancho de banda (eV)	2.42	2
Densidad de estados B.C. (cm ⁻³)	1e20	1.82e18
Densidad de estados B.V. (cm ⁻³)	1e20	2.99e19
Afinidad electrónica (eV)	4.5	4.94
Espesores (nm)	25	300
Tiempo de vida (ns)	1	1-9

Como se ve en la figura 4.7 las curvas I-V de las mejores eficiencias obtenidas al realizar el aumento del tiempo de vida de los portadores [4] en el material tipo p-InGaN (figura 4.8) como han reportado en trabajos anteriores, el incremento de la eficiencia con tiempo de vida de los portadores de carga, se debe a que estos tendrán más tiempo para llegar a la banda de conducción antes de recombinarse. Por lo tanto es necesario obtener un material experimentalmente con un porcentaje de defectos o impurezas muy bajos, para obtener estos tiempos de vida de los portadores.

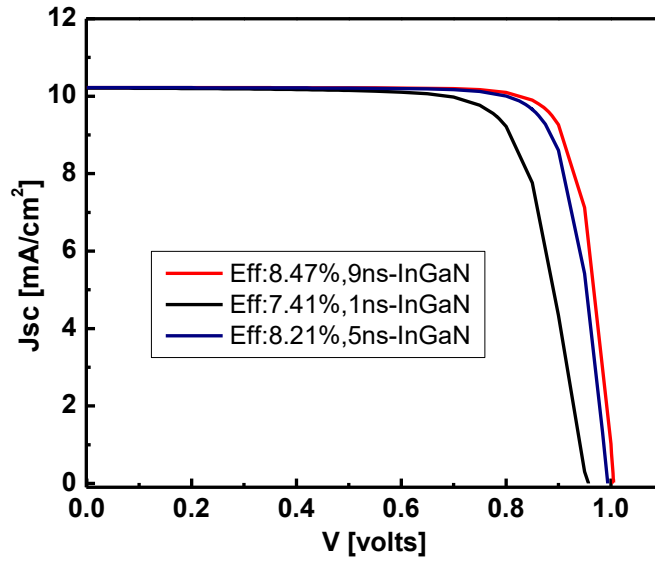


Figura 4.7 Curva I-V mejores eficiencias con la variación del tiempo de vida de los portadores de carga del material tipo p (InGaN).

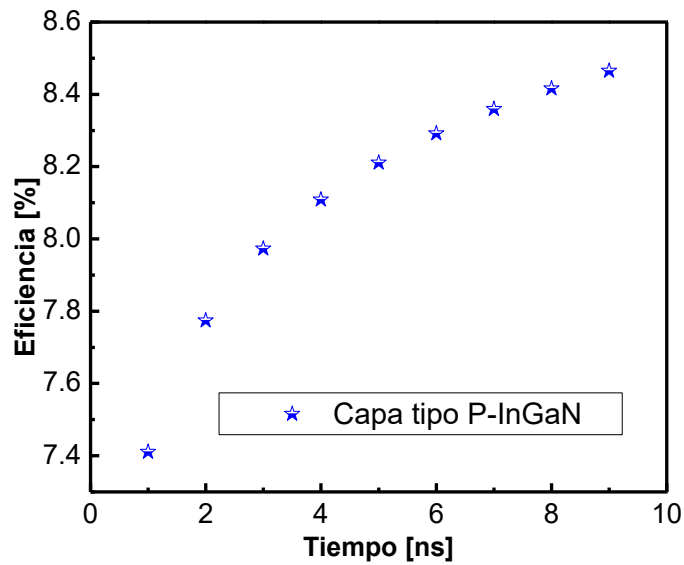


Figura 4.8 Eficiencia Vs tiempo de vida de los portadores mayoritarios en la capa p.

4.1.4. Estudio de variación de parámetros de CdS.

Una vez optimizado los parámetros en la configuración anterior de la heteroestructura CdS/InGaN (tabla 4.4), esta optimización se realizó en los parámetros del material InGaN. Se realizó nuevamente simulaciones ahora variando parámetros del material CdS, aunque inicialmente se tomaron valores experimentales reportados, nos dimos a la tarea de variar estos parámetros, para ajustar algunos que pueden ser mejorados experimentalmente. A continuación se presentan resultados de esta variación en los parámetros del material CdS, ahora manteniendo constantes los parámetros del material tipo n-InGaN.

Los parámetros que se variaron como el ancho de banda prohibida (figura 4.9) de 2.3 eV a 2.52 eV, el espesor de la capa (figura 4.10) fue variada en función de los valores obtenidos experimentalmente en el depósito de CdS desde 37.15 nm hasta 78.4 nm de espesor, por último se varió la densidad de estados (figura 4.11) de $1e20 \text{ cm}^{-1}$ a $9e17 \text{ cm}^{-1}$ [5]. Estas configuraciones se realizaron para ver la influencia de estos parámetros en la eficiencia de la celda. Con los parámetros optimizados (tabla 4.5) se procede a depósito de CdS y obtener una película con las características que se requieren para la formación de una celda solar. A demás se realizó una última configuración con la variación de la concentración de donores hasta un mínimo de $9E16 \text{ cm}^{-1}$, donde se obtuvo un incremento en la eficiencia siendo esta la mejor eficiencia obtenida en este trabajo (figura 4.12).

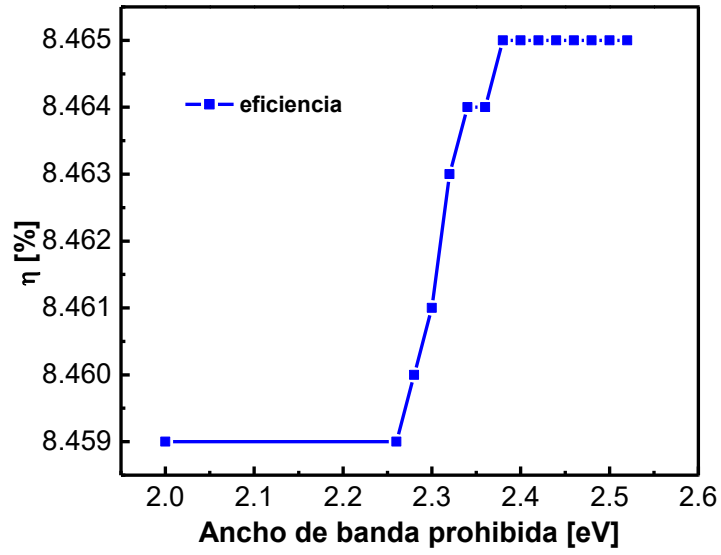


Figura 4.9 Curva de eficiencia al variar E_g del material tipo n-CdS en la hetero-estructura CdS/InGaN de la celda solar.

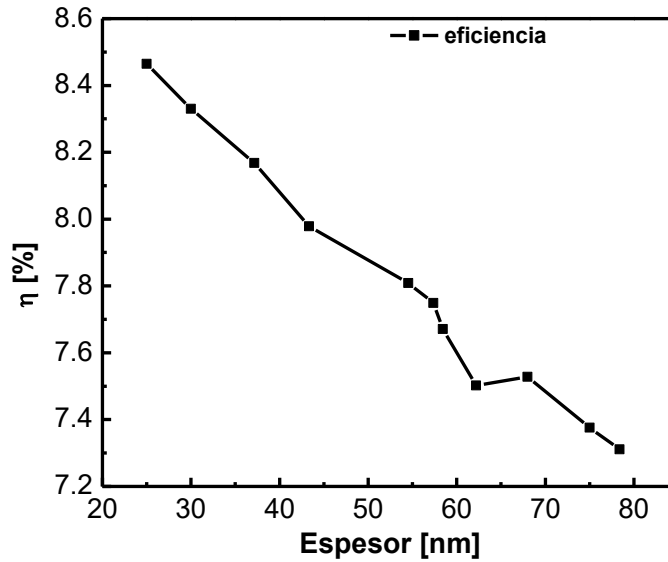


Figura 4.10 Curva de eficiencia al variar el espesor del material tipo n-CdS en la hetero-estructura CdS/InGaN de la celda solar.

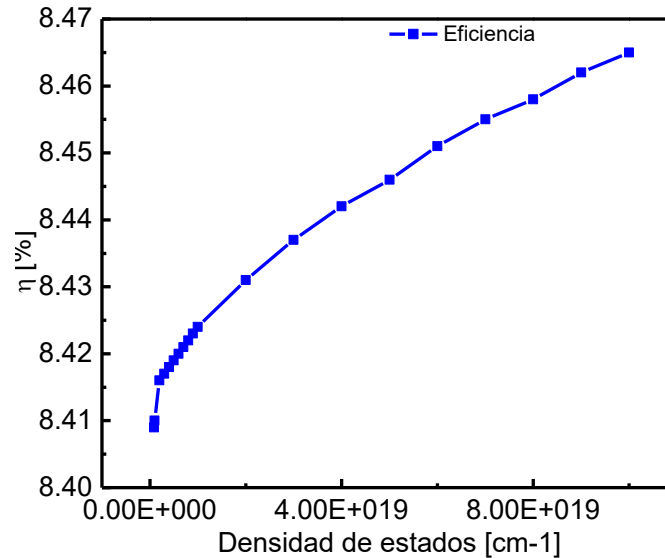


Figura 4.11 Variación de la eficiencia al cambiar la densidad de estado el material tipo n-CdS en la hetero-estructura sin interfaz.

En la tabla 4.5 se observan los parámetros que se variaron, para obtener la eficiencia de la figura 4.12. Es por ello que el depósito de películas de CdS se debe adecuar las condiciones para obtener las películas delgadas con las propiedades a las que se requieren para la simulación en la hetero-estructura con el material InGaN.

Tabla 4.5 Parámetros optimizados de ambos materiales CdS/InGaN.

Parámetros	InGaN	CdS	Unidades
Permitividad relativa	11.08	8.9	-
Movilidad de electrones	170	17	cm ² /V.s
Movilidad de huecos	1000	5	cm ² /V.s
Concentración de aceptores	1E16	10*	cm ⁻³
Concentración de donores	10	9E16	cm ⁻³
Ancho de banda	2	2.42	eV
Densidad de estados B.C.	1.82E18	1E20	cm ⁻³
Densidad de estados B.V.	2.99E19	1E20	cm ⁻³
Afinidad electrónica	4.94	4.5	eV
Espesores	300	25[1,2]	Nm
Tiempo de vida	9	1	ns

Por los resultados obtenidos puede predecirse una eficiencia de al menos η : 8.738% y densidad de corriente de J_{sc} : 10.54 mA/cm² en la hetero-estructura CdS/InGaN, como se muestra la curva I-V en la figura 4.12. Esta eficiencia es un valor aceptable y prometedor, para una nueva celda solar híbrida con estos dos materiales, ya que es el primer estudio que se realiza de esta heterounión, se necesita de un estudio más exhaustivo para acoplar los parámetros de ambos materiales, para obtener mejores eficiencia, ya que por las propiedades de los materiales que fueron descritas en el capítulo 1 tienen ambos materiales potencial para ser aplicados a celdas solares. Por otro lado en la figura 4.13 se realizó una comparación de la eficiencia obtenida en este trabajo, con las eficiencias reportadas por el Laboratorio Nacional de Energías Renovables de estados unidos (NREL por sus siglas en inglés). La eficiencia obtenida en este trabajo es prometedora como se ve en la figura 4.13 predecimos una eficiencia mayor a las que se han obtenido a lo largo de muchos años, para ser el primer análisis en comparación con los que tienen años de investigación.

En la optimización de los parámetros del CdS, el espesor óptimo que se encontró fue de 25 nm, es el valor que otros trabajos reportan [2]. En la figura 4.10 se observa como disminuye la eficiencia a mayores espesores. Esto debido a que el CdS es utilizado como material ventana en películas delgadas, con el objetivo que transmita la mayor radiación electromagnética posible y sea absorbido por el material tipo p. Pero a mayores espesores del CdS la transmitancia de la fuente de excitación disminuye (radiación electromagnética, radiación monocromática, etc.) para la generación de pares electrón-hueco.

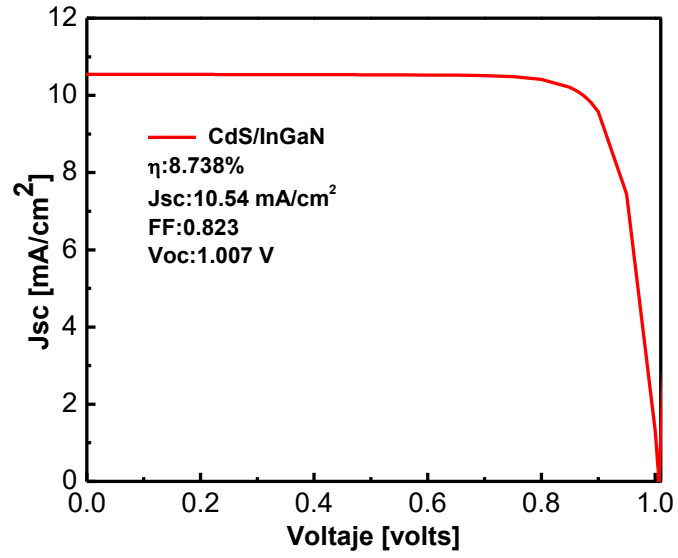


Figura 4.12 Curva I-V, optimización de parámetros del material CdS.

Best Research-Cell Efficiencies

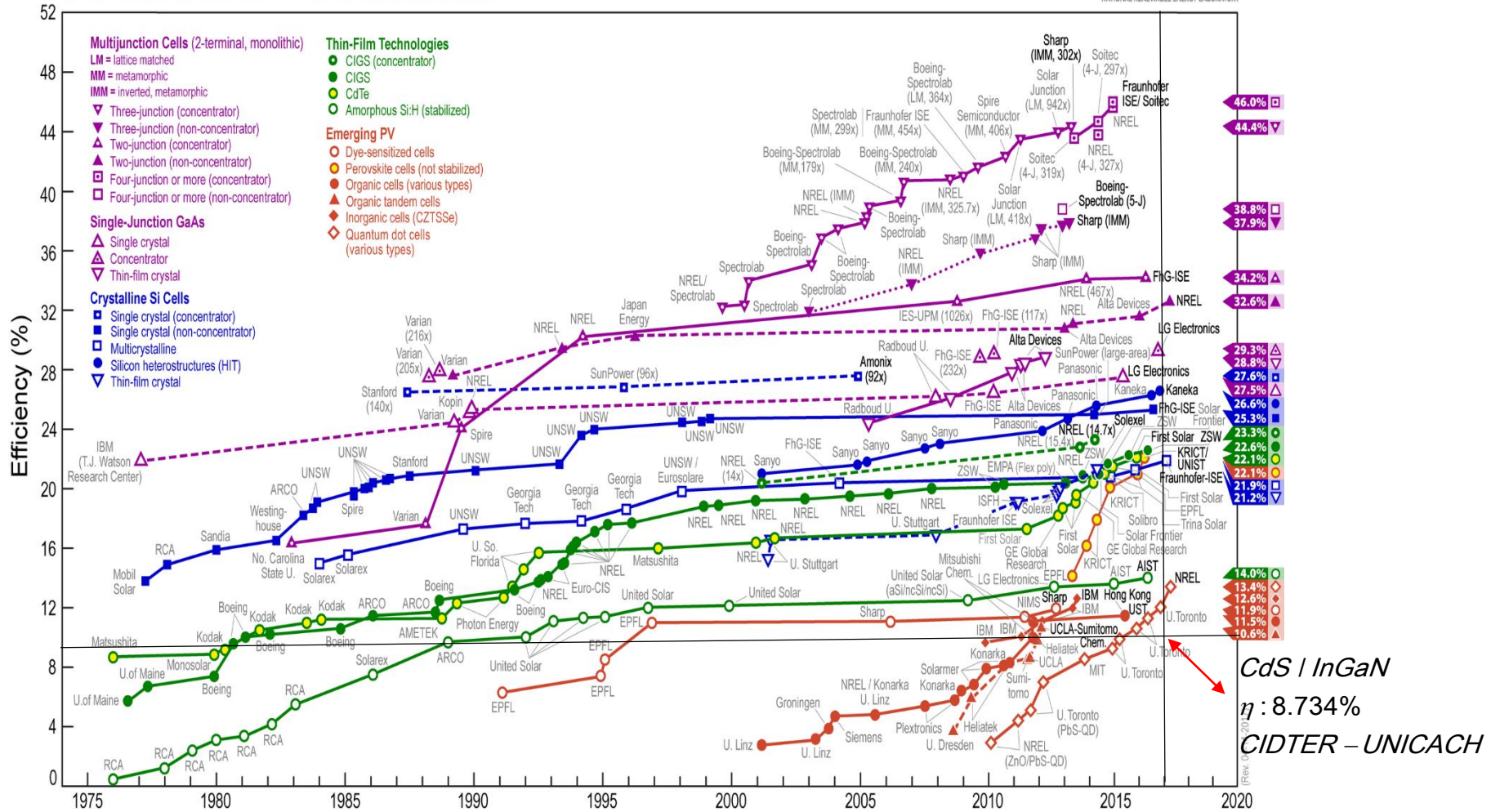


Figura 4.123 Comparación de la mayor eficiencia obtenida en este trabajo, con la gráfica de eficiencia de celdas solares del Laboratorio Nacional de Energía Renovable a lo largo del tiempo.

4.2. Resultados experimentales.

En esta sección se presentan los resultados experimentales del trabajo que es el depósito de CdS sobre diferentes sustratos (vidrio, silicio, arseniuro de galio y nitruro de galio), el cual se realizó por el método de Depósito por Baño Químico, variando la temperatura de 75, 80, 90 y 95 °C, posteriormente se procedió a la caracterización de dichas películas delgadas de CdS sobre los diferentes sustratos. En las siguientes páginas se presentan dichos resultados, donde se realizaron estudio estructural, transmisión óptica, elipsometría, fotoluminiscencia, Raman y morfológica de las diferentes muestras, con el objetivo de estudiar las propiedades del CdS en los diferentes sustratos y ver la variación de estas propiedades.

4.2.1. Depósito por Baño Químico de sulfuro de cadmio (CdS).

El depósito de CdS se realizó por el método de baño químico, el primer estudio se realizó sobre sustratos de vidrio (porta objetos), con el objetivo de encontrar las mejores condiciones en el depósito. Posteriormente se realizaron depósitos de CdS sobre sustratos de silicio (Si), arseniuro de galio (GaAs) y nitruro de galio (GaN).

La temperatura para los depósitos se realizó de 75 °C a 95 °C, en estas temperaturas se obtuvieron depósitos de películas a diferentes tiempos de 10 a 50 minutos, con el fin de obtener diferentes espesores. El propósito de la variación en la temperatura es obtener películas de CdS con una estructura cúbica y poder observar la influencia en las propiedades ópticas, morfológicas, etc. La variación del tiempo de depósito obtener el espesor deseado que se requiere en la hetero-estructura CdS/InGaN, ya que en la sección anterior, de resultados de la simulación numérica, de los parámetros de esta hetero-estructura se observó que el espesor ideal de la capa de CdS tipo n es de 25 nm. En la figura 4.14 se presenta de manera

resumida el proceso que se llevó a cabo para el depósito de CdS por el método de baño químico.

La figura 4.15 muestra las películas de CdS depositadas sobre vidrio a diferente tiempo, se observa que a medida que se incrementa el tiempo el color de la película pasa de amarillo claro hasta un color más intenso, esto debido al incremento del espesor.

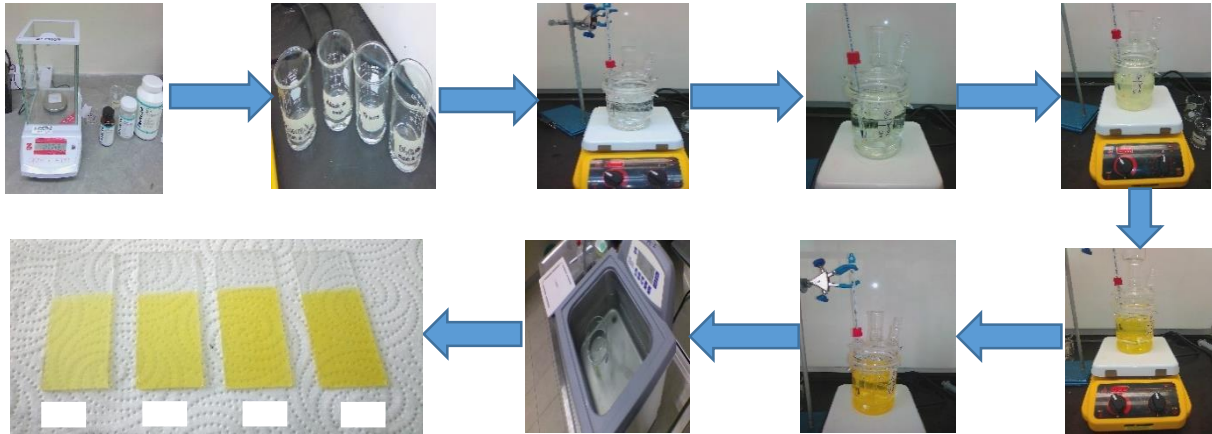


Figura 4.134 Proceso de depósito de película delgada de CdS por baño químico.

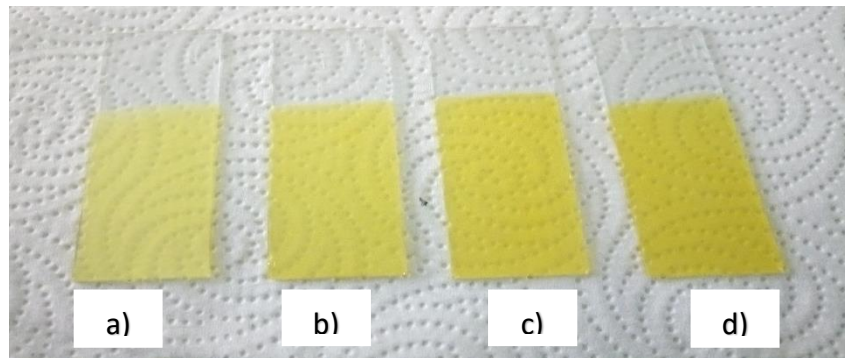


Figura 4.145 Películas depositadas por DBQ a temperatura de 90 °C y diferentes tiempos a) 10 minutos, b) 20 minutos, c) 30 minutos y d) 40 minutos.

4.2.2. Difracción de rayos X.

Las mediciones de DRX se realizaron en 2θ de 20° a 60° (CdS sobre vidrio) ya que es lo que trabajos anteriores han reportado donde se encuentran los principales picos de difracción para este material, en los sustratos de Si, GaAs y GaN se

incrementó el ángulo 2θ hasta 100° para poder visualizar los picos de difracción de los sustratos en los que se depositaron las películas de CdS.

En esta figura 4.16, se observan los patrones de difracción de Rayos X característico del CdS, que fueron depositados sobre vidrio en dos temperaturas diferentes 80°C y 90°C respectivamente y en cada una con diferentes tiempos en el depósito. En los difractogramas de las muestras de CdS, fue posible observar un pico principal con mayor intensidad alrededor de $2\theta = 26.6^\circ$. Esta señal podría corresponder a (002) plano hexagonal (tarjeta de rayos X: JC-PDF No. 01-80-00 o (111) plano cúbico (tarjeta de rayos X: JCPDS No. 01-075-0581 y N° 96-101-1252) característico de este material, en ambos difractogramas. Los picos débiles observados aproximadamente a 24.7° y 28.12° , son los picos que definen la estructura hexagonal, en estas muestras no se definen como es reportado en literatura [6], las películas obtenidas son policristalinas con una mezcla de cúbica-hexagonal como ha sido reportado [7]. En la tabla 4.6 se muestra el tamaño del cristal para las diferentes muestras donde se observa el incremento del tamaño del cristal con el espesor de las películas, en la sección de caracterización por elipsometría se presentan los espesores.

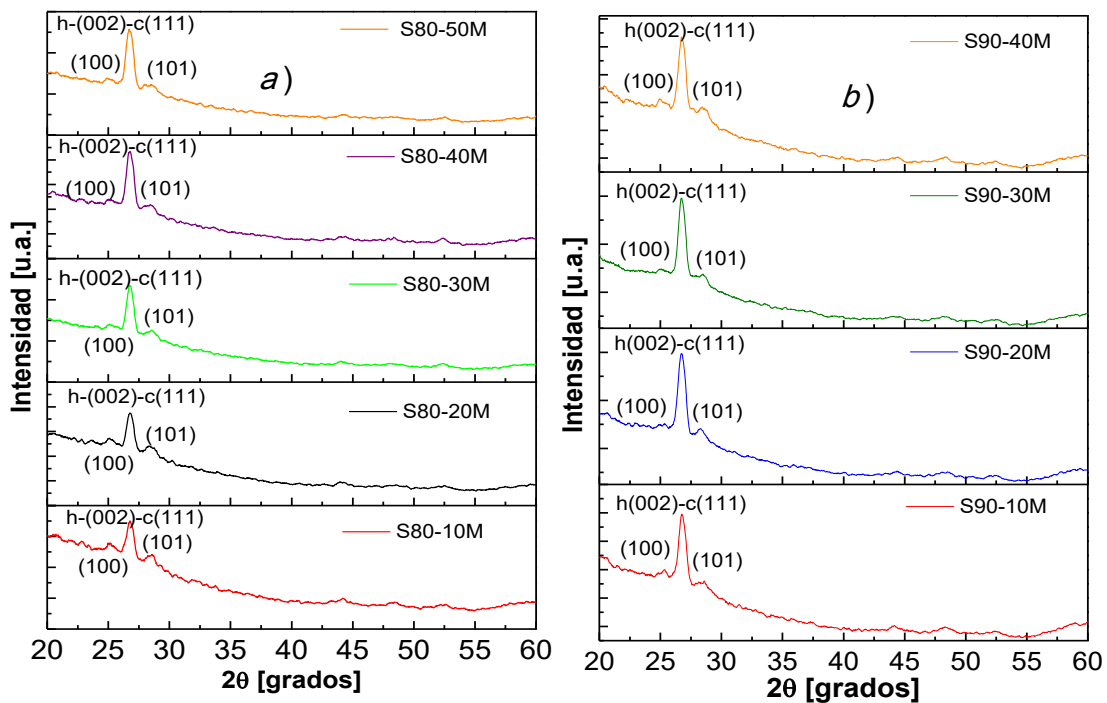


Figura 4.156 Patrones DRX de muestras de CdS depositadas a diferentes temperaturas a) 80°C y b) 90°C .

Tabla 4.6 Tamaño de cristal de películas de CdS, depositado sobre vidrio.

Muestra	Tamaño de cristal (nm)
M80-10	18.79
M80-20	18.85
M80-30	18.81
M80-40	18.03
M80-50	16.38
M90-10	16.78
M90-20	17.59
M90-30	17.68
M90-40	18.61

Los difractogramas de las muestras de CdS depositadas sobre sustratos de Si y GaAs cúbicos y GaN hexagonal, se muestran en la figura 4.17. Se observa el crecimiento de películas epitaxiales de CdS sobre estos sustratos, en las dos temperaturas de 80 °C y 90 °C. El pico principal para el CdS aproximadamente a 26.6° se observa atenuado por la intensidad de los picos de los sustratos, esto debido a la cristalinidad de estos. Para las muestras sobre Si y GaAs se observa un solo pico que corresponde al plano (111) cúbico. Para las películas depositadas sobre GaN se observan tres picos el principal en el plano (002) que corresponde a la fase hexagonal, los otros dos picos son los que definen la fase hexagonal como se reporta en literatura [6], estos se encuentran aproximadamente a 24.7° y 28.2° que corresponden a los planos (100) y (101) respectivamente.

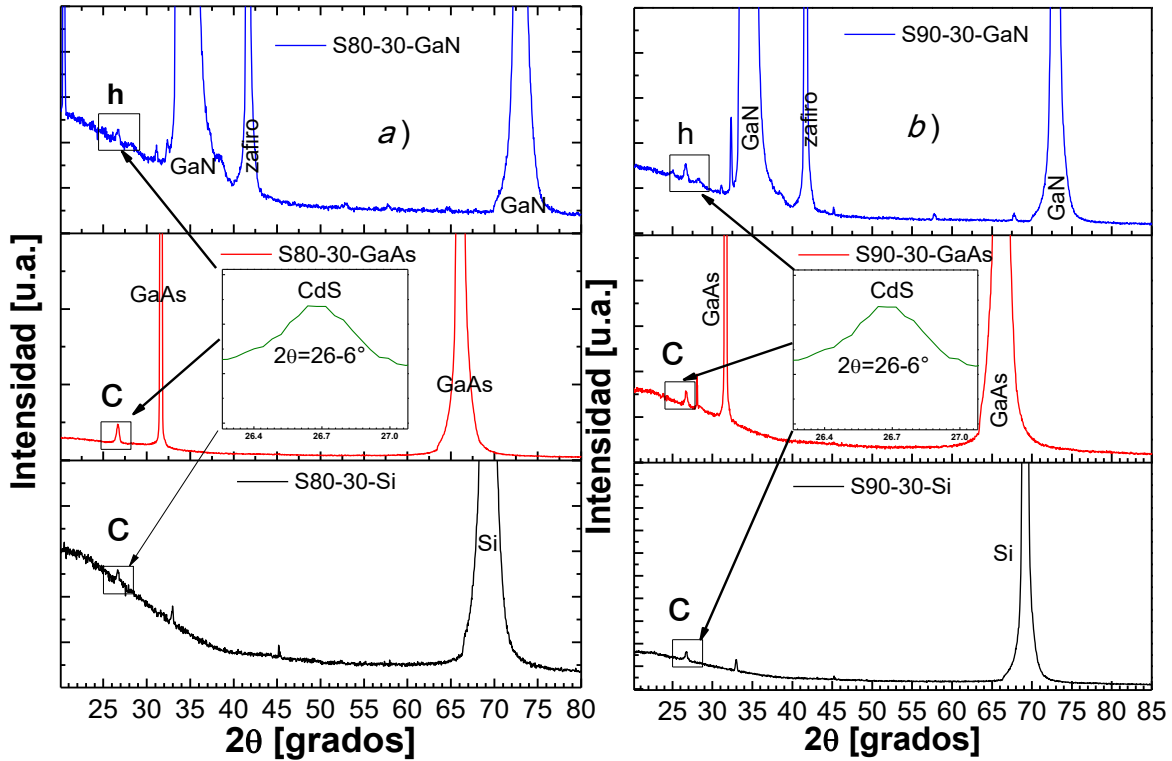


Figura 4.167 DRX de películas de CdS depositas sobre sustratos de Si, GaAs y GaN, con temperaturas de a) 80 °C y b) 90 °C.

Con esto se concluye que se pueden obtener películas epitaxiales de CdS por depósito en baño químico. La textura de las muestras de CdS sobre los sustratos se confirmó mediante diagramas de polos, que es una medición de escaneo phi-psi que indica la orientación del plano específico, en la siguiente sección se describen estos resultados.

4.2.2.1. Diagrama de polos.

La figura 4.18 muestra las imágenes 2D de los diagramas de polos para las películas de CdS depositadas en sustratos de GaAs. Fig. 1a), c) a $2\theta = 26.6^\circ$ y 1b), d) a $2\theta = 43.9^\circ$ corresponde a las texturas de los planos de películas de CdS depositadas a 80 °C y 90 °C, respectivamente. Como la reflexión a $2\theta = 26.6^\circ$ corresponde a (002) plano hexagonal perpendicular a la superficie, se detectó cualquier señal en

$\Psi = 0^\circ$; pero cuatro picos con alta intensidad se ubicaron alrededor del ángulo de inclinación de $\Psi = 54.3^\circ$, que es el ángulo formado para los planos (001) y (111) en la estructura de la mezcla de zinc-blenda, ver figura 4.16 a), c). La estructura cúbica de las películas CdS depositadas en GaAs se confirmó para la reflexión de cuatro simetrías ($\Delta\phi = 90^\circ$) a $2\theta = 43.9^\circ$, el reflejo del plano cúbico (220) se encuentra aquí. En este caso, se identificaron cuatro picos en el ángulo de inclinación de $\Psi = 45^\circ$, que es el ángulo formado para los planos (001) y (110) en la estructura cúbica, véase la figura 4.16 b), d).

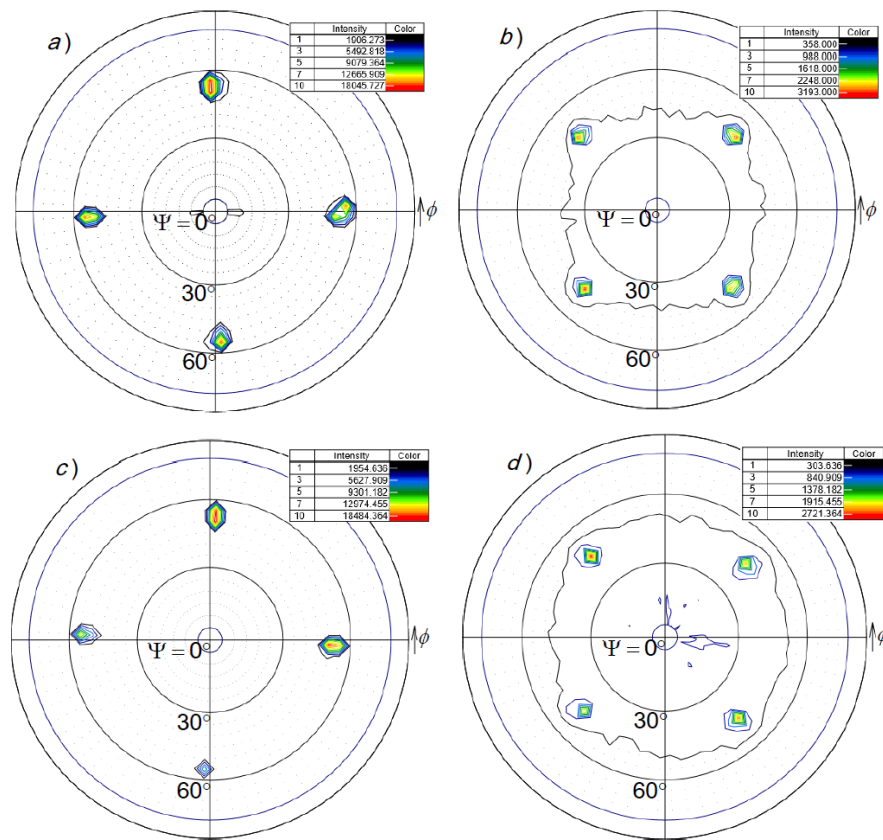


Figura 4.18 Diagramas de polos para CdS en sustratos GaAs a $2\theta = 26.6^\circ$ depositados a) 80°C , b) 90°C y $2\theta = 43.9^\circ$ depositados c) 80°C , d) 90°C .

La figura 4.19 muestra las imágenes 2D de los diagramas de polos de las películas de CdS depositadas en sustratos de GaN. Figura 4.17 a), c) a $2\theta = 26.6^\circ$ y 4.17 b), d) a $2\theta = 43.9^\circ$ corresponde a las texturas de los planos de películas de CdS depositadas a 80°C y 90°C , respectivamente. La textura a $2\theta = 26.6^\circ$ muestra un

pico ancho (esto indica que la estructura cristalina no está ordenada) preferiblemente orientada perpendicularmente a la superficie en $\Psi = 0^\circ$, esta reflexión corresponde al plano (002) hexagonal. También este tipo de señal se atribuye a la estructura policristalina; es importante notar que no hay señal para planos cúbicos en $\Psi = 54.3^\circ$. Sin embargo, a $\Psi = 60^\circ$ es posible observar 3 picos débiles ($\Delta\phi = 120^\circ$) que corresponden al plano (11-2), ver figura 4.17 a), c). La estructura hexagonal de las películas CdS depositadas en GaN se confirmó para la reflexión de seis simetrías ($\Delta\phi = 60^\circ$) a $2\theta = 43.9^\circ$, el reflejo del plano (110) hexagonal se localiza aquí. En este caso, se identificaron seis picos en el ángulo de inclinación de $\Psi = 60^\circ$, ver la figura 4.16 b), d). Comparando los diagramas de polos a $2\theta = 43.9^\circ$ para CdS en sustratos GaAs (cúbicos) y GaN (hexagonales), confirmamos la influencia de los sustratos para la estructura epitaxial CdS con los mismos parámetros del baño químico.

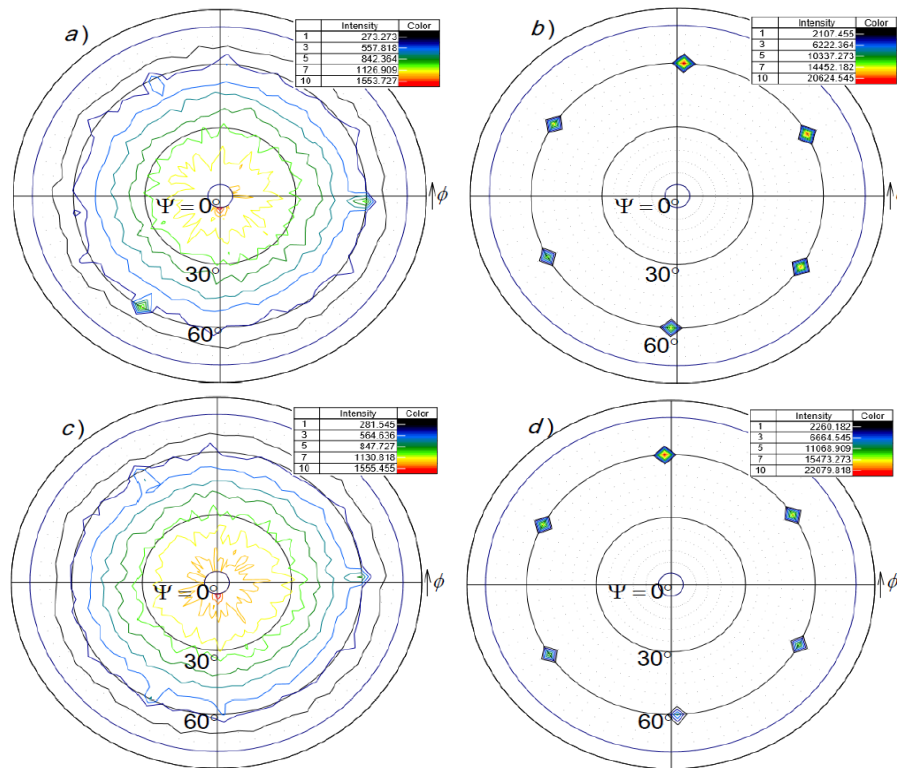


Figura 4.19 Diagramas de polos para CdS en sustratos GaN a $2\theta = 26.6^\circ$ depositados a) 80°C , b) 90°C y $2\theta = 43.9^\circ$ depositados a) 80°C , b) 90°C .

4.2.3. Espectroscopía Raman.

Las películas de CdS fueron caracterizadas por espectroscopía Raman, con la finalidad de comprobar la fase cristalina de las películas de CdS depositadas sobre los diferentes sustratos. En las siguientes figuras se observan la dispersión fonónica de las diferentes muestras y como varían la emisión respecto a la temperatura del depósito, así como en los diferentes sustratos. En la figura 4.20 se presentan los espectros de películas de CdS sobre vidrio, donde se observan los desplazamientos de los picos a longitudes de ondas mayores, se confirma la estructura policristalina de las películas (cúbica-hexagonal), los desplazamientos de los picos característicos de este material se debe a la calidad cristalina del material así como del tamaño de grano que se obtuvieron, esto se ve en el estudio de la superficie de las películas por microscopio de fuerza atómica.

La figura 4.21 muestra los espectros Raman de películas de CdS depositadas sobre sustratos Si, GaAs y GaN a 80 °C y 90 °C. Para las películas depositadas en sustratos GaAs, el fonón LO (001) se identificó a 290 cm^{-1} [8] y el fonón A1LO ubicado a $302,35\text{ cm}^{-1}$ se atribuyó a CdS con estructura cúbica, no fue posible determinar otros picos. Por otro lado, para las películas depositadas en sustratos GaN, los picos a 418 cm^{-1} y 569 cm^{-1} son el modo A1 de Al_2O_3 (zafiro) [9] y el fonón E2TO del GaN [10]. Y los picos a 303.19 cm^{-1} y 611 cm^{-1} se atribuyeron a A1LO y su primer fonón del CdS hexagonal [11]. Como es posible observar en el cuadro de la figura 4.19 d), el modo de fono A1LO para la estructura cúbica y la estructura hexagonal tiene un ligero desplazamiento de $0,84\text{ cm}^{-1}$. Aunque los autores anteriores han indicado el mismo valor de A1LO para ambas fases cristalinas como se muestra en la Tabla 4.7, la estructura cristalina en nuestras películas CdS cúbicas no tiene inclusión hexagonal; entonces el 302.35 cm^{-1} es el primer fonón A1LO experimental reportado para películas monocristalinas CdS cúbicas. Como otros semiconductores II-V o III-V, el pico del fonón para la fase cúbica y hexagonal es ligeramente diferente. Por otro las películas depositadas sobre sustratos de Si presentan la misma característica de los sustratos de GaAs teniendo la emisión del

A1LO aproximadamente a 303.38 cm⁻¹ para ambas temperaturas que es el valor que otros trabajos han reportado.

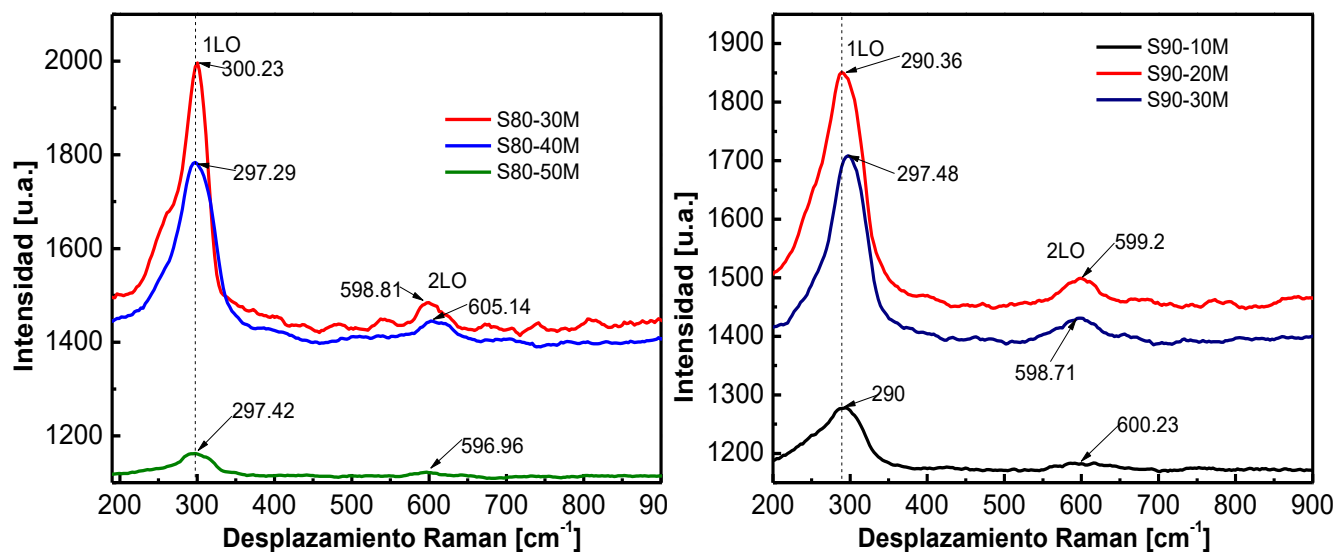


Figura 4.20 Espectros Raman de películas de CdS depositadas sobre vidrio a temperaturas de a) 80 °C y b) 90 °C.

Tabla 4.7 Resultados experimentales reportados para el modo fonon A₁(LO) en CdS cúbico y hexagonal.

	A ₁ (LO)	Referencia
β-CdS	305	[12]
	305	[15]
	305	[16]
	305	[14]
	302.35	Este trabajo
α-CdS	305 ±3	[12]
	302	[17]
	305	[13]
	305	[14]
	303.19	Este trabajo

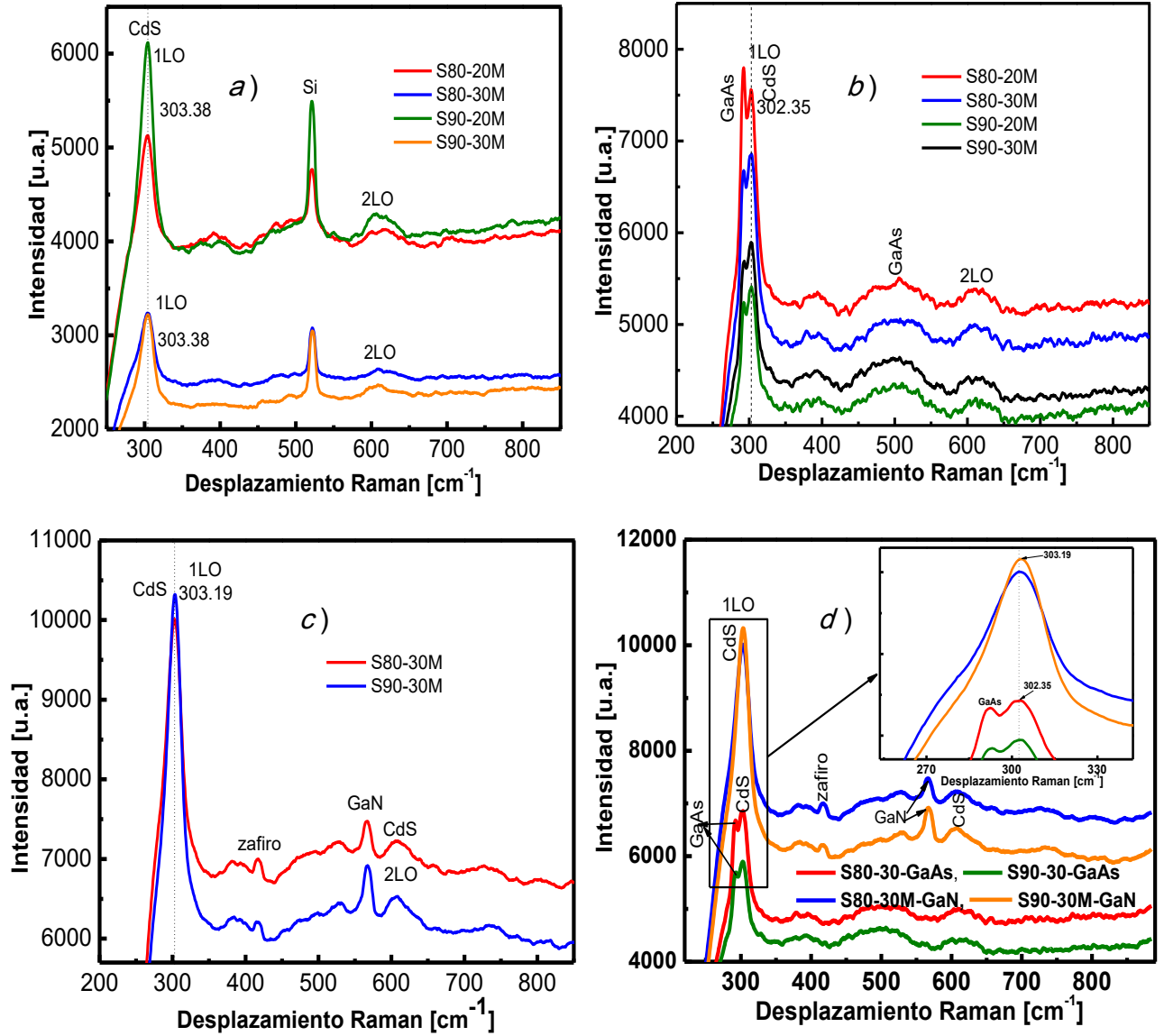


Figura 4.21 Espectroscopia Raman de películas de CdS depositadas sobre a) Si, b) GaAs, c) GaN y d) desplazamiento de 1LO de la fase cubica a la hexagonal a diferentes temperaturas, GaN (líneas azul y naranja) y GaAs (líneas roja y verde).

4.2.4. Caracterización óptica.

Los espectros de transmisión óptica se obtuvieron mediante un espectrofotómetro UV-Vis-3600. Los espectros de transmisión de las películas delgadas de CdS depositadas por la técnica DBQ se muestran en la figura 4.22 depositadas a temperaturas de 80 °C y 90 °C. En las gráficas se observó que la transmisión es afectada por la calidad cristalina del material, así como el espesor del mismo, a mayor espesor menor transmitancia. Por otra parte en la mayoría de las muestras se observa que se obtuvieron muestras que transmiten en la región del visible y se concluye que son buenas películas para la aplicación a celdas solares ya que transmiten demasiado en esta región del espectro solar. En la figura 4.23 a) y b) se muestran las curvas del ancho de banda prohibida de las muestras de CdS, donde se obtuvieron E_g de 2.4 eV hasta 2.45 eV para las películas depositadas con temperatura de 80 °C y para las de 90 °C desde 2.39 a 2.42 eV. Además se observó que a mayor espesor el E_g del CdS disminuye y a menor aumenta como en literatura es reportado [18]. La transmitancia de estas muestras es de CdS depositado sobre sustratos de vidrio.

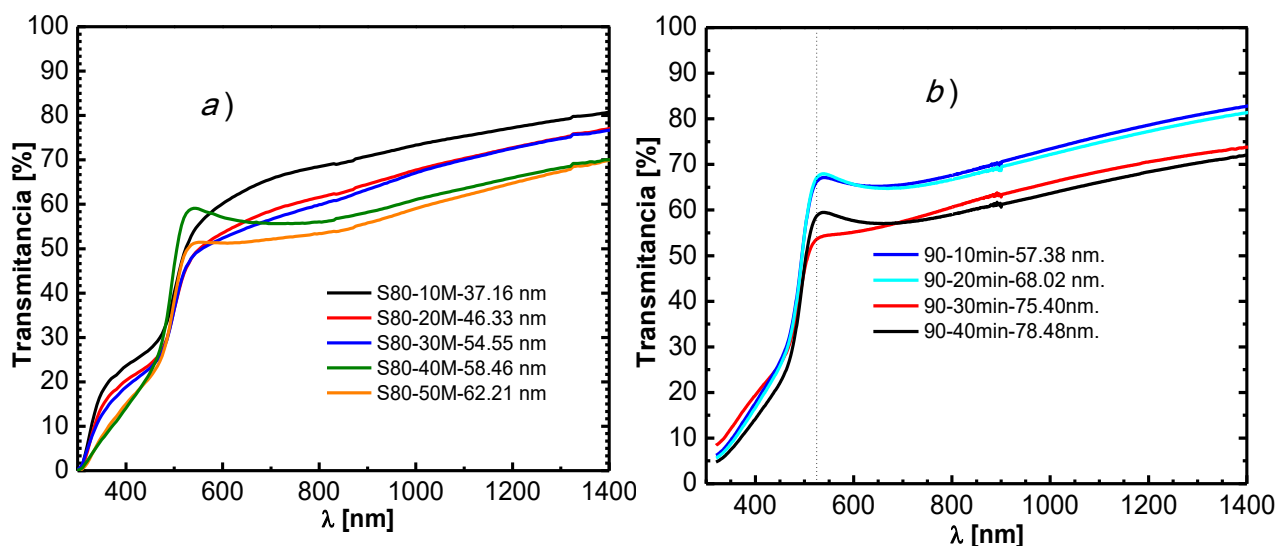


Figura 4.22 Espectros de transmitancia de muestras de CdS depositada a a) 80 °C y b) 90 °C, sobre sustratos de vidrio.

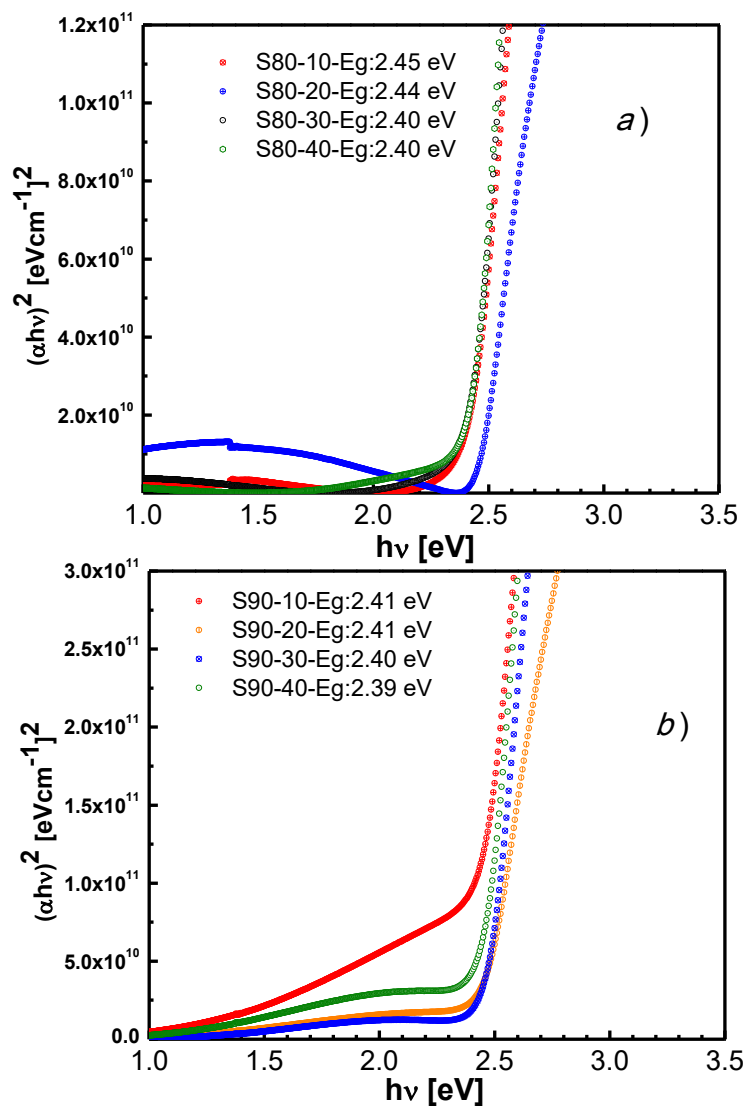


Figura 4.173 Ancho de banda prohibida de películas de CdS depositadas sobre vidrio a temperaturas de a) 80 °C y b) 90 °C.

4.2.5. Elipsometría.

En la tabla 4.8 se presentan resultados de elipsometría de películas de CdS, que fueron depositadas sobre vidrio por baño químico (DBQ). También se enlistan los resultados obtenidos como son el índice de refracción y los espesores de películas, donde la muestra con mayor espesor fue de 78.484 nm con una temperatura de 90 °C y 40 minutos en el depósito. Por otro lado las películas con menores espesores son en las temperaturas de 85 °C y 75 °C, con esto se observa que la temperatura

y el tiempo son condiciones determinantes en el espesor de las películas, así como en otras propiedades como se observan en los anteriores y posteriores resultados. En cuanto al índice de refracción el mayor valor fue de 2.3686 de la película en 80 °C y tiempo de 30 minutos en el depósito, este valor tiene una diferencia de 6.475% de diferencia con el valor teórico reportado para el CdS (2.5), este bajo valor del índice de refracción se debe a que el contenido de azufre en el material es bajo y la concentración de cadmio es mayor, esto afecta a la flexión de la luz, así mismo no se tiene la relación de 1:1 de los materiales, además en las películas con menos concentración de ambos materiales (menor espesor de capa) el valor fue más bajo en el índice de refracción hasta un valor mínimo de 1.9167. Las muestras con mayores espesores fueron los depósitos de 80 °C y 90 °C, se ve el aumento del espesor de las películas con el tiempo.

Tabla 4.8 Índice de refracción complejo y espesores de películas.

Muestras T-t	longitud de onda $\lambda_1=6328 \text{ \AA}$		longitud de onda $\lambda_2=8242 \text{ \AA}$		Espesor (nm)
	n	k	n	k	
S75-30	1.9167	0.1425	1.8459	0.125	11.002
S75-40	1.9749	0.0482	1.936	0.0381	20.121
S75-50	1.9769	0.0727	1.9126	0.043	15.259
S80-10	2.3212	0.1919	2.2192	0.1543	37.156
S80-20	2.3312	0.2144	2.2197	0.1723	46.332
S80-30	2.3686	0.213	2.2487	0.1749	54.555
S80-40	2.3669	0.2261	2.2675	0.1507	58.456
S80-50	2.3513	0.2377	2.2751	0.1314	62.209
S85-10	2.2409	0.2745	2.1624	0.1961	14.67
S85-20	2.2482	0.2745	2.1792	0.18	16.054
S85-30	2.2058	0.3329	2.1213	0.2244	17.75
S85-40	2.1796	0.2402	2.106	0.1746	16.642
S90-10	2.2747	0.2472	2.1888	0.1936	57.388
S90-20	2.2556	0.2703	2.2032	0.1934	68.015
S90-30	2.2655	0.2655	2.2139	0.1973	75.407
S90-40	2.2499	0.2852	2.2031	0.2018	78.91

4.2.6. Fotoluminiscencia.

El análisis de fotoluminiscencia de las películas nanoestructuradas de CdS se realizó a temperatura ambiente para determinar las diferentes emisiones presentes en el material, las cuales están relacionadas a) con los cambios estructurales observados en el análisis de DRX y b) las variaciones de las propiedades ópticas determinadas por la transmitancia y elipsometría.

En el espectro de fotoluminiscencia (figura 4.24) se identificaron seis picos de transición a 1.8 eV (688.8 nm), 2.0 eV (619.9 nm), 2.3 eV (539.1 nm), 2.4 eV (516.66 nm), 2.9 eV (427.5 nm) y 3.0 eV (413.33 nm); como se ve en la *figura 10*. Todos los picos son amplios, sugiere dos o más contribuciones son presentes. Sin embargo, en este análisis nos enfocarnos en las contribuciones de los picos principales; porque predominan a temperatura ambiente y determinan el comportamiento de los dispositivos basados en CdS. De acuerdo con los resultados de DRX y los espectros de transmitancia que considera que los picos localizados entre 2.3 eV y 2.41 eV podría atribuirse a un par donador-aceptor (PDA) o cerca del borde de la banda un pico excitónico para la fase cúbica [19, 20, 21]; esta emisión se denomina "banda verde". Los picos de emisión con una longitud de onda mayor que las transiciones PDA se atribuyen a un defecto intrínseco situado en la superficie de los nanocristales y vacancias de azufre [22, 23, 24, 25]; estos defectos generan niveles profundos (NP) en la brecha de energía del CdS. Algunas muestras, presentan esta 'emisión roja' para región de 1.8 eV - 2.0 eV. La emisión a 1.8 se debe a la transición entre 2 NP y la emisión a 2 eV se debe a una transición de un NP (a 560 meV de la banda de conducción) a la banda de valencia (BV) [22, 25]. Los picos de emisión con una longitud de onda menor que un PDA se denominan "banda azul", que se atribuye a la distribución del tamaño del grano con confinamiento cuántico [19, 20]. En algunas muestras se observaron emisiones con un máximo de 2.9 eV a 3.0 eV. El cambio a una longitud de onda más corta (energías más altas) se atribuye a la disminución en el tamaño de los nanocristales.

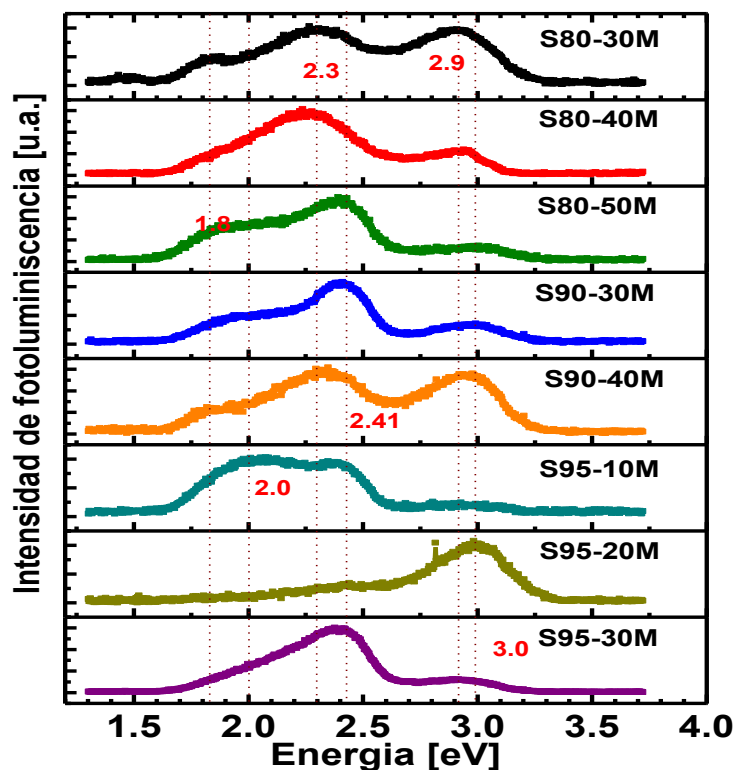


Figura 4.184 Espectros de fotoluminiscencia de muestras de CdS depositadas sobre vidrio con diferentes temperaturas en el depósito.

Como se muestra en los resultados de la caracterización óptica, es posible favorecer o seleccionar un rango de emisión adecuado que varíe solo la temperatura del baño y/o el tiempo de deposición de la muestra. A baja temperatura (80 °C) y cortos tiempos, la película CdS está formada por una gran cantidad de nanocristales de diferentes tamaños, en los que se produce el desplazamiento Stokes [20,26]; favoreció la emisión en la 'banda azul'. También están presentes las transiciones PDA (banda verde), que indica una estructura de fase predominante en el volumen, y la emisión de la "banda roja" es débil genera para las transiciones NP, ver la figura 4.24 (S80-30). A la misma temperatura, pero aumentando el tiempo de depósito, se favorece la calidad cristalina de la película, lo que se evidencia por la disminución de la "banda azul". Sin embargo, la "emisión roja" debida a un defecto intrínseco continúa presente, ver la figura 4.24 (S80-40 y S80-50).

A alta temperatura (90 °C) las películas tienen una mejor calidad cristalina, como se muestra en la emisión en la "banda verde" observada en los espectros FL, ver la figura 4.24 (S90-30). Este resultado concuerda con los resultados de la transmitancia y los resultados obtenidos por otros autores. La emisión de otras bandas continúa presente con una intensidad débil. Si el tiempo de depósito aumenta, se favorece la formación del nanocristal en la superficie de las películas y la intensidad de la "banda azul" aumenta considerablemente, véase la figura 4.24 (S90-40). Finalmente, si las películas de CdS se depositan a una temperatura más alta (95 °C) y un tiempo corto, la densidad de defectos intrínsecos aumenta las transiciones de NP-VB, véase la figura 4.24 (S95-10). Si el tiempo de depósito aumenta, se favorece la formación del nanocristal en la superficie de las películas y la intensidad de la "banda azul" aumenta considerablemente, véase la figura 4.24 (S95-20). Si el depósito de CdS continúa (S95-30), predomina la 'banda verde' y es más intensa.

4.2.7. Caracterización morfológica por Microscopio de Fuerza Atómica (AFM).

La morfología de las películas fue analizada con Microscopio de Fuerza Atómica (AFM por sus siglas en ingles), en un área de 5 X 5 μm en las diferentes muestras de CdS depositados sobre los sustratos. A continuación se presentan las imágenes 2D y 3D de la morfología de las películas que se observaron en los diferentes sustratos. En la tabla 4.9 se muestra la rugosidad que se obtuvieron en las películas, se observó la influencia de la temperatura en las propiedades morfológicas de las películas en las muestras de CdS depositadas sobre vidrio, a menor temperatura la rugosidad es mayor. A demás se observa que a medida que se incrementa el tiempo de depósito la rugosidad disminuye en ambas temperaturas y se puede apreciar en las imágenes AFM de CdS en las figuras 4.25 y 4.26 sobre vidrio con diferentes temperaturas de depósito; las muestras de CdS depositado sobre sustratos de Si, GaAs y GaN en las figura 4.27 para temperaturas de 80 °C y 90 °C. El crecimiento

de las películas de CdS es tipo Volmer-Weber como pirámides cúbicas truncadas [27].

Tabla 4.9 Rugosidad de muestras de películas de CdS depositadas sobre diferentes sustratos.

Muestras (T-t-S)	Rugosidad (nm)	Tamaño de grano (nm)
S80/30/V	52.59	156.00
S80/40/V	41.90	146.10
S90/30/V	38.91	76.77
S90/40/V	35.96	186.77
S80/30/GaAs	3.17	83.03
S90/30/GaAs	9.39	76.16
S80/30/Si	18.6	281.15
S90/30/Si	27.1	221.85
S80/30/GaN	94.3	293.02
S90/30/GaN	152	512.17

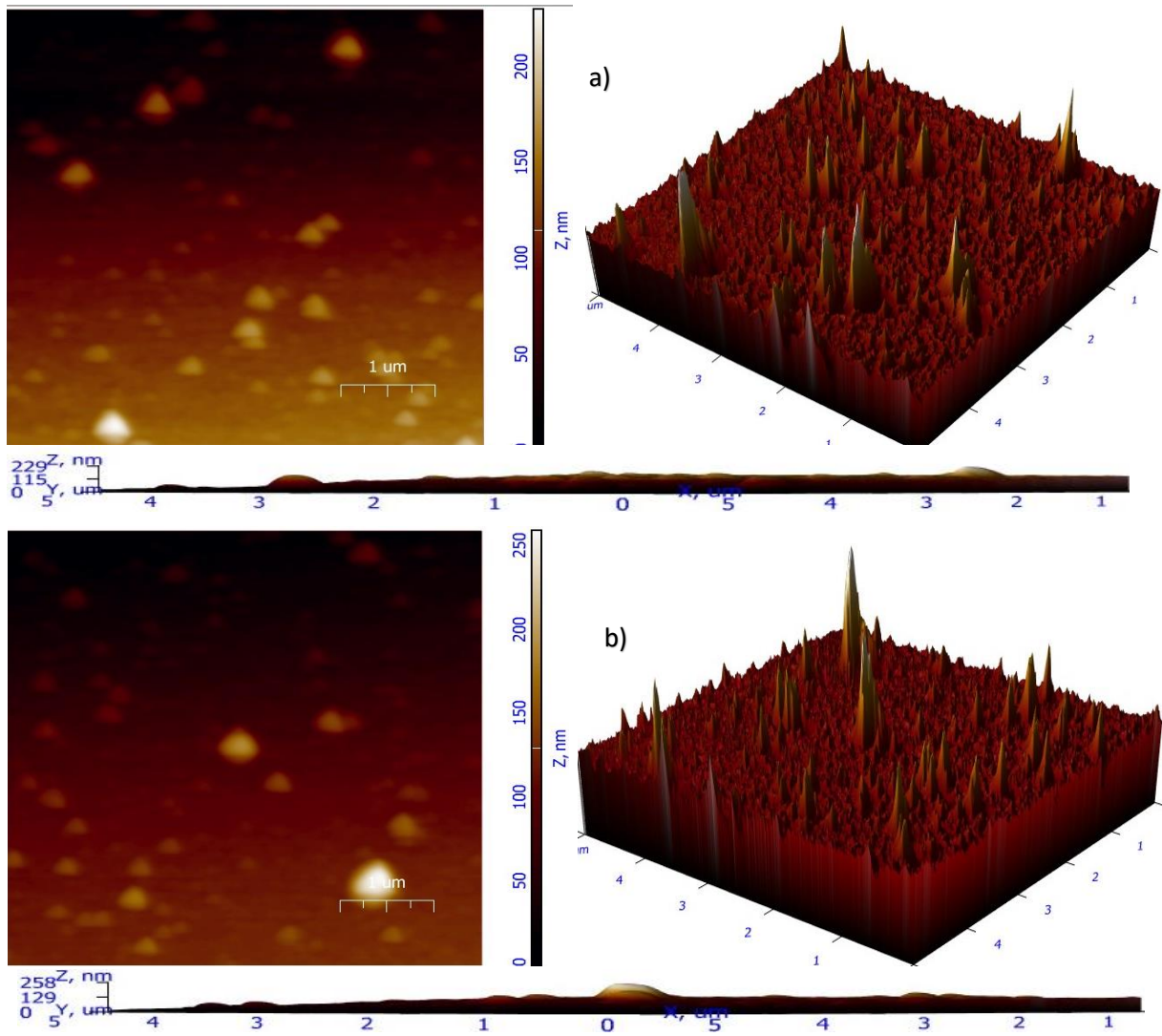


Figura 4.195 Imagen AFM películas de CdS depositadas a una temperatura de 80 °C y tiempos de a) 30 y b) 40 minutos, sobre sustratos de vidrio.

En la tabla 4.8 también se presentan los tamaños de granos y rugosidad de las películas de CdS sobre sustratos de Si, GaAs y GaN. En el caso de la rugosidad, para de las películas sobre estos sustratos aumenta con la temperatura, donde la mayor rugosidad se obtuvo en los sustratos de GaN así como el tamaño de grano. Y la menor rugosidad como el tamaño de grano se obtuvo en los sustratos de GaAs, comprobando el crecimiento epitaxial de películas de CdS sobre estos sustratos.

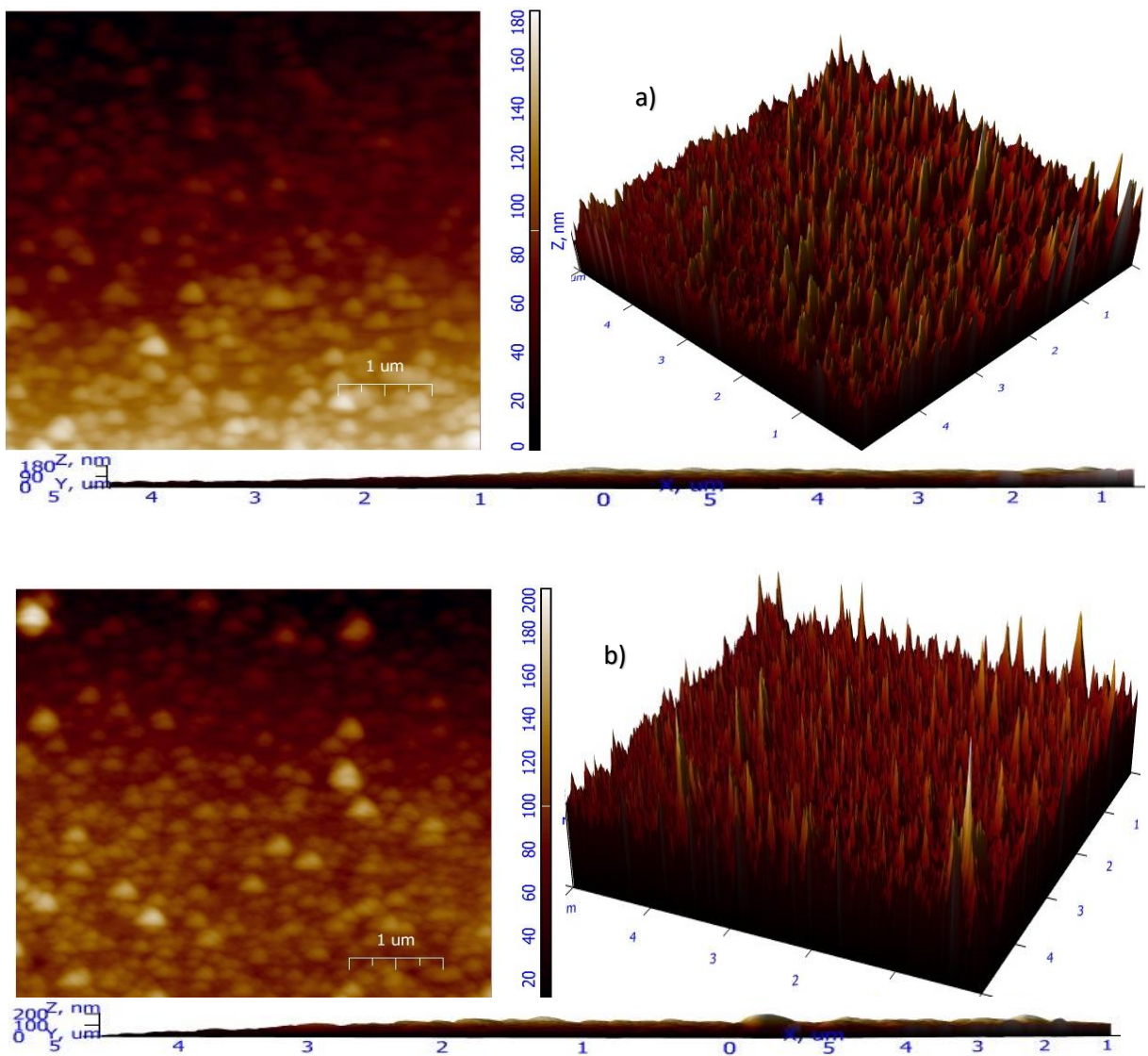


Figura 4.206 Imagen AFM películas de CdS depositadas a una temperatura de 90 °C y tiempos de a) 30 y b) 40 minutos.

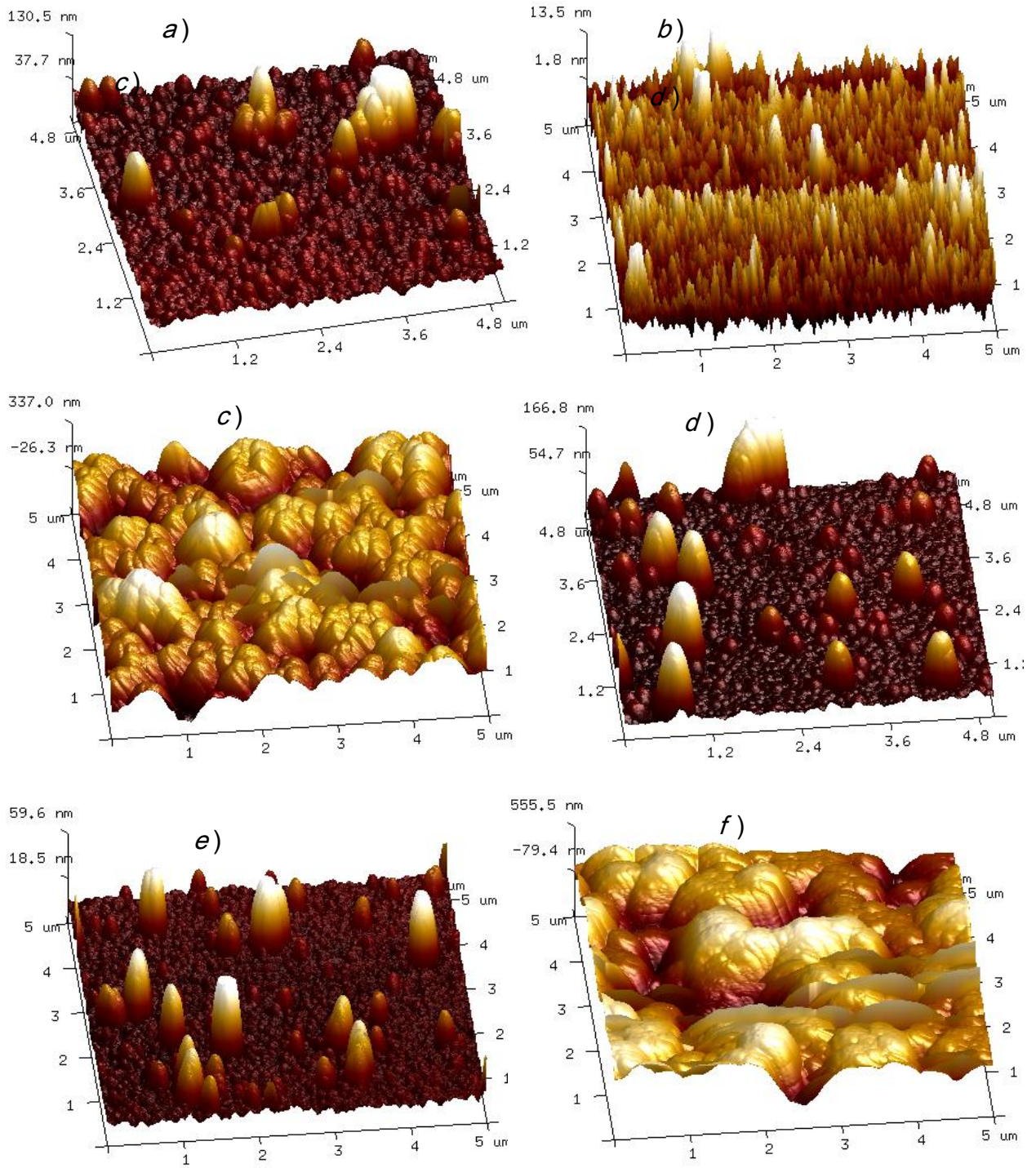


Figura 4.217 Imagen AFM de películas de CdS depositadas sobre a) Si-80 °C, b) GaAs-80 °C, c) GaN-80 °C, d) Si-90 °C e) GaAs-90 °C y f) GaN-90 °C.

4.3. Conclusiones.

Simulación

- El espesor, la concentración de In en las dos capas y la densidad de los estados se optimizaron en este estudio de la homo-estructura n-InGaN/p-InGaN. La mejor eficiencia de celdas solares basada en InGaN fue 7.343%, obtenida con una concentración de indio de $x = 0.25$ en la capa de tipo n y $x = 0.34$ en la capa de tipo p, $V_{oc} = 1.14$ eV y $FF = 0.712$.
- Para el caso de la hetero-estructura con interfaz no se obtuvo una eficiencia alta, se requiere de más estudio para incrementar dicha eficiencia.
- En la hetero-estructura sin interfaz de CdS/InGaN, con la optimización de los parámetros de ambos materiales se obtuvo una eficiencia máxima de 8.738% que es aceptable como se ve en la figura 4.10, es por ello que concluye que se puede obtener una nueva configuración de celda solar prometedora con estos materiales, se puede incrementar la eficiencia con un estudio más exhaustivo en las propiedades de los materiales.

Depósito de película delgada de CdS y caracterización.

Se obtuvieron películas de CdS sobre sustrato de vidrio usando la técnica DBQ a diferentes temperaturas y tiempo de depósito.

- El patrón XRD indica películas nanoestructuradas con una orientación preferida para $2\theta = 26.68^\circ$, las señal puede atribuirse al plano (002) hexagonales o (111) cúbico. Se observó que la estructura cristalina mejora en depósitos a mayor temperatura, también aumenta el tamaño de cristal.
- El intervalo de banda óptica a temperatura ambiente se determinó mediante análisis de transmitancia, que varía entre 2.258 eV y 2.382. El E_g

determinado por fotoluminiscencia está en el rango 2.38 eV -2.45 eV; ambos resultados sugieren una estructura cúbica preferencial.

- Las películas epitaxiales CdS se depositaron usando la misma técnica de DBQ a 80 °C y 90 °C en sustratos de Si, GaAs y GaN. El estudio estructural llevado a cabo por diagramas de polos (solo para muestras depositadas sobre sustratos de GaAs y GaN) a $2\theta = 26.7^\circ$ y $2\theta = 43.9^\circ$ indicó que el CdS cristaliza en fase cúbica en el sustrato de GaAs y en la fase hexagonal en el sustrato de GaN. La textura de las películas CdS cúbicas confirma que las películas no tenían una incorporación hexagonal, por lo que son monocristalinas.

Es posible ajustar una emisión de rango específico en películas nanoestructuradas CdS que optimizan la temperatura y el tiempo durante el procedimiento experimental.

- La emisión de "banda roja" (619.9 nm - 688.8 nm) se atribuye a un defecto intrínseco que genera niveles profundos en la energía de banda prohibida; que se favorece para el tiempo de depósito largo. La emisión de "banda verde" (516.66 nm - 539.1 nm) representa las transiciones DAP; que se favorece para el aumento de la temperatura y representa la calidad cristalina de las películas. La emisión de "banda azul" (413,33 nm - 427,5 nm) se debe al confinamiento cuántico en nanocristales de diferentes tamaños en las películas; estos nanocristales afectan y disminuyen la calidad del cristal. Esta formación se favorece a bajas temperaturas o a un largo tiempo de depósito a temperaturas más altas. Este resultado indica que las películas CdS son adecuadas para el desarrollo de sensores ópticos en cualquier región del espectro visible.
- El primer reporte de CdS hexagonal epitaxial crecido en sustratos GaN se informó aquí, el análisis de textura mostró unas películas policristalinas con gran rugosidad.
- Se determinó el modo de fono A1LO para películas CdS cúbicas a 302.35 cm^{-1} demostrando que existe una ligera diferencia con el valor de la fase

hexagonal (303.19 cm^{-1}), así como para las muestras sobre vidrio donde se ve el desplazamiento de la emisión del modo fono A1LO debido a los defectos y tamaños de grano que se presentaron en estas muestras.

Trabajos futuros

Simulación

Realizar estudio más detallado en la interfaz, hetero-estructura, CdS/InGaN para aumentar la eficiencia.

Simular la hetero-estructura en modo densidad de estados.

Realizar simulación con parámetros experimentales del material InGaN.

Desarrollo experimental

Validación de resultados de simulación

Depósito y caracterización de CdS sobre sustratos de InGaN

Formación y caracterización de la celda CdS/InGaN

Productos académicos obtenidos

1. Participación en congresos

- XXV International Materials Research Congress, to be held in Cancun in August 14 - 19, 2016.
- 6th Mexican Workshop on Nanostructured Materials, held at Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (Puebla, México), during 12 - 14 October, 2016.
- International Material and Systems Congress for Renewable Energy Applications, august 15 to 18, 2017 at Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, México.
- XXVI International Materials Research Congress held in Cancun, Mexico from August 20th to 25th, 2017.

2. Artículos científicos

- *AMPS-1D simulation study of solar cells based on cubic $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ in green region-borrador-Semiconductor Science and Technology.*
- *Raman and crystal structure studies of CdS epitaxial films grown on GaAs and GaN substrates-revisión-Solar Energy Materials & Solar Cells.*
- *Photoluminescence studies of CdS nanostructured films with tunable emission deposited by chemical bath technique-aceptado-Journal of Materials Science: Materials in Electronics.*

Referencias

- [1]. J. Conde, I. Mejia, F. S. Aguirre-Tostado, C. Young and M.A. Quevedo-Lopez, *Semicond. Sci. Technol.* (2014) [doi:10.1088/02681242/29/4/045006](https://doi.org/10.1088/02681242/29/4/045006).
- [2]. M. A. Matin, N. Amin, A. Zaharim, and K. Sopian, "Ultra thin high efficiency CdS/CdTe thin film solar cells from numerical analysis," in *Proceedings of the 8th WSEAS International Conference on Nonlinear Analysis, Nonlinear Systems and Chaos (NOLASC '09)*, pp. 338–344, La Laguna, Spain, July 2009.
- [3]. A. Mesrane, F. Rahmoune, A. Mahrane, A. Oulebsir, *international Journal of Photoenergy* (2015) 594858.
- [4]. G.F. Brown et al. / *Solar Energy Materials & Solar Cells* 94 (2010) 478–483.
- [5]. F. Anwar et al., *INTERNATIONAL JOURNAL of RENEWABLE ENERGY RESEARCH*, Vol.7, No.2, 2017.
- [6]. R. Lozada-Morales, O. Zelaya-Angel, *Thin Solid Films* 281-282 (1996) 386-389.
- [7]. R. Lozada-Morales, O. Zelaya-Angel, G. Torres-Delgado, *Appl. Phys. A* 73, 61–65 (2001) / *Digital Object Identifier (DOI)* 10.1007/s003390100828.
- [8]. H. Oda, K. Inoue, N. Ikeda, Y. Sugimoto, K. Asakawa, *Optics Express* 14 (2006) 6659.
- [9]. G.S. Cheng, L.D. Zhang, Y. Zhu, G.T. Fei, L. Li, C.M. Mo, Y.Q. Mao, *Appl. Phys. Lett.* 75 (1999) 2455.
- [10]. M.S. Liu, L.A. Bursill, S. Praver, K.W. Nugent, Y.Z. Tong, G.Y. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* 74 (1999) 3125.
- [11]. J. Trajic, M. Gilic, N. Romcevic, M. Roncevic, G. Stanistic, B. Hadzic, M. Petrovic, Y.S. Yahia, *Science of Sintering* 47 (2015) 145.
- [12]. O. Zelaya-Angel, F.L. Castillo, J. Avendaño, A. Escamilla, G. Contreras, R. Lozada, G. Torres, *Solid State Communications* 3 (1997) 161.
- [13]. K. Senthil, D. Mangalaraj, S.K. Narayandass, *Appl. Surf. Sci.* 169 (2001) 476.
- [14]. J. Marquez, C.G. Torres, G. Torres, M.A. Aguilar, R. Castanedo, O. Zelaya-Angel, *Superlattices and Microstructures* 102 (2017) 442.
- [15]. M. Froment, M.C. Bernard, R. Cortes, B. Mokili, D. Lincot, *J. Electrochem. Soc.* 142 (1995) 2642.
- [16]. D.R.T. Zahn, C. Maierhofer, A. Winter, M. Reckz, R. Srama, U. Rossow, A. Thomas, K. Horh, and W. Richter, *Appl. Surf. Sci.* 56 (1992) 684.
- [17]. R. Beserrnan, *Solid State Commun.* 23 (1977) 323.
- [18]. J.P. Enríquez, X. Mathew / *Solar Energy Materials & Solar Cells* 76 (2003) 313–322.
- [19]. S. Rajpal, V. Bandyopadhyay, *J. Nano- Electron. Phys.* 5 (2013) 03021.
- [20]. P. Nandakumar, C. Vijayan, Y.V.G.S. Murti, *J. Appl. Phys.* 91 (2002) 1509.
- [21]. Y.M. Yu, K. Kim, Byungsung O., K.S. Lee, Y.D. Choi, P.Y. Yu, *J. Appl. Phys.* 92 (2002) 1162.
- [22]. A.V. Katsaba, S.A. Ambrozevich, A.G. Vitukhnovsky, V.V. Fedyanin, A.N. Lobanov, V.S. Krivobok, R.B. Vasiliev, I.G. Samatov, *J. Appl. Phys.* 113 (2013) 184306.
- [23]. P.Y. Butyagin, *Chemical Physics of Solid State*, Moscow State University Publishing, 2006
- [24]. J. Aguilar-H., G. Contreras-P, A. Morales-A, O. Vigil-G, F. Cruz-G., J. Vidal-L., A. Escamilla-E., H. Hernández-C., M. Hesiquio-G., A. Arias-C. M. Chavarría-C., G. Arriaga-M, *Semicond. Sci. Technol.* 18 (2003) 111.
- [25]. A. Palafox, G. Romero-Paredes, A. Maldonado, R. Asomoza, D.R. Acosta, J. Palacios-Gómez, *Solar Energy Mater. Solar Cells* 55 (1998) 31.
- [26]. N. Soltani, E. Gharibshahi, E. Saion, *Chalcogenide* 9 (2012) 321.
- [27]. O. Friedman, A. Upcher, T. Templeman, V. Ezersky, Y Golan, *J. Mater. Chem. C* 5 (2017) 1660.