



*Instituto de Ciencias
Centro de Investigaciones en Dispositivos Semiconductores
Posgrado en Dispositivos Semiconductores*

Optimización de celdas solares basadas en las heterouniones CdTe/AZO y CdTe/WO₃ a través de simulación numérica

*Tesis sometida como requisito para obtener el grado de
Doctor en Dispositivos Semiconductores*

Presentada por:

M.C. José Carlos Zepeda Medina
220570145

Dirigida por:

Dr. Enrique Rosendo Andrés
Director

Dr. Crisóforo Morales Ruíz
Codirector

Dr. Eduardo Camacho Espinosa
Codirector Externo

©BUAP, Enero, 2024.
Todos los derechos reservados.

Beca CONAHCyT # 1028131

Agradecimientos

Agradezco al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencia y Tecnología (CONAHCYT) por la beca otorgada para poder llevar a cabo mis estudios de doctorado, ya que, sin este apoyo, no habría sido posible realizarlos.

Agradezco también a los Doctores Enrique Rosendo Andrés, Crisóforo Morales Ruiz y Eduardo Camacho Espinosa, por compartir sus conocimientos y tiempo dedicado a este tema de tesis.

A mi compañera Ana Cristina Carranza Sánchez le agradezco su interés y empeño en mi tema de tesis.

Y agradezco a quienes de alguna manera aportaron de manera positiva a mi estancia en el posgrado y el desarrollo de este tema de tesis.

Índice General

Índice de figuras	5
Índice de tablas	10
Capítulo 1. Introducción	11
Introducción	11
Objetivo General	14
Objetivos específicos	14
Justificación	14
Resumen ejecutivo	16
Capítulo 2. Marco Teórico	21
2.1 El Teluro de Cadmio	21
2.1.1 Propiedades estructurales	22
2.1.2 Propiedades eléctricas	23
2.1.3 Propiedades ópticas	26
2.1.4 Activación de películas de CdTe en atmósfera de cloro	27
2.2 Óxido de Zinc	28
2.2.1 Óxido de zinc dopado con aluminio	29
2.3 Óxido de Tungsteno (WO_3)	30
2.4 Disiliciuro de hierro (FeSi_2)	31
2.5 Unión p-n	33
2.5.1 Homounión	35
2.5.2 Heterounión	36
2.6 Efecto fotovoltaico	40
2.6.1 Absorción de radiación y generación de pares electrón-hueco	41
2.6.2 Separación de cargas en la unión	43
2.6.3 Desplazamiento de los portadores de carga a la unión p-n	44
2.7 Celdas solares de película delgada	46
2.7.1 Componentes principales de una celda solar	47
2.7.2 Sustrato	47
2.7.3 Contacto Frontal	48
2.7.4 Capa ventana	48
2.7.5 Capa absorbente	49
2.7.6 Contacto tarsero	49
2.7.7 Capa HTL y ETL	50
2.8 Funcionamiento de la celda solar	50

2.8.1 Ecuaciones básicas del funcionamiento de celdas solares.	53
Capítulo 3. Ambiente de simulación	58
3.1 Descripción del software SCAPS-1D	58
3.2 Principio matemático de SCAPS-1D	59
3.3 Interfaz del software SCAPS 1-D	61
3.3.1 Definición de la celda solar en SCAPS-1D	63
3.3.2 La constante de absorción óptica (α) de una capa	67
Capítulo 4. Resultados de simulación de la celda solar de heterounión AZO/CdTe	72
4.1 Simulación de la heterounión AZO/CdTe	72
4.1.1 Diagrama de bandas de la heterounión AZO/CdTe	73
4.1.2 Parámetros de simulación de la heterounión AZO/CdTe	75
4.2 Resultados de las Simulaciones de la heterounión AZO/CdTe	77
4.2.1 Efecto del espesor de la capa absorbente CdTe	78
4.2.2 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la capa absorbente CdTe	82
4.2.3 Efecto del espesor de la capa ventana AZO	85
4.2.4 Efecto de la concentración de portadores N_D en la capa ventana AZO	88
4.2.5 Efecto del espesor y densidad de portadores (N_A) de la capa HTL (NiO) en el funcionamiento del dispositivo.	90
4.2.6 Efecto de la temperatura de operación en η , Voc, Jsc y FF	93
4.2.7 Efecto de la resistencia en serie (R_s) y paralelo (R_{sh}) en el funcionamiento del dispositivo	95
4.3 Efecto de la activación de la capa CdTe en el funcionamiento del dispositivo	97
4.3.1 Creación del archivo (.abs) en SCAPS 1-D y resultados de la simulación.	97
4.4 Efecto del uso de una segunda capa absorbente de FeSi ₂	100
4.4.1 Diagrama de bandas de la heterounión AZO/CdTe/FeSi ₂	102
4.4.2 Parámetros de simulación de la estructura AZO/CdTe/FeSi ₂	104
4.4.3 Efecto del espesor de la primera capa absorbente CdTe	105
4.4.4 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la primera capa absorbente CdTe	107
4.4.5 Efecto del espesor de la capa ventana AZO al tener una segunda capa absorbente FeSi ₂	108

4.4.6 Efecto de la concentración de portadores N_D en la capa ventana AZO al tener una segunda capa absorbente $FeSi_2$	110
4.4.7 Efecto del espesor de la capa absorbente $FeSi_2$	111
4.4.8 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la capa absorbente $FeSi_2$	113
4.4.9 Efecto de la densidad de defectos (N_t) en la interfaz $CdTe/ FeSi_2$	114
4.5 Resumen de resultados de la simulación de la celda solar optimizada de heterounión AZO/ $CdTe$	116
Capítulo 5. Resultados de simulación de la celda solar de heterounión $WO_3/CdTe$	117
5.1 Simulación de la heterounión $WO_3/CdTe$	117
5.1.1 Diagrama de bandas de la heterounión $WO_3/CdTe$	118
5.1.2 Parámetros de simulación de la heterounión $WO_3/CdTe$	119
5.2 Resultados de las Simulaciones de la heterounión $WO_3/CdTe$	121
5.2.1 Efecto del espesor de la capa absorbente $CdTe$	122
5.2.2 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la capa absorbente $CdTe$	123
5.2.3 Efecto del espesor de la capa ventana WO_3	125
5.2.4 Efecto de la concentración de portadores N_D en la capa ventana WO_3	127
5.2.5 Efecto de la densidad de defectos (N_t) en la interface $WO_3/CdTe$	128
5.2.6 Efecto de la temperatura de operación en η , V_{oc} , J_{sc} y FF	130
5.2.7 Efecto de la resistencia en serie (R_s) y paralelo (R_{sh}) en el funcionamiento del dispositivo	131
5.3 Efecto de la activación de la capa $CdTe$ en el funcionamiento en la celda solar en la heterounión $WO_3/CdTe$	133
5.3.1 Resultados de la simulación con película $CdTe$ activada	133
5.4 Efecto del uso de una segunda capa absorbente de $FeSi_2$ en la heterounión $WO_3/CdTe$	135
5.4.1 Diagrama de bandas de la heterounión $WO_3/CdTe$ al incorporar $FeSi_2$ como segunda capa absorbente	138
5.4.2 Parámetros de simulación de la estructura $WO_3/CdTe/FeSi_2$	139
5.4.3 Efecto del espesor de la primera capa absorbente $CdTe$ en la heterounión $WO_3/CdTe$	141
5.4.4 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la capa absorbente $CdTe$ en la heterounión $WO_3/CdTe$	142
5.4.5 Efecto del espesor de la capa ventana WO_3 al tener la capa absorbente $FeSi_2$.	144

5.4.6 Efecto de la concentración de portadores N_D en la capa ventana WO_3 al tener la capa absorbente $FeSi_2$	145
5.4.7 Efecto del espesor de la segunda capa absorbente $FeSi_2$ en la heterounión $WO_3/CdTe$	146
5.4.8 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la segunda capa absorbente $FeSi_2$ en la heterounión $WO_3/CdTe$	148
5.4.9 Efecto de la densidad de defectos (N_t) en la interfaz $CdTe/FeSi_2$ en la heterounión $WO_3/CdTe$.	149
5.5 Resumen de resultados de la simulación de la celda solar optimizada de heterounión $WO_3/CdTe$	151
Conclusiones	152
Apéndice 1. Depósito y activación de la película de $CdTe$	156
Apéndice 2. Caracterización óptica de la película de $CdTe$	158
Apéndice 3. Comportamiento de la celda solar de heterounión $AZO/CdTe$ al introducir el espectro de absorbancia experimental de la capa $CdTe$	161
Apéndice 4. Comportamiento de la celda solar de heterounión $WO_3/CdTe$ al introducir el espectro de absorbancia experimental de la capa $CdTe$	163
Bibliografía	164

Índice de figuras

Figura 1.1 Eficiencias de celdas solares reportadas históricamente	12
Figura 1.2 Esquema grafico de la estructura de este trabajo de investigación.	17
Figura 1.3. Comparativa J-V de las estructuras analizadas en el capítulo 4.	18
Figura 1.4. Comparativa J-V de las estructuras analizadas en el capítulo 5.	20
Figura 2.1 Representación esquemática de la celda unitaria de CdTe con estructura zinc blenda	22
Figura 2.2 Concentrado de niveles energéticos aceptores y donadores en CdTe.	24
Figura 2.3 Estructura electrónica de bandas del CdTe	26
Figura 2.4. Estructuras cristalinas de ZnO (a) sal de roca, (b) Zinc blenda, (c) wurtzita hexagonal. Las esferas grises y negras sombreadas representan iones de Zn y O, respectivamente	28
Figura 2.5. Esquema de la celda unitaria hexagonal tipo wurzita del ZnO y el catión que se reemplaza al dopar tipo n	30
Figura 2.6. Esquema de la celda unitaria cubica del WO_3 (derecha), Octaedro WO_6 (izquierda).	30
Figura 2.7. Coeficientes de absorción óptica de varios semiconductores monocristalinos	31
Figura 2.8 Estructura electrónica de bandas del β -FeSi ₂	33
Figura 2.9. Formación de unión p-n entre materiales semiconductores	34
Figura 2.10. Diagrama de bandas de energía de una homounión de ZnO	35
Figura 2.11. Diagrama de bandas de una heterounión antes y después del contacto	37
Figura 2.12. Esquema de una unión abrupta.	38
Figura 2.13. Coeficientes de absorción para algunos semiconductores usados en aplicaciones fotovoltaicas	42
Figura 2.14. Esquema de la generación y separación de pares e-h por la absorción de un fotón	44
Figura 2.15. Estructura convencional de una celda solar de película delgada en configuración tipo sustrato.	47
Figura 2.16. Principio de funcionamiento de una celda solar.	52
Figura 2.17. Reflexión, absorción, transmisión y recombinación en una celda solar irradiada	53
Figura 2.18. Circuito eléctrico equivalente de una celda solar.	53
Figura 2.19. Curva I-V característica de una celda solar.	54
Figura 3.1. Modulo principal "Action panel" del software SCAPS 1-D	62
Figura 3.2. Panel Solar Cell Definition	63
Figura 3.3. Introducción de parámetros físicos de la celda solar.	64

Figura 3.4. Panel para la introducción de defectos en las capas de la celda solar	65
Figura 3.5. Panel de propiedades de contacto	66
Figura 3.6. Ejemplo de archivo. abs con datos de absorción para usarse en SCAPS 1-D.	68
Figura 3.7. Panel Absorption Model Setup de SCAPS 1-D	69
Figura 4.1. Representación esquemática de la estructura Al/AZO/CdTe/NiO/Ni simulada.	73
Figura 4.2. Diagrama de bandas de la heteroestructura NiO/CdTe/AZO	74
Figura 4.3. Panel de definición de celdas solares de SCAPS-1D para la estructura Al/AZO/CdTe/NiO/Ni	75
Figura 4.4. Panel de propiedades de las capas	76
Figura 4.5. (a) curvas JV (b) eficiencia cuántica (QE) para diferentes espesores de la capa absorbente CdTe.	79
Figura 4.6. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa absorbente CdTe	81
Figura 4.7. (a) curvas JV (b) eficiencia cuántica (QE) para diferentes concentraciones de portadores (N_A) en la capa absorbente CdTe.	82
Figura 4.8. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa absorbente CdTe	84
Figura 4.9. (a) curvas JV (b) eficiencia cuántica (QE) para diferentes espesores de la capa ventana AZO.	86
Figura 4.10. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa ventana AZO	87
Figura 4.11. (a) curvas JV (b) eficiencia cuántica (QE) para diferentes concentraciones de portadores (N_D) en la capa ventana AZO.	88
Figura 4.12. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores donadores (N_D) en la capa ventana AZO.	89
Figura 4.13. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa HTL (NiO).	91
Figura 4.14. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa HTL (NiO).	92
Figura 4.15. Curvas J-V para las estructuras Al/AZO/CdTe/NiO/Ni y Al/AZO/CdTe/Ni	93
Figura 4.16. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes temperaturas de operación.	94
Figura 4.17. Comportamiento de (a) Voc, Jsc y (b) PCE, FF con diferentes resistencias en serie y paralelo	96
Figura 4.18. Gráficas de eficiencia cuántica (QE) de la celda solar simulada usando coeficiente de absorción teórico y experimental para la capa CdTe	98
Figura 4.19. Gráficas J-V de la celda solar simulada usando coeficiente de absorción teórico y experimental para la capa CdTe.	99
Figura 4.20. Representación de la celda solar simulada (Al/AZO/CdTe/FeSi ₂ /Ni).	100

Figura 4.21. (a)QE simulada y (b) curva J-V para las estructuras AZO/CdTe/ FeSi ₂ y AZO/CdTe.	102
Figura 4.22. Diagrama de bandas de la heteroestructura FeSi ₂ /CdTe/AZO	103
Figura 4.23. Panel de definición de celdas solares de SCAPS-1D para la estructura Al/AZO/CdTe/ FeSi ₂ /Ni	104
Figura 4.24. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa absorbente CdTe en la estructura Al/AZO/CdTe/ FeSi ₂ /Ni.	106
Figura 4.25. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa absorbente CdTe en la estructura Al/AZO/CdTe/ FeSi ₂ /Ni.	108
Figura 4.26. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa ventana AZO en la estructura Al/AZO/CdTe/ FeSi ₂ /Ni.	109
Figura 4.27. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores donadores (N_D) en la capa ventana AZO en la estructura Al/AZO/CdTe/ FeSi ₂ /Ni.	111
Figura 4.28. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores en la capa absorbente FeSi ₂	112
Figura 4.29. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa absorbente FeSi ₂ .	113
Figura 4.30. Cambio en (a) PCE, (b) FF, (c) Jsc y (d) Voc para diferentes concentraciones de defectos (N_t) en la interfaz CdTe/ FeSi ₂	115
Figura 5.1. Representación esquemática de la estructura Al/AZO/WO ₃ /CdTe/NiO/Ni simulada.	117
Figura 5.2. Diagrama de bandas de la heteroestructura NiO/CdTe/WO ₃ .	119
Figura 5.3. Panel de definición de celdas solares de SCAPS-1D para la estructura Al/AZO/ WO ₃ /CdTe/NiO/Ni	120
Figura 5.4. Panel de propiedades de la capa WO ₃ .	120
Figura 5.5. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa absorbente CdTe en la heterounión WO ₃ /CdTe	123
Figura 5.6. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa absorbente CdTe en la heterounión WO ₃ /CdTe.	124
Figura 5.7. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa ventana WO ₃ en la heterounión WO ₃ /CdTe.	126
Figura 5.8. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores donadores (N_D) en la capa ventana WO ₃ en la heterounión WO ₃ /CdTe	128
Figura 5.9. Efecto de la densidad de defectos (N_t) de la interface WO ₃ /CdTe en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE.	129
Figura 5.10. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes temperaturas de operación de la celda solar en la heterounión WO ₃ /CdTe	131

Figura 5.11. Comportamiento de (a) Voc, Jsc y (b) PCE, FF con diferentes resistencias en serie y paralelo en la celda solar en la heterounión WO ₃ /CdTe	132
Figura 5.12. Gráficas de eficiencia cuántica (QE) de la celda solar simulada usando coeficiente de absorción teórico y experimental para la capa CdTe en la celda WO ₃ /CdTe	134
Figura 5.13. Curvas J-V de la celda solar simulada usando coeficiente de absorción teórico y experimental para la capa CdTe en la celda WO ₃ /CdTe.	135
Figura 5.14. Representación de la celda solar simulada (Al/AZO/ WO ₃ /CdTe/FeSi ₂ /Ni).	136
Figura 5.15. (a) QE simulada y (b) curva J-V para las estructuras WO ₃ /CdTe/FeSi ₂ y WO ₃ /CdTe.	137
Figura 5.16. Diagrama de bandas de la heteroestructura FeSi ₂ /CdTe/ WO ₃	139
Figura 5.17. Panel de definición de celdas solares de SCAPS-1D para la estructura Al/AZO/ WO ₃ /CdTe/FeSi ₂ /Ni	140
Figura 5.18. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa absorbente CdTe en la estructura Al/AZO/ WO ₃ /CdTe/FeSi ₂ /Ni.	141
Figura 5.19. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores (N_A) en la capa absorbente CdTe en la estructura Al/AZO/ WO ₃ /CdTe/FeSi ₂ /Ni.	143
Figura 5.20. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa ventana AZO en la estructura Al/AZO/ WO ₃ /CdTe/FeSi ₂ /Ni.	144
Figura 5.21. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores (N_D) en la capa ventana AZO en la estructura Al/AZO/ WO ₃ /CdTe/FeSi ₂ /Ni.	146
Figura 5.22. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores en la capa absorbente FeSi ₂ en la heterounión WO ₃ /CdTe.	147
Figura 5.23. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa absorbente FeSi ₂ en la heterounión WO ₃ /CdTe.	149
Figura 5.24. Cambio en (a) PCE, (b) FF, (c) Jsc y (d) Voc para diferentes concentraciones de defectos (N_t) en la interfaz CdTe/FeSi ₂ en la heterounión WO ₃ /CdTe.	150
Figura A1.1. (a)Deposito de CdTe usando rampa WW con $\Delta=2w/5min$ y (b) película de CdTe obtenida.	156
Figura A1.2. Película de CdTe colocada en el horno para el proceso de activación.	157
Figura A2.1. Transmitancia para la película depositada de CdTe.	158
Figura A2.2. Cálculo de band gap con el método ASF para las muestras CdTe depositada (a) sin activar y (b) activada.	159

Figura A3.1. Cambio en Voc, Jsc, FF y PCE para diferentes espesores y concentración de portadores en la capa AZO en la heterounión AZO/CdTe.	161
Figura A3.2. Cambio en Voc, Jsc, FF y PCE para diferentes espesores y concentración de portadores en la capa CdTe en la heterounión AZO/CdTe	161
Figura A3.3. Cambio en Voc, Jsc, FF y PCE para diferentes espesores y concentración de portadores en la capa NiO en la heterounión AZO/CdTe.	162
Figura A4.1. Cambio en Voc, Jsc, FF y PCE para diferentes espesores y concentración de portadores en la capa WO ₃ en la heterounión WO ₃ /CdTe.	163
Figura A4.2. Cambio en Voc, Jsc, FF y PCE para diferentes espesores y concentración de portadores en la capa WO ₃ en la heterounión WO ₃ /CdTe.	163

Índice de tablas

Tabla 2.1 Elementos dopantes usados en el CdTe	25
Tabla 3.1 Valores del exponente n para los mecanismos de excitación física	71
Tabla 4.1. Parámetros usados para simular la estructura (Al/AZO/CdTe/NiO/Ni).	76
Tabla 4.2. Parámetros de simulación para interfaz y contactos	77
Tabla 4.3. Parámetros usados en la simulación de la celda solar Al/AZO/CdTe/FeSi ₂ /Ni	105
Tabla 4.4. Parámetros de simulación para contactos y defectos en interfaces.	105
Tabla 4.5 Concentrado de resultados optimizados de la celda solar AZO/CdTe	116
Tabla 5.1. Parámetros usados para simular la estructura (Al/AZO/ WO ₃ /CdTe/NiO/Ni).	121
Tabla 5.2. Parámetros de simulación para interfaz y contactos de la celda solar	121
Tabla 5.3. Parámetros usados en la simulación de la celda solar Al/AZO// WO ₃ /CdTe/FeSi ₂ /Ni	140
Tabla 5.4. Parámetros de simulación para contactos y defectos en interfaces	140
Tabla 5.5 Concentrado de resultados optimizados de la celda solar WO ₃ /CdTe	151

CAPÍTULO 1

Introducción

Las energías renovables, como la fotovoltaica, han adquirido una relevancia cada vez mayor debido al evidente cambio climático y a la cada vez menos disponibilidad de las energías tradicionales, tales como los combustibles fósiles, que al ser usados generan una contaminación excesiva debido a la emisión de gases, que recientes reportes han demostrado la generación de efectos negativos en el medio ambiente. El aprovechamiento de energías renovables es una opción para mitigar, el impacto negativo del uso de combustibles fósiles.

La energía solar, como energía alternativa al uso de combustibles fósiles, ha sido un tema de investigación de gran interés en los últimos años, debido a la alta disponibilidad de esta energía. La conversión de la energía solar a energía eléctrica se lleva a cabo en un dispositivo eléctrico llamado celda solar, la cual, transforma la luz del sol en energía eléctrica directamente a través del efecto fotovoltaico.

En 1954 se reporta un dispositivo fotovoltaico basado en unión pn usando como material base el silicio (Si), obteniendo una eficiencia de conversión energética (PCE) del 6% [87], siendo esto un punto de partida para la investigación y desarrollo de tecnología fotovoltaica, basado en diferentes materiales y estructuras, con el objetivo de fabricar celdas solares cada vez más eficientes y económicas.

El telurio de cadmio (CdTe) es un material con potencial para usarse como alternativa al Si, en celdas solares, dado que por sus características del tiende a mejorar la eficiencia que actualmente presentan las celdas solares basadas en Si. En la Figura 1.1 [88] se muestra el crecimiento de la tecnología de celdas solares basadas en CdTe, mostrando una eficiencia del 22.3%, sin embargo, las celdas solares basadas en CdTe no han tenido un crecimiento sustancial desde el año 2015. Estas eficiencias se han logrado con heterounión de CdS/CdTe.

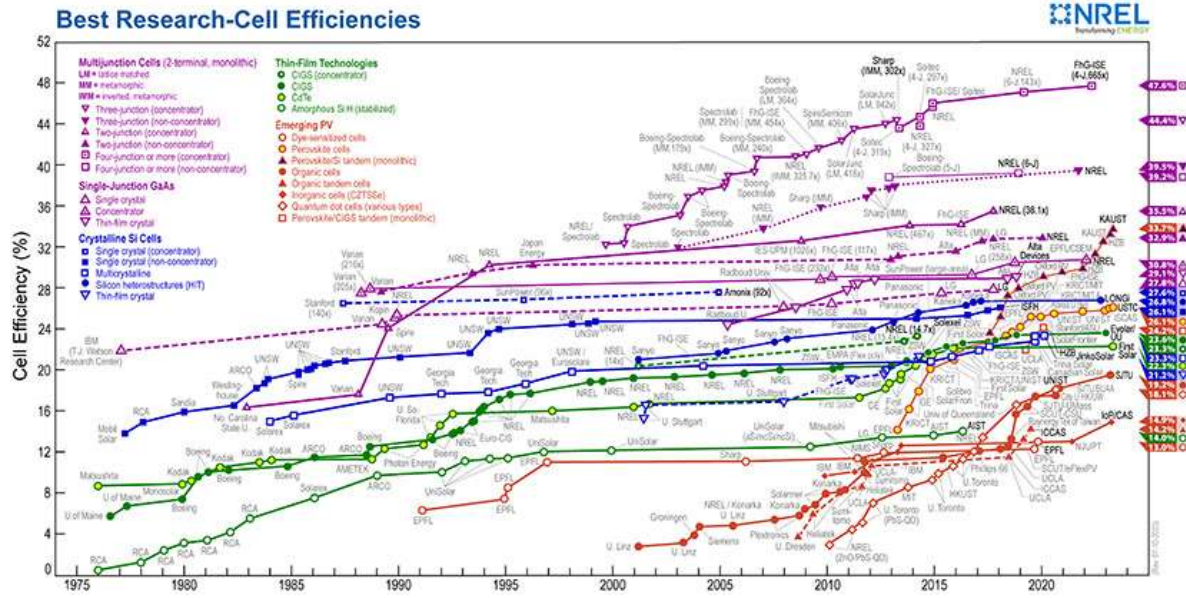


Figura 1.1 Eficiencias de celdas solares reportadas históricamente.

La mayoría de las celdas solares de película delgada de CdTe utilizan el sulfuro de cadmio (CdS) como capa ventana, sin embargo, la toxicidad del Cd y su band gap no tan amplio (2.42 eV) [3], implican hacia la investigación de nuevos materiales para su uso como capa ventana en películas basadas en CdTe, dentro de los cuales destacan el uso de óxido de zinc (ZnO) dopado tipo n [67, 71, 74], en los cuales han basado sus trabajos en métodos para lograr una mayor eficiencia, tal como la modificación de la concentración de impurezas y espesores en la capa absorbente y la capa ventana, la reducción de defectos en la unión y interfaz, etc.

Por lo cual, es de suma importancia identificar los parámetros físicos de las capas que componen la celda solar que permitan mejorar la eficiencia, optimizando así la estructura de la celda para obtener la mayor eficiencia en el menor tiempo posible y con la menor cantidad de recursos posible, para que la celda solar a desarrollar presente una mayor rentabilidad y sustentabilidad. El desarrollo de celdas solares de película delgada conlleva una gran cantidad de experimentos y caracterizaciones para obtener dispositivos de alta eficiencia, lo cual se traduce en un mayor costo, tanto material como de horas-hombre.

Una herramienta con un potencial importante es la simulación numérica de celdas solares, su adecuado uso contribuye al desarrollo de celdas solares de manera más

eficiente y económica, permitiendo optimizar los parámetros físicos de la capas componentes de la celda solar para conseguir la mayor eficiencia posible a través de un software de simulación, reduciendo considerablemente el esfuerzo experimental para conseguir dicha eficiencia.

Actualmente, existen softwares desarrollados específicamente para diseñar y analizar celdas solares, tales como: Silvaco [98], Sentaurus [99], Lumerical [100], AFORS HET [103], PC 1D [101], AMPS 1-D [102], SCAPS-1D [65], entre otros. Estos softwares han sido ampliamente usados para el análisis y desarrollo de celdas solares de películas delgadas. Solar Cell Capacitance Simulator - 1 Dimension (SCAPS 1-D) es un software de modelado numérico diseñado para simular celdas solares de hetero unión de película delgada, especialmente diseñado para celdas solares basadas en CdTe y Cu(In,Ga)Se₂ [65].

En el presente trabajo, se estudiaron teóricamente celdas solares de película delgada basadas en la hetero unión AZO/CdTe y WO₃/CdTe, a través del software SCAPS 1-D. Se optimizaron parámetros físicos de las celdas solares propuestas, modificando espesores y concentración de portadores tanto para la capa ventana como para la capa absorbente, se agregaron capas optimizadas HTL (capa transportadora de huecos) y oxido conductores transparentes (TCO) para obtener la mayor eficiencia posible. También se estudiaron los efectos sobre el rendimiento fotovoltaico de la densidad de defectos en las interfaces de la unión p-n, así como también la influencia de la temperatura de operación, resistencia en serie y paralelo en la eficiencia final del dispositivo.

Hipótesis

La simulación y diseño de celdas solares con eficiencia mayor al 20% permitirá sustituir la capa ventana de CdS por películas delgadas de AZO o WO₃.

Objetivo general

Diseñar y optimizar a través de simulación numérica, celdas solares basadas en las heterouniones AZO/CdTe y WO₃/CdTe mediante el software SCAPS 1-D.

Objetivos específicos

- a) Utilizar el software SCAPS 1-D para diseñar y simular celdas solares basadas en las heterouniones AZO/CdTe y WO₃/CdTe
- b) Simular las celdas solares variando espesor y concentración de portadores de la capa absorbente CdTe y las capas ventanas AZO y WO₃, para optimizar la eficiencia de ambas celdas.
- c) Determinar los contactos frontales y traseros para garantizar contactos óhmicos en ambas celdas.
- d) Evaluar el uso de capas HTL y TCO en ambas celdas solares y optimizar estas capas.
- e) Simular y analizar el comportamiento de las celdas solares bajo diferentes temperaturas de trabajo, resistencias en serie y paralelo.
- f) Simular y analizar el efecto del proceso de activación del CdTe en el rendimiento de ambas celdas solares, a través de la introducción del espectro de absorbancia experimental obtenido de la capa CdTe activada en el modelo de coeficiente de absorción óptica de SCAPS 1-D
- g) Introducir una segunda capa absorbente de FeSi₂ y analizar su efecto en el rendimiento fotovoltaico de ambas celdas solares.

Justificación

Desde su invención hasta la actualidad la electricidad ha jugado un rol determinante en el desarrollo global de la sociedad, debido a que participa en todos los aspectos del desarrollo humano, por ejemplo, en la recreación, en la economía, en el avance científico, en la política, etc.

La energía eléctrica se produce mediante el uso de otras fuentes de energía tales como: combustibles fósiles, corrientes de agua o viento, calor, etc. Actualmente, la

generación de energía eléctrica es producida con la quema de hidrocarburos, lo que genera una fuente de emisión de gases de efecto invernadero, los cuales contribuyen al calentamiento global. El creciente uso de energías renovables va en aumento ya que muchos países cuentan con potencial eólico y solar según sus características geográficas, por lo que, de manera natural, el desarrollo de tecnología renovable es un tema vital para el desarrollo o progreso de un país.

En específico, el desarrollo de energía fotovoltaica es un tema que requiere un esfuerzo importante de investigación, dado que aproximadamente el 90 % de los módulos fotovoltaico que se venden de manera comercial están hechos a base de silicio. El silicio es un material abundante en la corteza terrestre y la tecnología fotovoltaica a base de este elemento está muy desarrollada, alcanzando una eficiencia de 27% [88], sin embargo, la tecnología fotovoltaica a base de silicio presenta limitaciones que dificultan su desarrollo, tales como: la pérdida por reflexión óptica, pérdidas por la recombinación de portadores fotogenerados y sumado a esto las pérdidas atribuibles a condiciones térmicas o cuánticas, y dado que el Si presenta un band gap (1.1 eV) de transición indirecta, requerirá de energía adicional (fonones) para generar pares electrón- hueco [89, 90, 93].

Una de las principales limitaciones en el funcionamiento de una celda solar basada en silicio es la pérdida óptica [91, 92], la cual se origina en la reflexión óptica por parte de los substratos usados, los cuales reflejan entre un 30 y un 35 % de la luz solar incidente con longitudes de onda con energía mayor al band gap del Si, debido a que este presenta un bajo coeficiente de absorción, por lo que el rendimiento de estas celdas solares se ve muy afectado.

Por otro lado, los semiconductores basados en óxidos metálicos presentan características interesantes para su uso en tecnología fotovoltaica, tales como: son su abundancia en la corteza terrestre, presentan baja o nula toxicidad, así como alta estabilidad química, se pueden sintetizar a diferentes temperaturas, y el costo de producción u obtención de estos materiales son más bajos [45].

Es por estas razones que las estructuras investigadas en este tema de tesis adquieren una relevancia importante en el desarrollo de celdas solares, con el

objetivo de encontrar alternativas que puedan generar celdas cada vez más eficientes, económicas y sustentables.

Resumen ejecutivo

El objetivo de este trabajo es el optimizar de manera teórica dos celdas solares basadas en la heterounión AZO/CdTe y WO₃/CdTe usando simulación numérica. Se simularon ambas heteroestructuras a través del software SCAPS 1-D, analizando la influencia de los espesores y concentración de portadores de las capas ventanas y absorbentes, con el objetivo de optimizar estos parámetros. Se analizó también el comportamiento de los dispositivos simulados a diferentes temperaturas de operación y diferentes resistencias en serie y paralelo. Al diseñar y simular las estructuras de las celdas solares analizadas en este trabajo, se implementó el uso de una capa transportadora de huecos (HTL) de NiO y el uso de una doble capa absorbente de FeSi₂ para una mejora en la eficiencia del dispositivo. El análisis se llevó a cabo principalmente a través del voltaje de circuito abierto (V_{oc}), la densidad de corriente de corto circuito (J_{sc}), el factor de llenado (FF) y la eficiencia (PCE). Esta tesis está estructurada en capítulos que abordan el análisis y optimización de las celdas solares simuladas.

En la figura 1.2 se ilustran gráficamente los temas que corresponden a los capítulos de tesis. En el capítulo 3 se describe el funcionamiento y alcances del software SCAPS 1-D. En el Capítulo 4 se simula, analiza y optimiza la celda solar de heterounión AZO/CdTe. El Capítulo 5 de igual manera, describe el proceso de simulación y optimización de la celda solar de heterounión WO₃/CdTe. A continuación, se resumen los resultados más significativos.

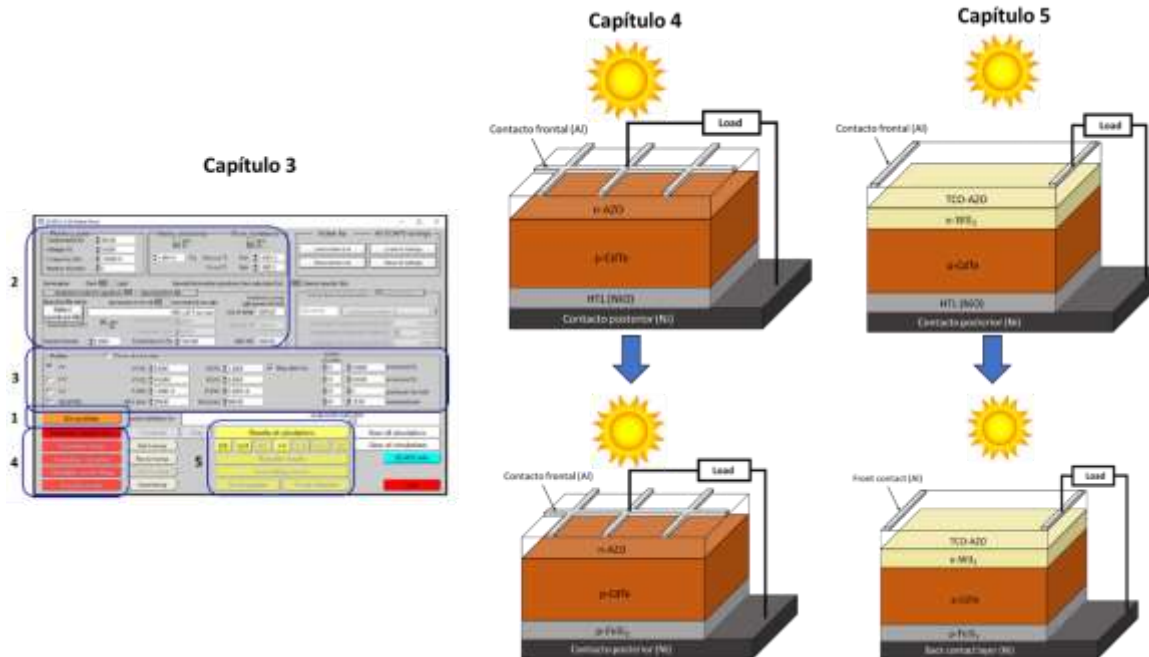


Figura 1.2 Esquema gráfico de la estructura de este trabajo de investigación.

Capítulo 4. Generalmente en celdas solares, se usa al óxido de zinc dopado con Aluminio (AZO) como un óxido conductor transparente (TCO), en este capítulo se analiza usar al AZO como capa ventana en una celda solar basada en CdTe. Al analizar el espesor de esta capa se observó que la eficiencia incrementa al reducir el espesor de la capa AZO ya que se tiene una menor pérdida de V_{oc} . Una mayor concentración de portadores en esta capa también mejora el rendimiento del dispositivo.

Al analizar la capa de CdTe, se encontró que a partir de $2 \mu m$ de espesor, se alcanza la máxima eficiencia en el dispositivo debido al coeficiente de absorción del CdTe. Un factor muy determinante en el comportamiento del dispositivo es la concentración de portadores en esta capa, teniendo esta una influencia importante en el comportamiento de J_{sc} , tal que el valor óptimo de la concentración de portadores fue de $10^{15} cm^{-3}$.

Uno de los retos que presenta una celda solar basada en CdTe debido a su alta función de trabajo es generar un contacto óhmico entre el contacto posterior y la

capa CdTe. Como alternativa a esta situación, se utilizó una capa HTL de NiO entre la capa CdTe y el contacto posterior de níquel, mejorando la eficiencia en un 3.13%.

Al simular la celda solar con un espectro experimental de transmitancia de una película de CdTe activada (clorinado), se mejora el J_{sc} , debido a una mayor absorción en la película, pasando de 26.15 a 30.73 mA/cm². Lo que aumenta la eficiencia a 16.49%.

Como alternativa para incrementar el rendimiento de la celda solar, se analizó la respuesta del dispositivo al colocar una capa absorbente de FeSi₂ entre la capa CdTe y el contacto trasero de níquel, obteniendo una mejora en J_{sc} debido al band gap (0.8 eV) del FeSi₂ lo que permite absorber fotones que no son absorbidos en la capa CdTe, además de que la inclusión de esta segunda capa absorbente, redujo el espesor optimizado de la capa CdTe de 2 a 0.3 μ m. El aumento de J_{sc} mejoró la eficiencia de la celda solar, alcanzando un 27.19%. En la figura 1.3 se muestran las curvas J-V de las estructuras simuladas en este capítulo.

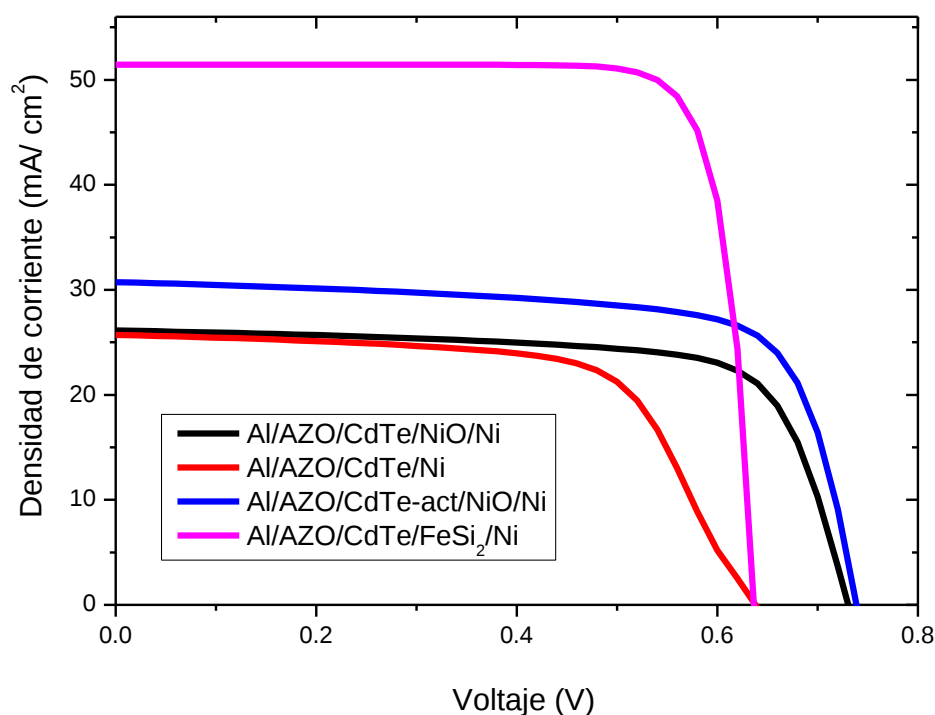


Figura 1.3 Comparativa J-V de las estructuras analizadas en el capítulo 4.

Capítulo 5. En este capítulo se llevó a cabo la simulación y optimización de la celda solar de hetero unión WO_3/CdTe . Al analizar el espesor de la capa CdTe se encontró que a partir de $1.5\ \mu\text{m}$ de espesor, el dispositivo muestra un comportamiento muy similar, mientras que la concentración de portadores en esta capa es un factor determinante, afectando de manera considerable a V_{oc} , J_{sc} y FF, alcanzando la máxima eficiencia al tener una concentración de $10^{15}\ \text{cm}^{-3}$.

El cambio en el espesor de la capa ventana WO_3 tuvo poco impacto en el rendimiento del dispositivo debido a la longitud de difusión de los portadores en esta capa, tal que V_{oc} y FF tuvieron un comportamiento prácticamente invariable al variar el espesor de la capa, mientras que J_{sc} y PCE tuvieron un decremento de $0.27\ \text{mA}/\text{cm}^2$ y 0.17% respectivamente al incrementar el espesor de la capa WO_3 de 10 a $150\ \text{nm}$. Por otra parte, el incremento de la concentración de portadores de 10^{15} a $10^{19}\ \text{cm}^{-3}$ en esta capa mejora el V_{oc} , incrementando de 0.59 a $0.76\ \text{V}$, por lo que la eficiencia también incrementa de 11.11 a 15.67% .

Al igual que en el capítulo 4, al simular la celda solar con el espectro de transmitancia de la película de CdTe activada, se tiene una mejora en el J_{sc} , alcanzando $30.28\ \text{mA}/\text{cm}^2$, por lo que la eficiencia aumenta de 15.67 a 17.14% .

Al usar una segunda capa absorbente de FeSi_2 entre el contacto posterior y la capa CdTe, se logra una eficiencia de 27.45% , con espesor optimizado de la capa ventana de $10\ \text{nm}$, para la capa CdTe un espesor de $0.3\ \mu\text{m}$ mientras que para la capa FeSi_2 fue de $1\ \mu\text{m}$. En la figura 1.4 se observan las curvas J-V de las diferentes estructuras analizadas en este capítulo.

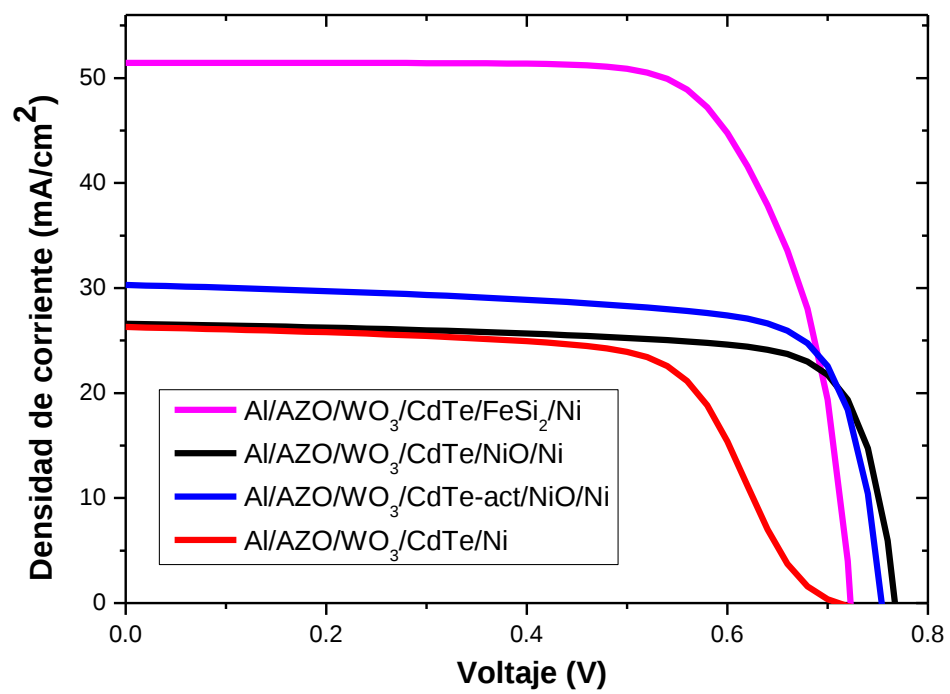


Figura 1.4 Comparativa J-V de las estructuras analizadas en el capítulo 5.

CAPÍTULO 2

Marco Teórico

2.1 El Teluro de Cadmio

El teluro de cadmio (CdTe) es uno de los semiconductores más adecuados para ser usado en aplicaciones fotovoltaicas dado que su banda prohibida de transición directa de ~ 1.49 eV coincide con la región del espectro solar de mayor intensidad que incide en la superficie terrestre, lo que permite una absorción máxima de energía [1,2]. Otra característica del CdTe es su alto coeficiente de absorción ($> 5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$) el cual permite que películas delgadas ($\sim 2 \mu\text{m}$) absorban hasta el 99% de fotones incidentes (con energía por encima de la banda prohibida del CdTe) [3].

El CdTe presenta generalmente conductividad tipo-p, lo cual, sumado a las características mencionadas anteriormente, lo convierten en un material adecuado para ser usado como capa absorbente en celdas solares de película delgada, ya que los electrones al ser los portadores minoritarios en el material, presentarán una mayor longitud de difusión que los huecos [4].

Dadas las características del CdTe, los módulos fotovoltaicos de película delgada basados en CdTe sólo requieren el 1% del material semiconductor comparado con el material usado para desarrollar módulos fotovoltaicos con materiales cristalinos tradicionales, produciendo ambas cantidades comparables de energía eléctrica [5], lo que beneficia una producción de grandes volúmenes de paneles fotovoltaicos de bajo costo.

El CdTe permite su crecimiento sobre sustratos cuyos parámetros difieren bastante al parámetro de red del CdTe e incluso se ha crecido o depositado sobre materiales amorfos, esto debido a la alta plasticidad del CdTe [6], lo que genera una ventaja sobre otros materiales semiconductores que no poseen esta característica.

2.1.1 Propiedades estructurales

El CdTe es un semiconductor de la familia de los calcógenuros (semiconductores II-VI). Su estructura cristalina es generalmente zinc-blenda, en la figura 2.1 se presenta el esquema de la celda unitaria del CdTe, donde las esferas azules representan a los átomos de Te mientras que las amarillas a las de Cd.

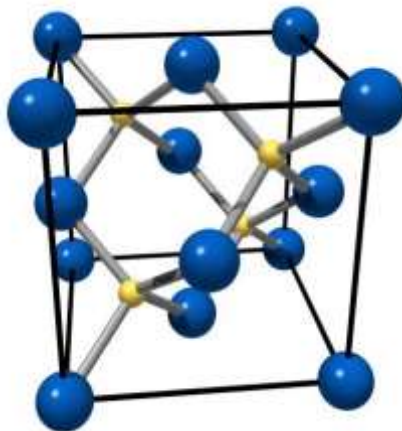


Figura 2.1 Representación esquemática de la celda unitaria de CdTe con estructura zinc blenda [54]

El CdTe tiene una ionicidad de enlace del 72%, este valor presente en los enlaces del CdTe genera un dimorfismo, es decir, que el CdTe se puede encontrar en fase hexagonal (wurtzita) o en fase cúbica (zinc-blenda) con una orientación preferencial en la dirección [111]. Bajo condiciones de presión atmosférica y temperatura ambiente [7], la estructura más estable del CdTe es la zinc-blenda.

La estructura cristalina zinc blenda del CdTe tiene un parámetro de red a temperatura ambiente de $a = 6.481 \text{ \AA}$, y una longitud de enlace de $2.806 \text{ \AA}$ [8]. La celda unitaria tiene 8 átomos de los cuales cuatro son de Cd y cuatro de Te. Las coordenadas de los átomos de Te son: $(0,0,0)$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ y $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ y las de Cd: $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$, $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$ y $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$ [9]. Los átomos están colocados tal que alrededor de cada átomo hay cuatro átomos del otro elemento, la distancia entre cada átomo es de $\frac{\sqrt{3}a}{4}$.

2.1.2 Propiedades eléctricas

El CdTe sin dopar tiene una conductividad tipo p debido a vacancias de cadmio, por lo que habrá un exceso de Te [10], lo que implica que el defecto intrínseco más común en el CdTe es la vacancia de Cd, estas vacancias de Cd están ionizadas (V_{Cd^-}) o doblemente ionizadas ($V_{Cd^{2-}}$) y actúan como defectos aceptores. La vacancia (V_{Cd^-}) presenta un nivel energético medido cerca de $E_v + 0.45$ eV [11-14], mientras que el nivel energético aceptor superficial es de $E_v + 0.1$ eV [11,15]. La vacante ($V_{Cd^{2-}}$), es un nivel energético profundo ubicado cerca de $E_v + 0.6$ eV [11,16].

La vacancia de Te en el CdTe es probable pero su concentración es mucho menor dado que para que esto se produzca las condiciones de crecimiento o depósito deben ser en exceso de Te y sumado a que la energía necesaria para la formación de este defecto es alta, termodinámicamente la estructura resultante sería muy poco estable. Estas vacancias también se presentan doblemente ionizadas y actúan como donadores, las cuales se encuentran en un nivel energético entre $E_c - 0.04$, 0.45 y 0.71 eV [11,15]. El defecto vinculado al Te (defecto más común) que tiene una mayor estabilidad termodinámicamente hablando es el antisitio de Te (Te_{cd}) que tiende a compensar en parte a las vacancias de Cd [16], este defecto produce un nivel energético donador profundo que se ubica a $E_c - 0.59$ eV [11, 17-19].

Cuando existe saturación de Cd, o cuando se introduce un dopante que sustituya al Cd en la red, desplazándolo de su sitio, se generan defectos intersticiales de Cd (Cd_i), produciendo dos niveles energéticos donadores, el primero se genera cuando la carga es neutra a $E_v - 0.33$ eV, y el segundo a $E_v - 0.46$ eV [11,20]. Otro defecto cuando se tiene exceso de Cd son los anti-sitios de Cd que son defectos donadores con una energía de $E_v - 0.10$ eV [11]. En la figura 2.2 se muestra gráficamente los niveles energéticos aceptores y donadores presentes en el CdTe.

El CdTe puede ser dopado tanto tipo p, como tipo n [21]. Dependiendo de la concentración de portadores, el CdTe tipo p puede tener una función de trabajo elevada ~ 5.5 eV [22]. Los dopantes tipo n para el CdTe usualmente son elementos

del grupo III que sustituyen a los átomos del grupo II (Cd); otra alternativa para lograr la conductividad tipo n es utilizando elementos del grupo VII que sustituyen a los átomos del grupo VI (Te) lo que produce un exceso de electrones en la red.

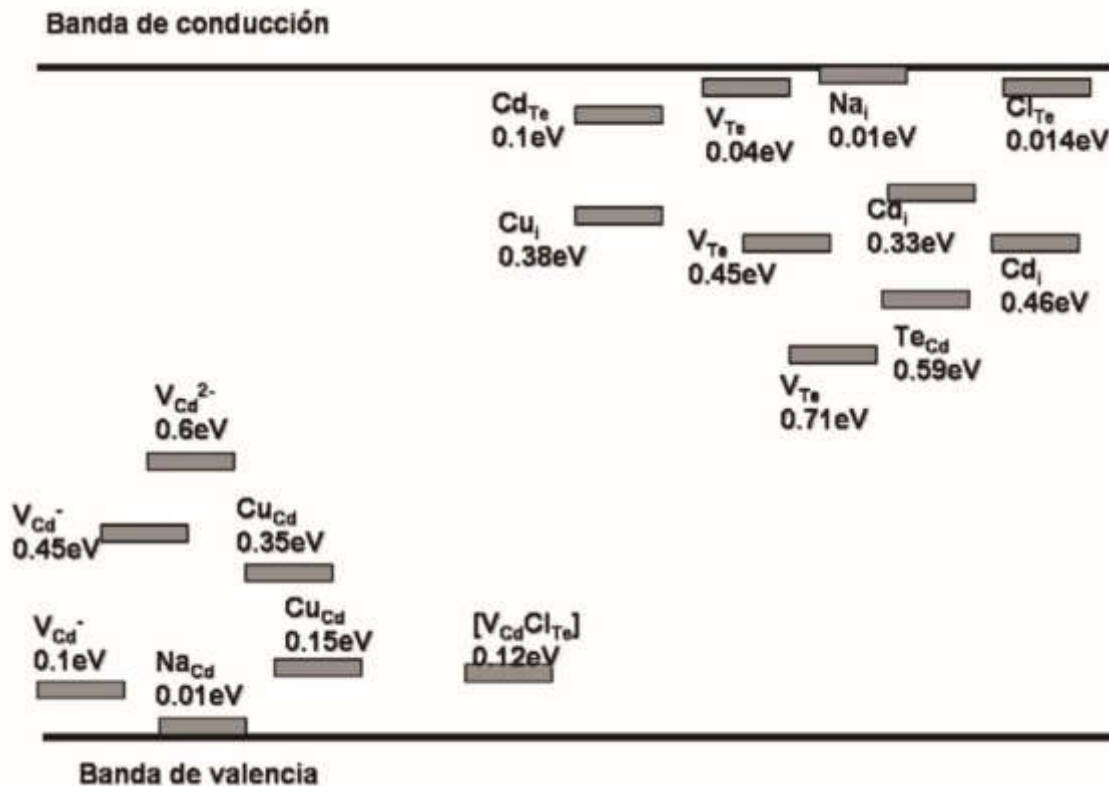


Figura 2.2 Concentrado de niveles energéticos aceptores y donadores en CdTe [20,54].

El CdTe tipo p generalmente se logra usando elementos del grupo V como el fósforo, que sustituyen a los átomos del grupo VI (Te); otra manera de lograr conductividad tipo p es usar elementos del grupo I que sustituyen a los átomos del grupo II (Cd), lo que producirá un exceso de huecos en la red.

Las energías de ionización de las impurezas aceptoras incrementan en función del número atómico del elemento, es decir, a mayor número atómico mayor será la energía de ionización, por ejemplo, de 58 meV para Li, a 263 meV para Au. Las impurezas donadoras que se observan en la Tabla 2.1 tienen un comportamiento más superficial que las impurezas aceptoras ya que la energía de ionización de estas impurezas es de 13 a 15 meV.

Tabla 2.1 Elementos dopantes usados en el CdTe [23].

	Dopante	Sitio	Clase
Donadores	Al, Ga, In	En lugar de Cd	Elementos del grupo III
13 a 15 meV	F, Cl, Br, I	En lugar de Te	Elementos del grupo VII
N	VTe, Cdi		Defectos nativos
Aceptores	Li, Na, Cu, Ag, Au, N	En lugar de Cd	Elementos del grupo I y IIa
56 a 263 meV	Li, Na, Cu, Ag, Au, N	En lugar de Te	Elementos del grupo V
	VCd		Defectos nativos

Las vacancias divalentes del Cd y Te actúan como niveles energéticos aceptores y donadores de poca profundidad. Sin embargo, el CdTe muestra cierta complejidad para ser dopado ya que los defectos nativos del CdTe generan centros de dopaje, lo que a su vez genera un sistema compensatorio al dopaje de impurezas. A través de estudios se ha observado que las vacancias de cationes (V_{Cd}) se comportan como aceptores dobles y las vacancias de aniones (V_{Te}) tienen un comportamiento de donadores dobles [24].

Un ejemplo de esto se observa en las celdas solares de CdTe cuando se realiza un tratamiento en atmosfera de cloro, donde el cloro que se introduce en la capa de CdTe en el tratamiento con $CdCl_2$ reemplaza a un átomo de Te actuando como una impureza donante cargándose así positivamente, pero se forma una vacante de Cd cargada negativamente de manera doble y este complejo cargado negativamente $(Cl_{Te}^+ - V_{Cd}^{2-})^-$ actúa como un aceptor simple [25].

La máxima concentración de electrones lograda en el CdTe ha sido de $5.3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ a temperatura ambiente, y se realizó con yodo en la forma ZnI_2 [26]. La concentración máxima de huecos que se ha logrado obtener fue con la difusión de fósforo [27] alcanzando aproximadamente $2.8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Dado que el CdTe puede doparse a altas concentraciones, permite conseguir una baja resistividad tanto en tipo n ($10^{-4} \Omega - \text{cm}$) como en tipo p ($5 \times 10^{-3} \Omega - \text{cm}$) [28]. La resistividad intrínseca reportada esta usualmente en el rango de $10^9 \Omega - \text{cm}$ [29]. El CdTe

intrínseco tiene movilidades reportadas de electrones y huecos de alrededor de $6,600 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ y $90 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, respectivamente [30].

2.1.3 Propiedades ópticas

En la figura 2.3 [31] se muestra la estructura electrónica de bandas en una red periódica de la cual se derivan las propiedades ópticas del CdTe, del máximo de la banda de valencia (VBM) y el mínimo de la banda de conducción (CBM) que ocurren en un mismo momento Γ en la primera zona de Brillouin y generan una banda prohibida directa de $\sim 1.47 \text{ eV}$ a 300 K y un valor de $E_g^0 = 1.61 \text{ eV}$ a 0 K [31, 32].

Por lo cual, los fotones incidentes con $h\nu > E_g$ del CdTe o $\lambda < \lambda_g \cong 1240 \text{ nm eV}/E_g$ van a contribuir a la corriente, por lo que gran parte del espectro visible puede ser aprovechado en una celda solar a base de CdTe.

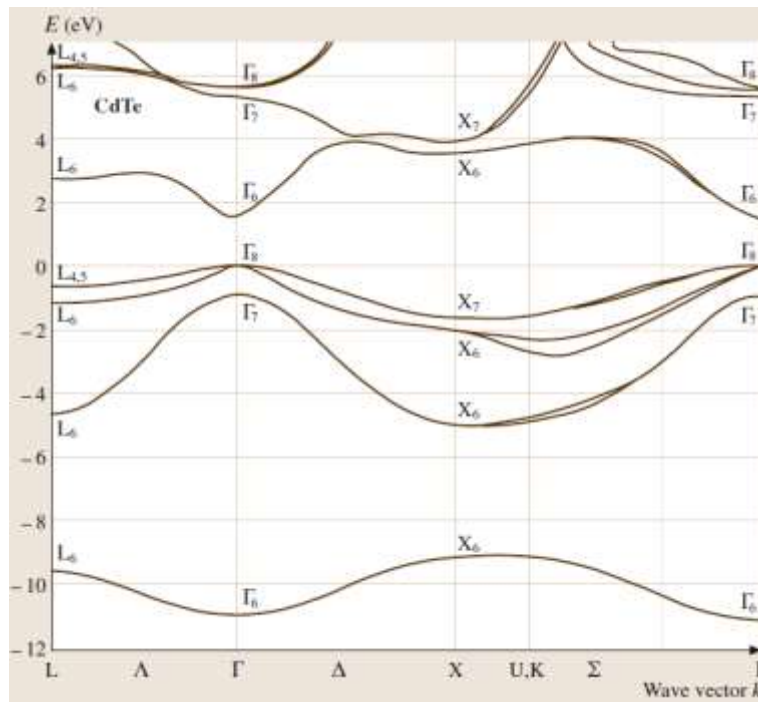


Figura 2.3 Estructura electrónica de bandas del CdTe [31].

Las curvas de absorción (α) vs λ para CdTe observadas por diferentes investigadores coincide que la frecuencia de corte obtenida está alrededor de $\lambda = 840 \text{ nm}$ que corresponde a una energía de $\sim 1.47 \text{ eV}$ [33, 34].

2.1.4 Activación de películas de CdTe en atmósfera de cloro

La activación de películas de CdTe llevadas a cabo en una atmósfera que contenga cloro es necesaria para lograr celdas solares con una alta eficiencia [3]. Generalmente, la activación se lleva a cabo con CdCl_2 el cual tiene como objetivo ser la fuente de cloro, sin embargo, este medio es altamente tóxico, por lo cual se han buscado alternativas para llevar a cabo el proceso de activación de películas CdTe, una de ellas es el uso de los clorofluorometano (CF's) [3, 35]. El tratamiento térmico tanto con CdCl_2 y CF's tiene los siguientes beneficios [3, 35, 36]:

- Se logra incrementar el tamaño de grano en el CdTe cuando los granos en un inicio son más pequeños. (La solubilidad de Cl en CdTe es pequeña y la difusión en las fronteras de grano puede formar CdO y TeCl_2).
- Se obtiene pasivación de las fronteras de grano.
- La película CdTe se dopa tipo p.
- Se mejoran los tiempos de vida de los portadores minoritarios (tiempo de vida más largos) debido a que se pasivan defectos de recombinación. Pero en el tratamiento se pueden generar defectos profundos dentro de la banda prohibida del CdTe
- Se produce recristalización y genera la inter difusión entre la capa p y n. En celdas a base de CdTe en el proceso de activación es cuando se genera la unión p-n, la cual es fundamental para el efecto fotovoltaico.
- Un tratamiento térmico excesivo en una atmósfera de cloro puede generar problemas de adhesión y formación de defectos profundo en las películas.

2.2 Óxido de Zinc

El óxido de zinc (ZnO) es un semiconductor (II-VI) de band gap directo (~ 3.37 eV). Es un compuesto inorgánico insoluble en agua, pero soluble en ácidos y bases diluidos, su punto de fusión es 1977°C . El ZnO se encuentra en el mineral zincita, pero su producción comercial está basada en la oxidación a alta temperatura de zinc metálico o minerales de zinc. El ZnO se presenta en tres estructuras cristalinas las cuales son, sal de roca, wurtzita y zinc blenda (figura 2.4), sin embargo, la fase cristalina wurtzita en condiciones ambientales es la más estable termodinámicamente [37].

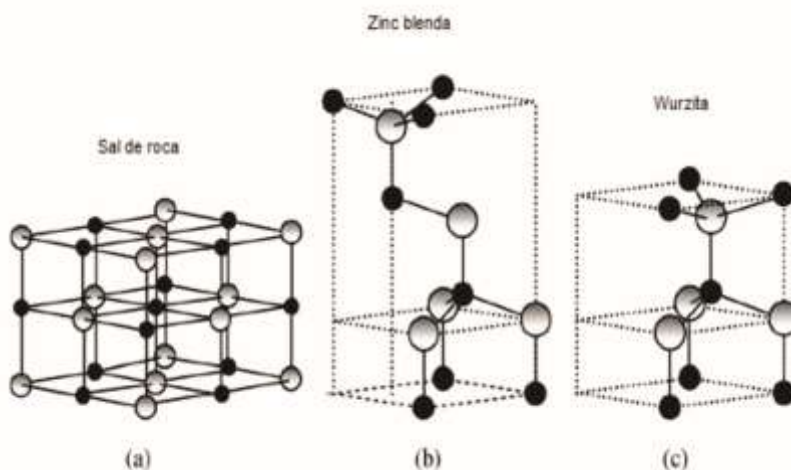


Figura 2.4. Estructuras cristalinas de ZnO (a) sal de roca, (b) Zinc blenda, (c) wurtzita hexagonal [37]. Las esferas grises y negras sombreadas representan iones de Zn y O, respectivamente

La estructura cristalina zinc blenda del ZnO es estabilizada cuando su crecimiento es sobre sustratos con fase cúbica, la estructura cristalina sal de roca (NaCl) se logra con presiones relativamente altas. De manera natural el ZnO tiene una estructura hexagonal o wurtzita con conductividad tipo n generado por desviaciones estequiométricas, por vacancias de oxígeno y átomos de zinc intersticial [38].

De acuerdo con los datos reportados el ZnO intrínseco tiene una concentración de portadores de $\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, mientras que para un ZnO dopado tipo n se tiene $\sim 10^{20}$

electrones por cm^{-3} y tipo p se tiene $\sim 10^{19}$ huecos por cm^{-3} [39]. Además las películas de ZnO:

- Están formados por elementos baratos, abundantes y no tóxicos.
- Se producen fácilmente a través de la técnica de erosión catódica, que es una tecnología usada para producir a gran escala.
- El band gap del ZnO permite que haya absorción en la región ultravioleta.

2.2.1 Óxido de zinc dopado con aluminio

En el ZnO el dopado tipo n se puede llevar a cabo: 1) a través de donadores intrínsecos generados por defectos en la red cristalina, tales como el Zn intersticial, y 2) la introducción de un material dopante extrínseco, como son el Al, In y Ga que son los elementos más usuales para esta tarea. El aluminio debido a su fácil incorporación en niveles altos de concentración produce una baja resistividad.

El dopado tipo n en el ZnO se lleva a cabo mediante la sustitución de cationes Zn^{2+} con elementos del grupo III (B, Al, Ga, In) o elementos del grupo IV (Si, Ge, Sn) (fig. 2.5), estos elementos mejoran las propiedades ópticas y eléctricas ya que aumentan la transparencia del ZnO en la región visible, así como también mejoran la conductividad del mismo. El lograr un dopaje eficiente con impurezas estará en función de su electronegatividad y de la diferencia entre los radios iónicos del elemento extrínseco y el Zn. Se ha reportado que el Al y Ga son los elementos más adecuados para dopar tipo n películas delgadas de ZnO [40], debido a que el Al^{3+} y Ga^{3+} tienen un radio iónico menor al Zn^{2+} (Al=57 pm y Ga=62 pm), Estos elementos tienen un mejor acople dado que el zinc tiene un radio iónico de 83 pm.

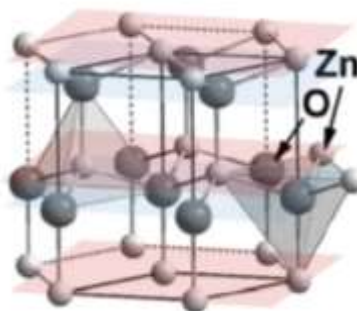


Figura 2.5. Esquema de la celda unitaria hexagonal tipo wurzita del ZnO y el catión que se reemplaza al dopar tipo n. [41]

Las películas delgadas de AZO (ZnO: Al), poseen una alta estabilidad, baja toxicidad, alta transmisión en la región visible y una alta conductividad. Se ha reportado que las películas delgadas de AZO son adecuadas para procesos de fabricación a baja temperatura ($<200^{\circ}\text{C}$) además, de ser compatibles con sustratos flexibles, materiales orgánicos y celdas solares a base de CdTe y CIGS [42].

2.3 Óxido de Tungsteno (WO_3)

El WO_3 es un óxido metálico con diversas aplicaciones como material semiconductor. En cuanto a su estructura cristalina presenta cinco fases cristalinas. Los cristales de WO_3 se forman generalmente por octaedros WO_6 , los cuales comparten esquinas entre sí (Fig. 2.6) [43].

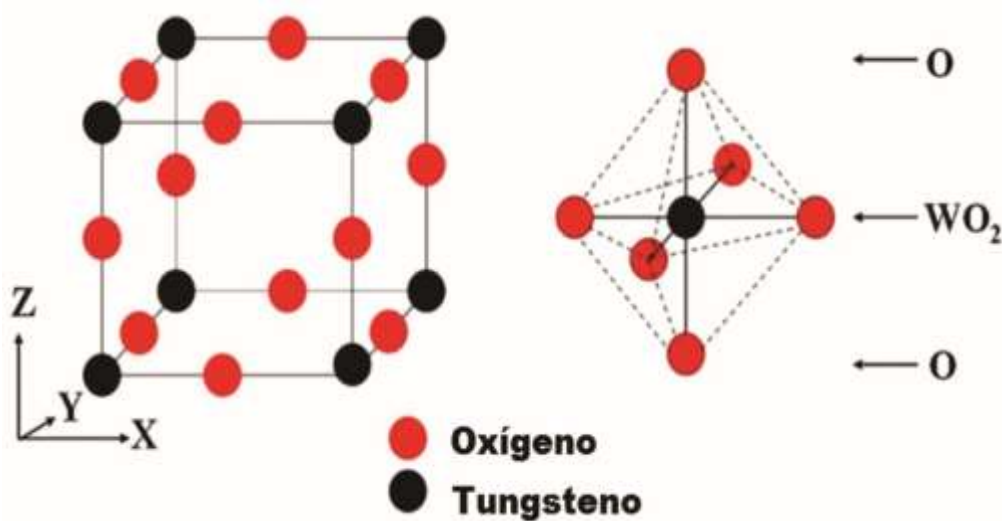


Figura 2.6. Esquema de la celda unitaria cúbica del WO_3 (derecha), Octaedro WO_6 (izquierda).

Las estructuras cristalinas descritas a partir de los octaedros que comparten esquinas vecinas son [43, 44]: monoclinica (ϵ - WO_3), triclínica (δ - WO_3), monoclinica (γ - WO_3), Ortorrómbica (β - WO_3), tetragonal (α - WO_3) y cúbica (no se reporta experimentalmente). Lo que determinan estas fases son los ángulos de inclinación, así como la dirección de rotación del octaedro WO_6 , usando como referencia a la estructura cúbica (ideal). La fase que presente el WO_3 estará en función a su temperatura de síntesis y enfriamiento, reportando ampliamente lo siguiente [43, 45]: Monoclinica (ϵ - WO_3 , $< -43^\circ\text{C}$) $\rightarrow$ triclínica (δ - WO_3 , -43 a 17°C) $\rightarrow$ monoclinica (γ - WO_3 , 17 a 330°C) $\rightarrow$ Ortorrómbica (β - WO_3 , 330 a 740°C) $\rightarrow$ tetragonal (α - WO_3 , $>740^\circ\text{C}$). El WO_3 es un material semiconductor de tipo n químicamente estable con una banda prohibida entre 2.6 y 3.2 eV [45], es un material no tóxico, de bajo costo y fácilmente evaporable y generalmente se usa como capa transportadora de electrones (ETL) en el diseño de celdas solares.

2.4 Disiliciuro de hierro (FeSi_2)

Debido a sus propiedades ópticas y eléctricas, el disiliciuro de hierro semiconductor β - FeSi_2 ha atraído recientemente una considerable atención ya que tiene un gran coeficiente de absorción ($\alpha=10^5 \text{ cm}^{-1}$), que es aproximadamente 200 veces mayor que el del silicio cristalino (Figura 2.7).

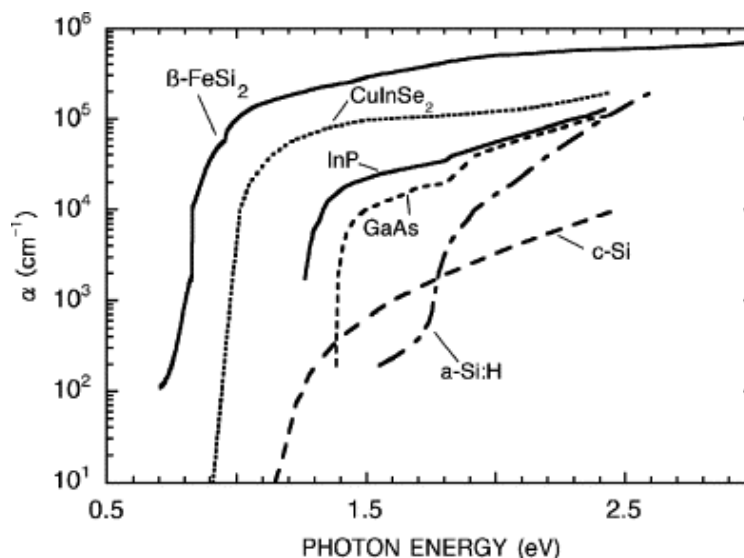


Figura 2.7. Coeficientes de absorción óptica de varios semiconductores monocristalinos [46].

El semiconductor β -FeSi₂ es un material fotovoltaico relativamente nuevo en comparación con otros bien estudiados como el silicio y los semiconductores compuestos III-V. La banda prohibida en el semiconductor β -FeSi₂ presenta una transición directa en el mismo momento Y de la zona de Brillouin (Fig. 2.8), con una transición fundamental a una energía de ~ 0.87 eV [46, 94, 95].

El β -FeSi₂ es un material no tóxico y sus elementos (Fe y Si) son abundantes en la naturaleza, lo que lo convierte uno de los materiales más prometedores para diversas aplicaciones, como diodos emisores de luz, sensores infrarrojos y celdas solares. En cuanto a las celdas solares fotovoltaicas, la eficiencia teórica para el β -FeSi₂ es de 16-23% [46, 95]. El β -FeSi₂ presenta una fase cristalina ortorrómbica y es químicamente estable hasta 937°C [95].

El β -FeSi₂ presenta una alta densidad de portadores ($\sim 10^{18}$ cm⁻³), lo cual es muy conveniente para la fabricación de celdas solares, sin embargo, el β -FeSi₂ contiene una gran cantidad de defectos [46], que pueden funcionar como centros de recombinación para los portadores fotogenerados, afectando así, a la densidad de corriente de la celda solar. Por lo tanto, los métodos de fabricación actuales para celdas solares de película delgada de β -FeSi₂ que presenten una alta calidad tienden a implicar el uso de sistemas como el método de pulverización catódica que cuente con características especiales, como una mayor densidad de plasma y menos daño al sustrato en comparación con el sistema de pulverización convencional, necesitando varios pasos de procesamiento intermedios, por ejemplo, calentamiento del sustrato, formación de plantillas, alta temperatura y recocidos prolongados [95].

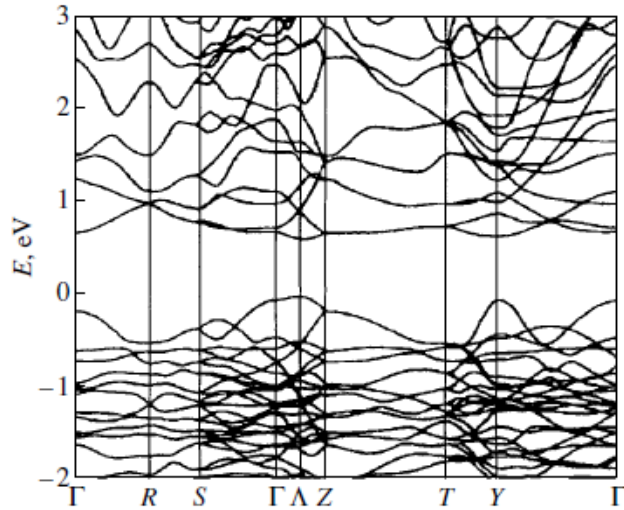


Figura 2.8 Estructura electrónica de bandas del β -FeSi₂ [94].

2.5 Unión p-n

La unión p-n es un sistema o dispositivo en el que un semiconductor tipo p está en contacto con un semiconductor tipo n. Cuando los dos semiconductores son del mismo material, entonces se le denomina homounión, y cuando los semiconductores son de distinto material se le llama heterounión. Cuando se ponen en contacto el semiconductor tipo p y el tipo n, electrones libres de la parte n se desplazan a la parte p (portadores minoritarios), mientras que una corriente de huecos se desplazan de la parte p a la n. Este mecanismo se lleva a cabo a través de la difusión de portadores hasta alcanzar un equilibrio termodinámico. Debido al movimiento de cargas, se crea un campo eléctrico por la acumulación de cargas en ambos lados de la unión entre los dos semiconductores p y n. Como consecuencia, se acumula carga negativa en el lado tipo p (aceptores ionizados), y carga positiva en el lado tipo n (donadores ionizados). Esta región cargada en torno a la unión metalúrgica de los semiconductores p y n se le denomina región de carga espacial o región de agotamiento/vaciamiento (W). El campo eléctrico en la unión se equilibrará con el gradiente de cargas como se observa en la figura 2.9, finalizando así el proceso de formación de la unión p-n.

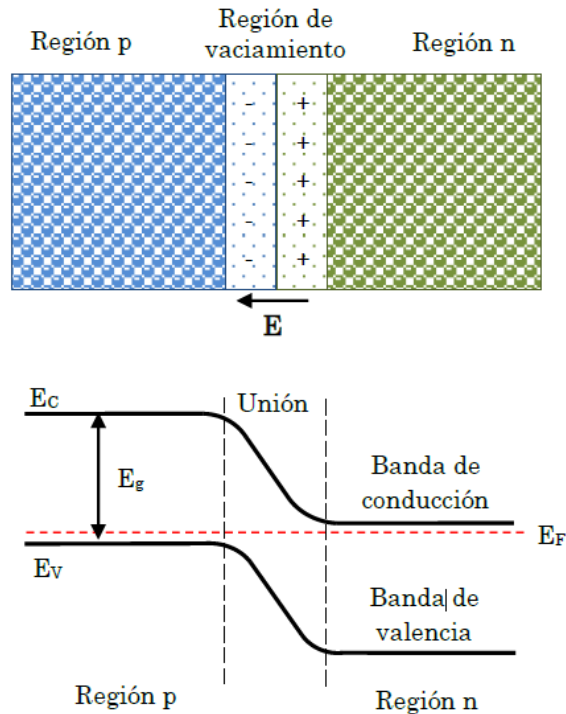


Figura 2.9. Formación de unión p-n entre materiales semiconductores [47].

Debido a que la región n queda próxima a la unión cargada positivamente, va a repeler los huecos de la zona tipo p; de la misma manera la zona p, cercana a la unión, evitará el flujo de los electrones provenientes de la zona tipo n, por lo que, en la zona cercana a la unión se crea una diferencia de potencial.

La estructura básica de una celda solar se basa en la unión p-n de materiales semiconductores tipo p y n [47]. Los semiconductores tienden a absorber luz (fotones), si la energía del fotón incidente es igual o mayor que la banda de energía prohibida del semiconductor, este fotón incidente absorbido podrá foto generar pares electrón-hueco, favoreciendo así el flujo de portadores. El campo eléctrico generado por la unión separa los portadores fotogenerados. En la zona de agotamiento o región de carga espacial se generan pares electrón-hueco debido a los fotones incidentes los cuales son separados con ayuda del campo eléctrico desplazados las regiones p y n respectivamente en donde son recolectados por los contactos metálicos.

2.5.1 Homounión

Una homounión consiste en la unión entre dos semiconductores del mismo material, uno con dopado tipo p y otro con dopado tipo n (Fig. 2.10) [48]. La función de trabajo $q\phi_W$ de un semiconductor es la diferencia de energía entre el nivel de vacío y el nivel de Fermi del material semiconductor. Dado que la función de trabajo del semiconductor tipo p es más alta que la del semiconductor tipo n, $q\phi_{Wp} - q\phi_{Wn} = q\phi_D$ ($q\phi_D$ = potencial de contacto), las bandas de energía entre los semiconductores tipo p y n se curvan, lo que indica la existencia de un campo eléctrico interno.

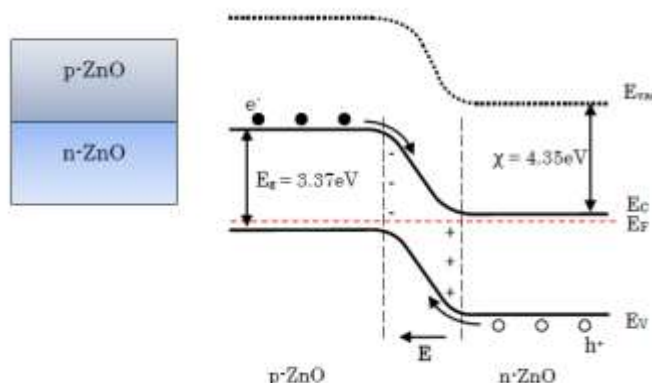


Figura 2.10. Diagrama de bandas de energía de una homounión de ZnO.

Físicamente, se interpreta el potencial de contacto o de difusión como el resultado de un desplazamiento de electrones del semiconductor tipo n al semiconductor tipo p, cuyo objetivo es nivelar la energía de Fermi en ambos semiconductores cuando se forma la unión, lo que genera una carga positiva de portadores donadores ionizados en una capa empobrecida de electrones próxima a la interface de la unión en el lado del semiconductor tipo n y una carga negativa de portadores aceptores ionizados en una capa empobrecida de huecos próxima a la interface de la unión del lado del semiconductor tipo p, resultando en un nivel de Fermi plano a través de todo el diagrama [48].

Los fotones incidentes absorbidos producen portadores minoritarios (electrones) libres en la región tipo p y portadores minoritarios (huecos) en la región tipo n. Los portadores fotogenerados se desplazan a través de la unión gracias al campo eléctrico generado, sin embargo, si la longitud de difusión del portador es muy corta

en comparación al espesor de la capa del semiconductor, existe una alta probabilidad de que el portador sea recombinado antes de ser extraído por los contactos respectivos. Si el semiconductor utilizado del lado iluminado tiene alta absorción óptica y band gap directo, entonces este semiconductor debe ser muy delgado para permitir el paso de la luz lo más posible y reducir la probabilidad de recombinación por longitud de difusión. Caso contrario a que, si el semiconductor iluminado es de baja absorción óptica sumado a un band gap indirecto, entonces el semiconductor del lado opuesto al iluminado debe tener un mayor espesor para que la mayor parte de la luz incidente sea absorbida.

2.5.2 Heterounión

Una heterounión es una unión p-n conformada por dos materiales semiconductores diferentes con bandas de energía prohibidas y afinidades electrónicas diferentes. Dado que cada parte de la heterounión es un semiconductor distinto, se presentan energías de band gap, permitividades dieléctricas, funciones de trabajo y afinidades electrónicas χ respectivamente diferentes para cada lado de la unión. La función de trabajo se ha definido como la energía necesaria para llevar un electrón desde el nivel de Fermi del semiconductor hasta el nivel de vacío, y la afinidad electrónica es la energía que necesita un electrón para llevarlo desde el nivel energético de la banda de conducción hasta el nivel energético de vacío [49].

Para realizar el diagrama de bandas de energía de una heterounión (Fig. 2.11) se deben seguir las siguientes directrices:

- Para obtener el equilibrio termodinámico, el nivel de Fermi tiene que estar al mismo valor en ambos lados de la interface en equilibrio térmico, es decir, igualar el nivel de Fermi de ambos semiconductores.
- El nivel de vacío debe ser paralelo a los bordes de la banda de conducción en ambos semiconductores, y no debe presentar discontinuidades.

Debido al equilibrio en el nivel de Fermi, existe un salto abrupto en la interface de las bandas de valencia y conducción. La diferencia de energías entre los bordes de las bandas de valencia y de conducción de cada semiconductor ΔE_v y ΔE_c respectivamente [49], están definidas por las siguientes ecuaciones:

$$\Delta E_c = x_n - x_p \quad 2.1$$

$$\Delta E_v = \Delta E_g - \Delta E_c \quad 2.2$$

Donde x_n y x_p son las afinidades electrónicas de los semiconductores tipo p y tipo n respectivamente, ΔE_g es la diferencia entre los valores de la banda de energía prohibida de los dos semiconductores.

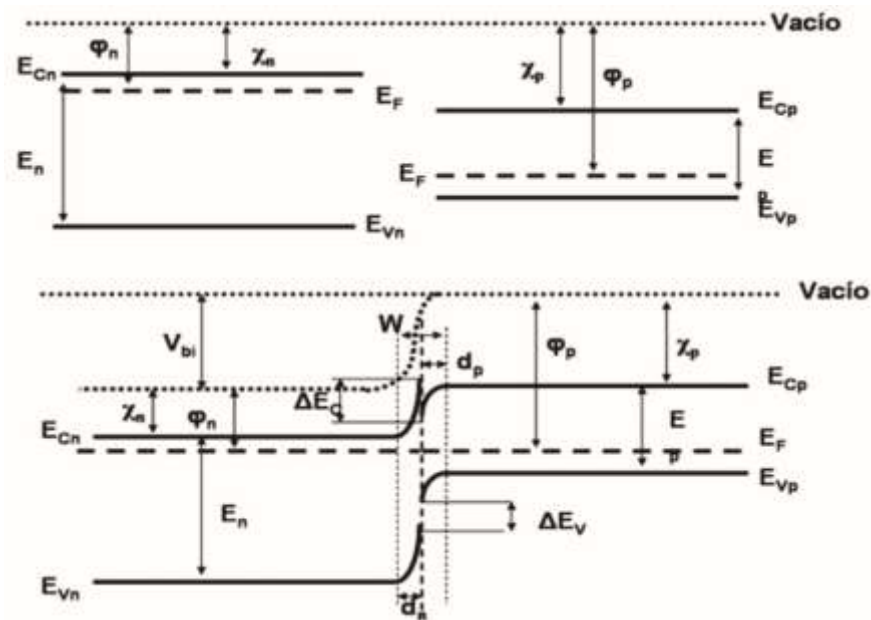


Figura 2.11. Diagrama de bandas de una heterounión antes y después del contacto [54].

Como se ha mencionado anteriormente, en la región de carga espacial actúa un campo eléctrico, cuyo valor ronda en $\sim 10^5$ V/cm, este valor es determinante en el rendimiento de las celdas solares. Al resolver las ecuaciones de este campo eléctrico se obtienen valores fundamentales para el análisis de la heterounión. Se asume que la unión en la interface es abrupta, es decir, la variación de concentración de cargas en la frontera no es continua (Fig. 2.12).

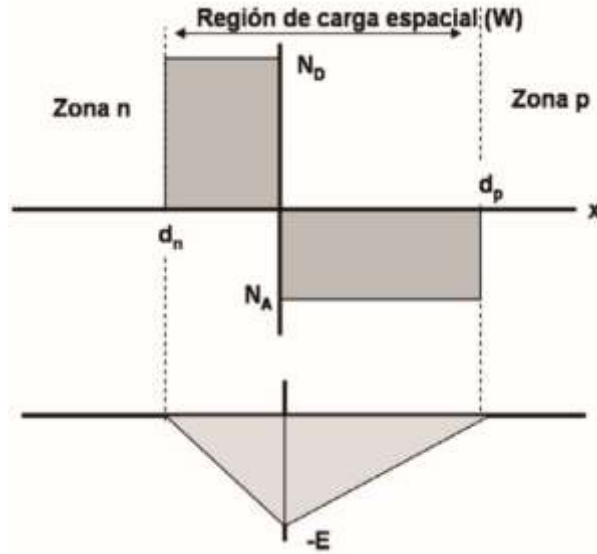


Figura 2.12. Esquema de una unión abrupta [54].

Considerando esto, se aplica de manera más sencilla la ecuación de Poisson en una sola dimensión a la región de carga espacial y así se obtiene la ecuación para el potencial eléctrico [49]:

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = \begin{cases} qN_A/\epsilon_0\epsilon_p, & \text{para } 0 \leq x \leq d_p \\ -qN_D/\epsilon_0\epsilon_n, & \text{para } -d_n \leq x \leq 0 \end{cases} \quad 2.3$$

Si se integra dos veces la ecuación anterior, se encuentra el valor del potencial eléctrico en función de la posición (x):

$$\Phi(x) = \begin{cases} (q/2 \epsilon_0\epsilon_p)N_A(x - d_p)^2 + \Phi_p, & \text{para } 0 \leq x \leq d_p \\ -(q/2 \epsilon_0\epsilon_n)N_D(x - d_n)^2 + \Phi_n, & \text{para } -d_n \leq x \leq 0 \end{cases} \quad 2.4$$

Se relacionan las constantes de integración aplicando la condición de continuidad del potencial eléctrico; en la interface tiene que ser igual en ambos lados:

$$(q/2 \epsilon_0\epsilon_p)N_A d_p^2 + \Phi_p = -(q/2 \epsilon_0\epsilon_n)N_D d_n^2 + \Phi_n \quad 2.5$$

La diferencia de las dos constantes de potencial o funciones de trabajo $\Phi_n - \Phi_p = V_{bi}$, recibe el nombre de barrera de potencial o voltaje Interconstruido (Built-in):

$$V_{bi} = \frac{q}{2\epsilon_0} \left(\frac{N_a d_p^2}{\epsilon_p} + \frac{N_d d_n^2}{\epsilon_n} \right) \quad 2.6$$

Otra manera de visualizar el voltaje interconstruido es observando de la figura 2.11, en la cual se observa que, al unir ambos semiconductores, los niveles de Fermi se alinean, generando que las bandas de valencia y de conducción tiendan a curvarse en la unión, la diferencia de energía potencial entre los electrones de ambos lados de la unión es el voltaje de interconstruido. Esto conduce a describir el voltaje interconstruido como la suma de los potenciales electrostáticos en el equilibrio de los semiconductores n y p:

$$V_{bi} = V_{bip} + V_{bin} \quad 2.7$$

Ahora, si se integra una vez la ecuación 2.3, se obtiene el valor del campo eléctrico:

$$E(x) = -\frac{d\Phi}{dx} \begin{cases} -qN_a(x + d_p)/\epsilon_0\epsilon_p, & \text{para } 0 \leq x \leq d_p \\ qN_d(x - d_n)/\epsilon_0\epsilon_n, & \text{para } -d_n \leq x \leq 0 \end{cases} \quad 2.8$$

Considerando que la condición de continuidad en la interface se expresa como:

$$E_p\epsilon_p = E_n\epsilon_n \quad 2.9$$

Por lo tanto, es posible encontrar los potenciales electrostáticos para los semiconductores p y n:

$$V_{bip} = \frac{eN_a x_p^2}{2\epsilon_p} \quad 2.10a$$

$$V_{bin} = \frac{eN_d x_n^2}{2\epsilon_n} \quad 2.10b$$

A partir de las ecuaciones anteriores se obtienen los valores de la región de carga espacial para cada semiconductor:

$$x_n = \left[\frac{2\epsilon_n\epsilon_p N_a V_{bi}}{eN_{dn}(\epsilon_n N_{dn} + \epsilon_p N_{ap})} \right]^{\frac{1}{2}} \quad 2.11$$

$$x_p = \left[\frac{2\epsilon_n\epsilon_p N_d V_{bi}}{eN_{ap}(\epsilon_n N_{dn} + \epsilon_p N_{ap})} \right]^{\frac{1}{2}} \quad 2.12$$

Al sumar x_n y x_p se expresa el ancho total de la región de carga espacial:

$$W = x_n + x_p = \left[\frac{2\epsilon_n\epsilon_p(N_{ap}+N_{dn})^2 V_{bi}}{eN_{dn}N_{ap}(\epsilon_n N_{dn} + \epsilon_p N_{ap})} \right]^{\frac{1}{2}} \quad 2.13$$

Donde N_{dn} es la concentración de portadores donadores en la capa n y N_{ap} es la concentración de portadores aceptores de la capa p. ϵ_n y ϵ_p son la permitividad del material semiconductor n y p respectivamente. Todo el desarrollo matemático mostrado anteriormente considera despreciable la densidad de centros de recombinación en la interfaz tomando en cuenta las concentraciones de portadores de los semiconductores. Físicamente en las heterouniones esta aproximación no siempre es válida, ya que una de las principales desventajas de estas estructuras es el desajuste de red entre los dos semiconductores lo que provoca defectos (centros de recombinación) en la unión generando pérdidas considerables en la eficiencia final del dispositivo [50-52].

2.6 Efecto fotovoltaico

El efecto fotovoltaico se define como la generación de una fuerza electromotriz como consecuencia de la absorción de radiación. El efecto fotovoltaico está presente en todo tipo de materiales, sin embargo, en los semiconductores orgánicos e inorgánicos es donde el efecto fotovoltaico alcanza eficiencias significativas que permitan su uso como dispositivos conversores de energía eléctrica [50,52].

El proceso del efecto fotovoltaico en un dispositivo de unión p-n conlleva los siguientes pasos:

1. Absorción de la luz incidente (radiación) y generación de pares electrón-hueco (portadores de carga) en los dos semiconductores (tipo p y n).
2. Separación de los portadores de carga por el campo eléctrico derivado de la unión p-n.
3. Desplazamiento de los portadores de carga fotogenerados a la unión p-n.
4. Recolección o extracción de los portadores de carga en los contactos (delantero y trasero).

2.6.1 Absorción de radiación y generación de pares electrón-hueco

Al incidir un haz de luz monocromática sobre un sólido con estructura homogénea, la relación que existe entre la intensidad de luz a una respectiva distancia (x) de la superficie del sólido y la intensidad incidente está dada por:

$$\frac{I}{I_0} = \frac{(1-R^2)e^{-\alpha x}}{1-R^2e^{-2\alpha x}} \quad 2.14$$

donde α es el coeficiente de absorción y R es el coeficiente de reflexión de la superficie en la cual incide la radiación. Al sacar el inverso del coeficiente de absorción, se obtiene la llamada longitud de absorción, la cual determina la distancia que puede viajar un fotón dentro de un material antes de ser absorbido. Básicamente el coeficiente de absorción (cm^{-1}) determina hasta qué punto un fotón de una longitud de onda particular penetra en el material antes de ser absorbido, α varía en función de la longitud de onda de la radiación incidente.

En la figura 2.13 se muestran los distintos coeficientes de absorción para distintos semiconductores usados en aplicaciones fotovoltaicas. Las curvas de absorción óptica de los semiconductores mostrados en la figura 2.13 presentan un umbral en la absorción que corresponde a la energía de la banda prohibida. Para un fotón incidente con una energía menor al band gap, α será muy pequeña, por otro lado, cuando la energía del fotón incidente es mayor que el band gap del semiconductor, los valores de α aumentan de forma considerable.

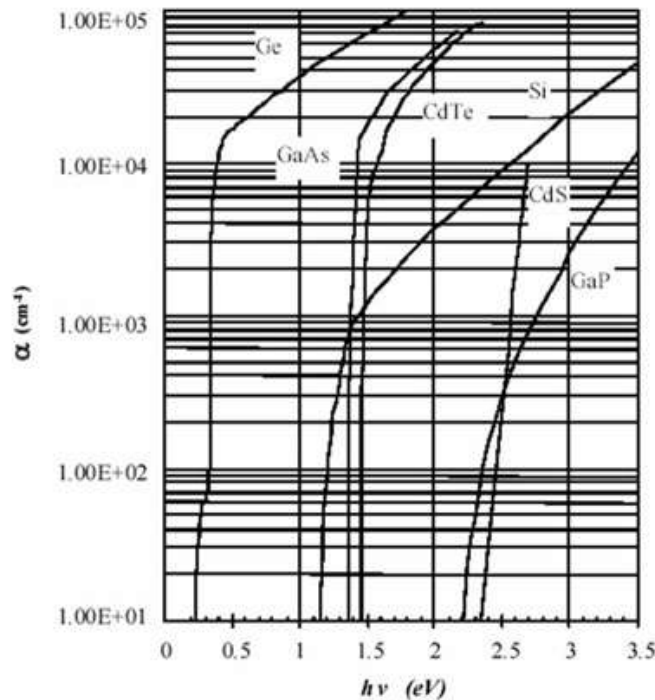


Figura 2.13. Coeficientes de absorción para algunos semiconductores usados en aplicaciones fotovoltaicas [54].

Cuando se absorbe un fotón se genera un par electrón-hueco, por lo que los materiales viables para el desarrollo y producción de dispositivos fotovoltaicos deberán tener un alto coeficiente de absorción en la región de más alta radiación solar.

Los semiconductores que cuentan con un band gap de transición directa, tal como, GaAs, CdS o CdTe, presentan un incremento muy abrupto de α al acercarse al borde de su band gap, mientras que los semiconductores de band gap de transición indirecta, tales como el Si y Ge, el incremento de α es más gradual.

Esta diferencia es determinante para elegir los semiconductores más aptos o viables para el desarrollo de celdas solares de película delgada. Generalmente se busca desarrollar celdas solares con semiconductores que tengan un alto coeficiente de absorción (de transición directa) permitiendo así la fabricación de dispositivos con películas de pocas micras de espesor. El CdTe absorbe el 99% de la luz visible incidente en tan solo una distancia de dos micras de la superficie [53]. Por otro lado, los dispositivos fabricados a base de Si (con transiciones indirectas), requieren un

espesor mínimo de 100 micras para poder absorber el mismo porcentaje de radiación.

En la ecuación 2.14 un parámetro importante es la reflexión que presenta la superficie del semiconductor donde incide la radiación. El coeficiente de reflexión (R) está en función del valor del índice de refracción del semiconductor expuesto a la radiación, el tener un alto índice de refracción implica que un mayor porcentaje de la luz incidente será reflejada por la superficie del semiconductor, lo cual genera las llamadas pérdidas por reflexión. Diversos métodos para reducir estas pérdidas en celdas solares, son el uso de capas antirreflejantes o superficies texturizadas [104-107].

2.6.2 Separación de cargas en la unión

Cuando se absorbe un fotón genera o crea un par electrón-hueco. Estas cargas fotogeneradas se separan antes de que se recombinen para que se produzca una corriente fotogenerada. Una de las funciones del campo eléctrico generado en la unión es separar las cargas una vez que los pares electrón-hueco se encuentran en la región de carga espacial. El campo eléctrico se opone al desplazamiento de los electrones desde la región n hacia la región p, sin embargo, facilita que los electrones generados en la región p se desplacen hacia la región n. Si un electrón fotogenerado se ubica dentro del campo eléctrico, este lo desplazara a través de la unión hacia la región n, de igual manera, los huecos fotogenerados en la región n, son movidos por el campo eléctrico hacia la región tipo p de la celda solar. Los electrones fotogenerados son arrastrados hacia el lado n por el campo eléctrico, mientras que los huecos fotogenerados son desplazados hacia el lado contrario (Fig. 2.14). Cuando la celda solar está en condiciones de iluminación, los portadores de carga minoritarios transportan la corriente y estos contribuyen (tanto electrones y huecos) a la corriente final.

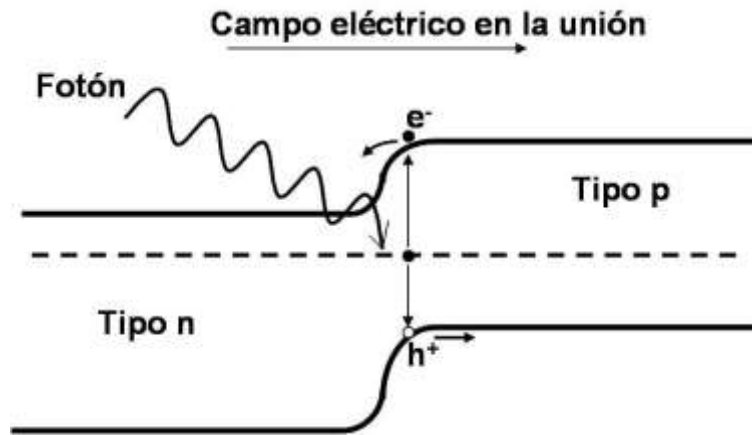


Figura 2.14. Esquema de la generación y separación de pares e-h por la absorción de un fotón [54]

Es posible que prácticamente todo par e-h generado por la luz incidente en la región donde actúa el campo eléctrico es separado contribuyendo a la densidad de corriente final del dispositivo. La corriente generada por el movimiento de las cargas debido a la influencia del campo eléctrico de la unión p-n se le conoce como corriente de arrastre.

2.6.3 Desplazamiento de los portadores de carga a la unión p-n

Los portadores fotogenerados por la absorción de fotones fuera de la región del campo eléctrico, es decir, en las regiones semiconductoras n y p lejanas a la unión p-n, deben mantenerse separadas el tiempo suficiente para desplazarse a través del semiconductor hacia la región de carga espacial antes de que se recombinen. Se le conoce como tiempo de vida de los portadores al tiempo que tarda un par electrón-hueco fotogenerado en recombinarse [54]. Si el portador no sufre un proceso de recombinación durante su tiempo de vida, este portador alcanza la región de carga espacial por medio de difusión, al llegar a la región de carga espacial se separa por efecto del campo eléctrico, alcanza los contactos y produce así corriente útil. El tiempo de vida del par e-h fotogenerado está en función del tiempo de vida del portador minoritario en el semiconductor. Los tiempos de vida dependen de si el semiconductor es de band gap de transición directa o indirecta. En semiconductores de banda prohibida de transición directa, el tiempo de vida está

determinado por los procesos de transición banda-banda y este tiempo suele ser muy corto, generalmente de menos de 10^{-8} s en un semiconductor intrínseco.

La presencia de centros de recombinación difícilmente afecta a la difusión de pares e-h fotogenerados hacia la región de carga espacial. En películas de Si con calidad estructural, el tiempo de vida de los portadores minoritarios alcanza los milisegundos. Sin embargo, este tiempo se puede reducir por centros de recombinación presentes en la película semiconductora, tales como defectos puntuales, dislocaciones o impurezas. Dado que en semiconductores de band gap de transición directa se necesita menos espesor para absorber la radiación incidente comparado a los semiconductores de transición indirecta, los tiempos de vida más cortos de los semiconductores de transición directa no son una desventaja determinante para fabricar celdas solares.

Si se considera que los portadores de carga se generan suficientemente cerca de la superficie de la celda, estos se pierden a través de la recombinación superficial, por lo que no contribuyen a la generación de corriente. Dado que la mayoría de la radiación incidente se absorbe en una región cercana a la superficie, es prioridad reducir los defectos superficiales para minimizar las pérdidas por recombinación en la superficie. La longitud de difusión de los portadores minoritarios es un parámetro importante en el funcionamiento de dispositivos fotovoltaicos, debido a que regula los mecanismos antes expuestos ya que la longitud de difusión es la distancia que recorre el portador minoritario antes de recombinarse. Cuando los semiconductores tienen una longitud de difusión pequeña, la mayoría de los portadores fotogenerados por la radiación incidente y posteriormente separados por el campo eléctrico no contribuyen a la corriente del dispositivo, ya que se recombinan dentro del semiconductor antes de llegar como portadores de carga en el circuito eléctrico externo.

La longitud de difusión depende directamente de la raíz cuadrada del coeficiente de difusión, el cual depende de la movilidad de los portadores de carga. Generalmente la movilidad de los electrones es mayor que la movilidad de los huecos, por lo que la longitud de difusión de los electrones generalmente es mayor que la de los

huecos, por lo cual, para que se tenga más eficiencia en el transporte de cargas, el material absorbente o activo de una celda solar debe ser tipo p, para que los electrones que tienen mayor longitud de difusión sean los portadores minoritarios.

2.7 Celdas solares de película delgada.

La energía solar tiende a aprovecharse y convertirse directamente en energía eléctrica a través del efecto fotovoltaico presente en las celdas solares. Esta transformación de energía necesariamente requiere de un material semiconductor cuya conductividad (σ) varía en el rango de $10^4 > \sigma > 10^{-8} (\Omega cm)^{-1}$ [55]. Una característica ventajosa de los semiconductores es que la corriente eléctrica es transportada por electrones cargados negativamente o por huecos que son partículas cargadas positivamente, o por ambas partículas, esta característica permite desarrollar celdas solares, transistores y circuitos integrados [56].

Una película delgada se forma mediante procesos de crecimiento y/o nucleación a partir de compuestos que condensan o reaccionan sobre un sustrato. Los parámetros de depósito determinarán las propiedades estructurales, químicas y físicas de las películas. Se dice que una película delgada es un material que presenta un espesor entre unos pocos nanómetros a decenas de micras. La tecnología de película delgada es atractiva debido a la flexibilidad de producir un mismo material semiconductor por diversas técnicas, además de crear estructuras cristalinas, policristalinas, materiales amorfos, nano y micro cristalino, dependiendo solo de los parámetros de depósito o el sustrato usado, además, existe la posibilidad de modificar constantes de red, energía de banda prohibida, y otras propiedades optoelectrónicas, al igual que al ser una tecnología de película delgada, se requiere menos material para desarrollar celdas solares, lo que reduce el costo de material y peso total, lo que favorece la implementación de módulos solares [57].

2.7.1 Componentes principales de una celda solar

Basándose en la tecnología de película delgada se han explorado diversas estructuras de celdas solares basadas en homouniones, heterouniones o barreras Schottky, así como dispositivos mono celda o tándem de multiunión, también se han explorado con uniones abruptas o graduales, incluso con semiconductores que tienen conductividades muy distintas. Una estructura típica de celda solar de película delgada en configuración superestrato se encuentra conformada por un sustrato o soporte mecánico, un contacto frontal o un óxido conductor transparente (TCO conformando el contacto frontal), una capa ventana, una capa absorbente o capa activa y un contacto posterior. En cuanto a una configuración tipo sustrato (Fig. 2.15) se compone de: contacto frontal o un TCO, capa ventana, capa absorbente y contacto posterior, el cual puede usarse como soporte mecánico o incluir un sustrato.

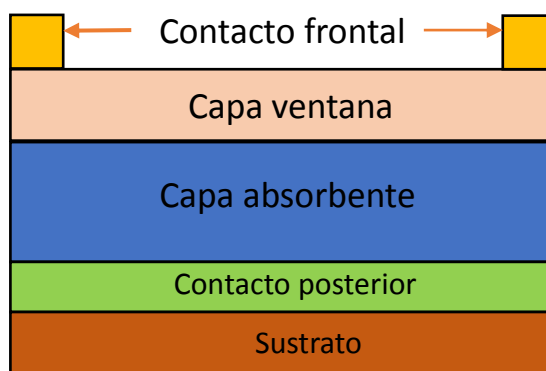


Figura 2.15. Estructura convencional de una celda solar de película delgada en configuración tipo sustrato.

2.7.2 Sustrato

El sustrato es un componente pasivo en la estructura de la celda solar, es recomendable que presente estabilidad mecánica para cumplir con el fin de ser el soporte de la estructura, presentar un coeficiente de dilatación similar al de las capas depositadas para evitar esfuerzos que comprometan la estructura de la celda solar al someterse a cambios de temperatura, además ser inerte químicamente durante el proceso de fabricación para evitar tener un rol activo en las propiedades

de las demás capas. Para la configuración tipo superestrato, el sustrato necesariamente debe ser transparente para permitir el paso de la luz solar y el contacto frontal se realiza mediante un TCO el cual se deposita sobre el sustrato. Para la configuración tipo sustrato, el sustrato debe ser un metal o una capa metálica depositada sobre un vidrio o un material polimérico los cuales actúan como contacto posterior.

2.7.3 Contacto Frontal

El contacto frontal se aplica sobre la capa n o capa ventana ya sea en la configuración superestrato o sustrato. Para obtener un contacto óhmico entre la capa n y el contacto frontal es necesario que el metal usado tenga una función de trabajo menor que la función de trabajo del semiconductor tipo n.

Un óxido conductor transparente (TCO), son semiconductores tipo n con una alta concentración de impurezas donadoras (degenerados) por lo cual tienen altas conductividades eléctricas (lo que permite realizar contactos con baja resistencia) además, cuentan con una alta transparencia en el rango visible del espectro (lo que permite que un gran porcentaje de la luz incidente llegue a la capa absorbente).

2.7.4 Capa ventana

La función de la capa ventana en una celda solar de unión p-n es la de formar la unión p-n, pero con la función de emisor, es decir, de no absorber radiación para que ésta alcance la región de carga espacial y la capa absorbente. En la capa ventana, no se produce corriente fotogenerada. Por lo cual, la energía de banda prohibida (E_g) de la capa ventana deberá ser lo más ancha posible (para reducir lo más posible su absorción óptica) mientras que su espesor tiende a ser delgado para permitir a los portadores separados alcancen el contacto frontal (longitud de difusión) además de no incrementar la resistencia en serie. En cuanto a la unión p-n, es importante reducir al mínimo saltos o discontinuidades en la banda de conducción al formar una heteroestructura para facilitar el transporte de los portadores.

2.7.5 Capa absorbente

La función principal de la capa absorbente es absorber los fotones de la radiación solar para generar pares electrón-hueco. Una capa absorbente debe cumplir los siguientes requisitos principales [58]:

1. La energía de banda prohibida del semiconductor absorbente debe ser similar a la energía de la región espectral a la cual operará la celda solar.
2. El coeficiente de absorción óptico de esta capa debe ser lo más alto posible para absorber el mayor porcentaje posible de la radiación solar dentro de la película delgada.
3. Los valores de los tiempos de vida y longitudes de difusión deben ser altos para los portadores minoritarios, con el fin de desarrollar celdas solares con buenas eficiencias.
4. Es importante reducir defectos e impurezas en la estructura cristalina de la capa absorbente, así como en las demás capas, con el fin de reducir centros de recombinación, los cuales disminuyen la movilidad del portador y acortan la longitud de difusión del portador de carga.
5. Usar semiconductores no degenerados ya que las impurezas arbitrarias provocarán que el semiconductor degenerado tenga fenómenos de tunelamiento a través de la región de carga espacial, lo que ocasionara cortocircuito en la celda solar.

2.7.6 Contacto trasero

Generalmente en celdas solares de película delgada el contacto posterior o trasero se aplica en la capa absorbente (tipo p) ya sea en la configuración tipo sustrato o en configuración superestrato. Para lograr un contacto óhmico con la capa absorbente o capa tipo p, se requiere que el metal usado como contacto trasero tenga una función de trabajo mayor que la del semiconductor tipo p. Sin embargo, debido a la alta función de trabajo del CdTe ($\sim 5.5 \text{ eV}$), el formar un contacto óhmico

con un metal trae consigo una complicación debido a que las funciones de trabajo de los metales que generalmente se usan para contacto trasero tienen funciones de trabajo menores a la requerida en este caso, teniendo así la necesidad de usar capas HTL o capas P+ entre la capa del CdTe y el contacto metálico para lograr un contacto óhmico [59].

2.7.7 Capa HTL y ETL

Una de las áreas de oportunidad para mejorar el rendimiento de las celdas solares es el desarrollo de contactos de alto rendimiento, para esto, se puede desarrollar capas funcionales que puedan ayudar a los contactos frontal y posterior recolectar las cargas fotogeneradas. Estas capas o películas funcionales se dividen generalmente en dos tipos: capas transportadoras de huecos (HTL) y capas transportadoras de electrones (ETL), cuya función principal es recolectar selectivamente una carga sobre la otra. Una capa HTL tiene como principal característica su alta densidad de portadores aceptores lo que mejora la extracción del electrón del contacto posterior. Esta característica permitiría lograr un contacto óhmico entre el contacto posterior y el semiconductor tipo p cuando se coloca una capa HTL entre estos dos [72, 73]

Por otro lado, una capa ETL es menos usual que la capa HTL, pero el usar esta capa entre la capa ventana y el contacto frontal, puede aumentar la eficiencia de la celda solar, al mejorar el contacto óhmico en el contacto frontal debido a un transporte más efectivo de los electrones, debido a una alta concentración de electrones en esta capa [73].

2.8 Funcionamiento de la celda solar

El principio de funcionamiento de las celdas solares se basa en el efecto fotovoltaico. Las celdas solares están hechas de semiconductores especialmente tratados para lograr formar un campo eléctrico cuyo lado negativo está orientado

hacia el sol. Al momento que la energía solar (fotones) incide sobre la celda solar, los electrones son impactados y liberados de los átomos en el semiconductor, generando así, pares electrón-hueco. Si los contactos están ubicados en los polos positivo y negativo, formando un circuito eléctrico, los electrones fotogenerados son extraídos o recolectados por los contactos, generando corriente eléctrica o fotocorriente (I_{ph}). En condiciones de oscuridad una celda solar no está activa y funciona como un diodo, es decir, un dispositivo de unión p-n que no produce corriente o voltaje. Sin embargo, si la celda está conectada a una fuente externa, se produce una corriente, llamada corriente de diodo o en oscuridad (I_D) [60].

La generación de la corriente fotogenerada en una celda solar va a implicar dos procesos determinantes. El primer proceso inicia con la absorción de fotones incidentes para la generación de pares e-h. Los pares e-h podrán ser creados en la celda solar solo si el fotón incidente tiene una energía igual o mayor que la de la banda prohibida del semiconductor de la capa absorbente. Sin embargo, los electrones (en el semiconductor p), y los huecos (en el semiconductor n) sólo “vivirán” en promedio, el tiempo de vida determinado por los portadores minoritarios antes de que estos se recombinen.

Al formarse una unión p-n se genera una región de carga espacial, donde los huecos se han difundido en la región n, por lo cual átomos ionizados negativamente permanecen, mientras que algunos electrones se han difundido en la región p, permaneciendo átomos ionizados positivamente, esto genera una región de carga espacial negativa y positiva respectivamente. Lo que produce la formación de un campo eléctrico entre la región n y la región p, impidiendo progresivamente la difusión de los portadores de carga hasta llegar a un equilibrio, generándose así el V_{bi} . Cuando los electrones son llevados de la banda de valencia a la banda de conducción, es decir, liberados del átomo en la región de carga espacial, el campo eléctrico los arrastrara a la región n, mientras que los huecos generados serán desplazados a la región p [60, 108], como se observa en la figura 2.16.

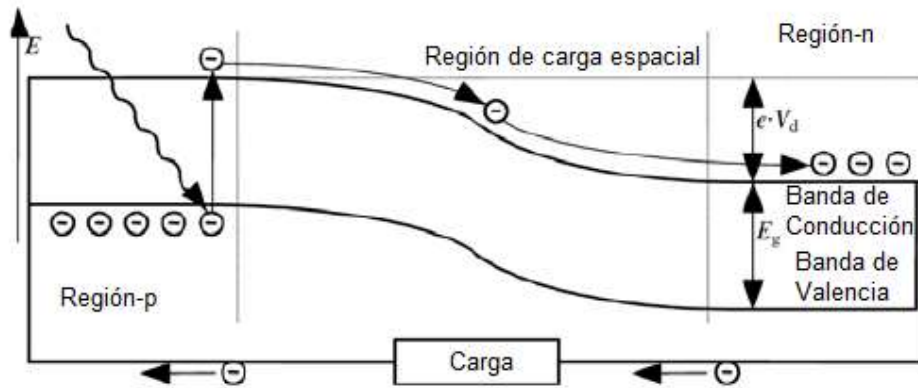


Figura 2.16. Principio de funcionamiento de una celda solar [108]

Un segundo proceso, se lleva a cabo cuando los portadores son separados espacialmente por la unión p-n impidiendo así, un proceso de recombinación entre ellos. Los portadores fotogenerados son separados por la acción del campo eléctrico generado por la unión p-n. Si los portadores minoritarios fotogenerados alcanzan a la unión, son desplazados por el campo eléctrico, donde se encontrarán como portadores mayoritarios. Si la capa ventana (emisor) y la base de la celda solar están conectados entre sí (celda solar en cortocircuito), los portadores fotogenerados fluirán a través del circuito externo [61]. La celda solar sólo convierte una parte de los fotones incidentes en corriente eléctrica (Ec. 2.15), para fotones con energías más pequeñas que la energía de la banda prohibida de la capa absorbente, no se promueve un electrón desde la banda de valencia a la banda de conducción debido a que la energía de estos fotones no es suficiente.

$$\lambda_{max} = \frac{hc}{E_g} = \frac{1240 \text{ (nm) eV}}{E_g} \quad 2.15$$

Donde h es la constante de Planck, c la velocidad de la luz y la E_g es la energía de banda prohibida del semiconductor. Sin embargo, no toda la energía de los fotones incidentes con longitudes de onda cercanas a la banda de energía prohibida se convierte en electricidad ya que la superficie de la celda solar refleja una parte de la radiación incidente, y otra fracción de la radiación incidente se transmite a través de

la celda solar (Fig. 2.17), además, de que los electrones fotogenerados sufren procesos de recombinación.

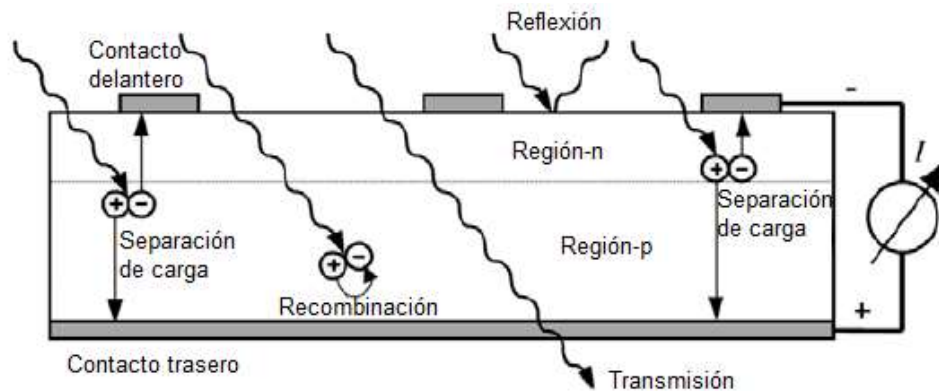


Figura 2.17. Reflexión, absorción, transmisión y recombinación en una celda solar irradiada [108].

2.8.1 Ecuaciones básicas del funcionamiento de celdas solares.

Una celda solar generalmente se representa como un diodo, usando un circuito eléctrico equivalente (Fig. 2.18) [59]. Este circuito equivalente es usado para representar una celda solar individual, un módulo solar consiste en un número de celdas solares interconectadas.

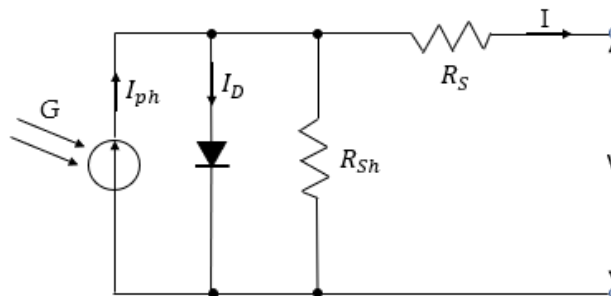


Figura 2.18. Circuito eléctrico equivalente de una celda solar.

En la figura 2.18, el circuito eléctrico equivalente contiene una corriente, I_{ph} (fuente foto generada), un diodo, resistencia en serie R_S , que representa la resistencia dentro de la celda; el diodo incluye una resistencia en paralelo R_{Sh} . La corriente total

(I) es la diferencia entre la fotocorriente (I_{ph}) y la corriente de diodo (I_D), determinada por la ecuación 2.16 [62,63]:

$$I = I_{ph} - I_D = I_{ph} - I_0 \left\{ e^{\frac{q(V+IR_S)}{KT}} - 1 \right\} - \frac{V+IR_S}{R_{SH}} \quad 2.16$$

En una celda solar, generalmente la resistencia en paralelo es mucho mayor que una resistencia de carga, por otro lado, la resistencia en serie generalmente es más pequeña que una resistencia de carga, por lo que menos energía se disipa dentro de la celda. Si se considera despreciable la contribución de R_s y R_{sh} , la corriente total será la diferencia entre la fotocorriente (I_{ph}) y la corriente del diodo normal (I_D):

$$I = I_{ph} - I_D = I_{ph} - I_0 \left[e^{\frac{qV}{KT}} - 1 \right] \quad 2.17$$

Donde T es la temperatura de la celda solar (K), q es la carga del electrón, K es la constante de Boltzmann, V es el voltaje a través de la celda solar e I_0 es la corriente de saturación en oscuridad.

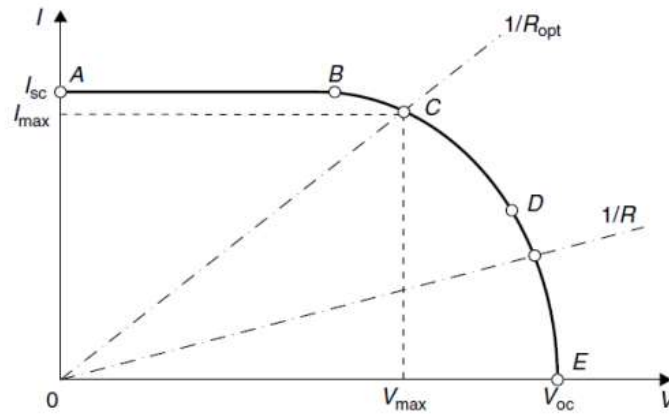


Figura 2.19. Curva I-V característica de una celda solar [108].

En la figura 2.19 se observa la curva I-V característica de una celda solar con una irradiación (G_t) considerando una temperatura de la celda solar fija (T_c). La corriente de una celda fotovoltaica (PV) va a depender de la cantidad de luz solar incidente sobre la celda. Cuando la celda solar se presenta en corto circuito, la corriente obtenida es la máxima, la cual se denomina corriente de cortocircuito (I_{sc}), mientras que el valor del voltaje a través de la celda es cero. Cuando la celda solar se

encuentra en circuito abierto (no hay circuito), el voltaje obtenido es máximo y se le denomina voltaje de circuito abierto (V_{oc}) donde la corriente es cero.

También, en la figura 2.19 se observa que, entre circuito abierto y cortocircuito, la potencia de salida de la celda solar es mayor que cero, la gráfica característica de carga es una línea recta con una pendiente de $1/V = 1/R$. Si la resistencia de carga es pequeña, la celda solar operará en la región marcada entre los puntos AB de la curva, donde la celda solar se comportará como una fuente de corriente constante, con un valor prácticamente igual al valor de la corriente de corto circuito. Pero si la resistencia es grande, la celda trabajara en la región marcada por los puntos DE de la curva, donde el comportamiento de la celda solar es como una fuente de voltaje constante, con un valor prácticamente igual al valor del voltaje de circuito abierto. La potencia máxima de la celda solar está dada por la ecuación 2.18. muy redundante

$$P_{max} = I_{max} \cdot V_{max} \quad 2.18$$

El punto C en la curva de la figura 2.19 es también denominado el punto de máxima potencia, que es el punto (P_{max} , I_{max} , V_{max}) en el que se alcanza la máxima potencia de salida. Teniendo en cuenta P_{max} , el factor de llenado (FF) se calcula a partir de las siguientes ecuaciones [62, 63]:

$$P_{max} = I_{sc} V_{oc} FF \quad 2.19$$

$$FF = \frac{P_{max}}{I_{sc} V_{oc}} = \frac{I_{max} V_{max}}{I_{sc} V_{oc}} \quad 2.20$$

El FF se define como el cociente de la potencia máxima de la celda solar sobre el producto de V_{oc} y I_{sc} . Gráficamente, el FF nos indica la "cuadratura" de la celda solar ya que es el área del rectángulo más grande dentro de la curva I-V; las celdas solares eficientes tienen un valor de FF mayor que 0.7.

De la figura 2.19 se obtienen dos parámetros fundamentales para estudiar el funcionamiento de la celda solar: la corriente de corto circuito (I_{sc}) y el voltaje de

circuito abierto (V_{oc}). I_{sc} es la mayor corriente generada por la celda solar y se obtiene sometiendo la celda solar a condiciones de cortocircuito, es decir, cuando $V = 0$, y es igual a la corriente fotogenerada I_{ph} . V_{oc} es la caída de voltaje a través del diodo (celda solar) cuando es atravesado por la fotocorriente I_{ph} , que va a ser igual a la corriente del diodo (I_D), cuando la corriente generada es $I = 0$. Este es el voltaje que se obtiene de la celda solar en condiciones de oscuridad, mismo que se determina mediante la ecuación 2.21:

$$e^{\frac{qV_{oc}}{KT_c}} - 1 = \frac{I_{sc}}{I_0} \quad 2.21$$

Donde es posible despejar V_{oc} [62,63]:

$$V_{oc} = \frac{KT_c}{q} \ln \left(\frac{I_{sc}}{I_0} + 1 \right) = V_t \ln \left(\frac{I_{sc}}{I_0} + 1 \right) \quad 2.22$$

Donde $V_t = \frac{KT_c}{q}$ es el voltaje térmico. La potencia de salida (P), de una celda solar fotovoltaica está dada por:

$$P = IV \quad 2.23$$

La potencia de salida de la celda solar también va a depender de la resistencia de carga (R), considerando que $V = IR$, se tiene que:

$$P = I^2 R \quad 2.24$$

Si se sustituye la ecuación 2.17 en la ecuación 2.23, se obtiene la siguiente expresión:

$$P = \left\{ I_{sc} - I_0 \left[e^{\frac{qV}{KT}} - 1 \right] \right\} V \quad 2.25$$

Si se deriva con respecto a V la ecuación 2.25 e igualando la derivada a cero, el voltaje externo V_{max} de la celda solar puede ser obtenida:

$$e^{\frac{qV_{max}}{KT_c}} \left(1 + \frac{qV_{max}}{KT_c} \right) = 1 + \frac{I_{sc}}{I_0} \quad 2.26$$

La ecuación 2.26 es una ecuación explícita del voltaje máximo V_{max} , la cual maximiza la potencia en función de I_{sc} ($I_{sc} = I_{ph}$), la corriente de saturación en oscuridad (I_0), y también la temperatura de la celda solar (T_c). Si se conocen los valores de los 3 parámetros antes mencionados, es posible calcular el valor de V_{max} usando la ecuación 2.26. La corriente máxima obtenida (I_{max}), se obtiene sustituyendo la ecuación 2.26 en la ecuación 2.17 [62,63]:

$$I_{max} = I_{sc} - I_0 \left[e^{\frac{qV}{KT_c}} - 1 \right] = I_{sc} - I_0 \left[\frac{1 + \frac{I_{sc}}{I_0}}{1 + \frac{qV_{max}}{KT_c}} - 1 \right] \quad 2.27$$

Reduciendo términos en la ecuación 2.27, se tiene que:

$$I_{max} = \frac{qV_{max}}{KT_c + qV_{max}} (I_{sc} + I_0) \quad 2.28$$

Al sustituir la ecuación 2.28 en la ecuación 2.18, se obtiene la ecuación para determinar la potencia máxima de la celda solar.

$$P_{max} = \frac{qV_{max}^2}{KT_c + qV_{max}} (I_{sc} + I_0) \quad 2.29$$

Finalmente se calcula la eficiencia de la celda solar, la cual es la relación de la salida máxima de potencia eléctrica (P_{max}) y la potencia de la radiación incidente (P_{in}) [62,63].

$$PCE = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{V_{oc} I_{sc} FF}{P_{in}} = \frac{I_{max} V_{max}}{AG_t} \quad 2.30$$

Donde A es el área de la celda (en m²) [64].

CAPÍTULO 3

Ambiente de simulación

3.1 Descripción del software SCAPS-1D

La simulación numérica de celdas solares es una herramienta importante para comprender y analizar la influencia de diferentes parámetros físicos en el rendimiento de una celda solar, así como para diseñar diferentes celdas solares basadas en materiales cristalinos, policristalinos y amorfos, minimizando el costo de fabricación de prototipos, además de ofrecer la oportunidad de estudiar la influencia de cada capa de la celda en el caso de parámetros interdependientes.

Actualmente existen diferentes softwares capaces de llevar a cabo el modelado de celdas solares, tales como SCAPS-1D, AMPS-1D, SILVACO, PC1D, entre otros. Estos programas tienen diferentes posibilidades y limitaciones, sin embargo, los principios básicos de operación generalmente son los mismos. Para el desarrollo de este trabajo de investigación, se utilizó el simulador SCAPS-1D versión 3.3.10, el cual, es un programa gráfico de simulación de celdas solares, desarrollado con LabWindows / CVI de National Instruments, en el departamento de Electrónica y Sistemas de Información (ELIS) de la Universidad de Gante en Bélgica por el profesor Marc Burgelman [65].

En este capítulo se aborda una descripción del funcionamiento e interfaz del simulador Solar Cell Capacitance Simulator - 1 Dimension (SCAPS-1D), el cual se utilizó para modelar las celdas solares propuestas en esta tesis. SCAPS-1D es un software de modelado numérico diseñado para simular las celdas solares de heterounión de película delgada y ha sido desarrollado especialmente para celdas solares de Cu(In,Ga)Se_2 y CdTe . Sin embargo, varias extensiones y modificaciones han mejorado sus capacidades, haciendo posible que también sea aplicable a celdas solares cristalinas (Si y GaAs), celdas con semiconductores de estructura amorfas (a-Si), óxidos metálicos, etc. [65].

3.2 Principio matemático de SCAPS-1D

El software SCAPS-1D es una herramienta de modelado numérico dirigida a la simulación de las propiedades de materiales semiconductores. El principio de funcionamiento del software SCAPS-1D se basa en la resolución de las ecuaciones básicas de semiconductores para modelar celdas fotovoltaicas [66], las cuales son: ecuaciones de densidad de corriente, ecuaciones de continuidad tanto para electrones como huecos y, por último, la ecuación de Poisson.

En los semiconductores, la corriente eléctrica se lleva a cabo principalmente por dos factores, es decir, se produce por el desplazamiento de electrones o huecos, debido a la acción de una fuerza externa generada por la excitación de un campo eléctrico, a la cual se le denomina corriente de arrastre, o por un gradiente de concentración de portadores en el semiconductor (corriente de difusión) [49, 50]. La densidad de corriente de electrones y huecos se expresa mediante las ecuaciones 3.1 y 3.2 respectivamente.

$$J_n = qn\mu_n E + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad 3.1$$

$$J_p = qp\mu_p E - qD_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad 3.2$$

Donde q es la carga del electrón, μ_n y μ_p son la movilidad de electrones y huecos respectivamente, D_n y D_p son el coeficiente de difusión de electrones y huecos respectivamente, E es el campo eléctrico, n y p son la densidad de electrones y huecos respectivamente. Usando las relaciones de Einstein, se observa que el coeficiente de difusión está en función de la movilidad del portador [49].

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{KT}{q} \quad 3.3$$

Donde KT/q es el voltaje térmico V_t a $T = 300$ K, cuyo valor es de ~ 0.0259 V. Las ecuaciones de continuidad de electrones y huecos en estado estacionario (Ec. 3.4 y 3.5 respectivamente) describen un concepto básico de las propiedades de los semiconductores, el cual es que el cambio en la densidad de portadores es debido

a la diferencia entre el flujo entrante y saliente de portadores más la generación de portadores y restando los procesos de recombinación.

$$-\frac{\partial J_n}{\partial x} + G - R = 0 \quad 3.4$$

$$-\frac{\partial J_p}{\partial x} + G - R = 0 \quad 3.5$$

Donde J_n y J_p son las densidades de corriente de electrones y huecos respectivamente, R es la recombinación producida por procesos de recombinación directa e indirecta y G es la tasa de los portadores fotogenerados. Las ecuaciones de continuidad indican que la densidad de corriente debe ser igual a la cantidad de portadores fotogenerados (G), restando la cantidad total de portadores perdidos por procesos de recombinación (R).

La ecuación de Poisson establece el punto inicial para encontrar la solución cualitativa de las variables electrostáticas en un semiconductor. La ecuación de Poisson (Ec. 3.6) determina la relación que existe entre el campo eléctrico de una unión p-n (E) y la densidad de carga espacial (ρ):

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{q}{\epsilon_r \epsilon_0} [p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + p_t(x) - n_t(x)] = 0 \quad 3.6$$

Donde $\psi(x)$ es el potencial electrostático, q es la carga del electrón, ϵ_r y ϵ_0 son la permitividad relativa y en el vacío respectivamente, $p(x)$ y $n(x)$ son la densidad de electrones y huecos respectivamente, $N_D^+(x)$ y $N_A^-(x)$ son la densidad de donadores y aceptores ionizados respectivamente, $p_t(x)$ y $n_t(x)$ densidad de defectos aceptores y donadores respectivamente, y x determina la posición en la coordenada x .

Las ecuaciones anteriores junto con las condiciones de contorno apropiadas en las interfaces y contactos, da como resultado un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas en (ψ, n, p) o (ψ, E_{fn}, E_{fp}) . SCAPS-1D calcula numéricamente un estado estable y una solución de pequeña señal de este sistema. Para ello, primero se

discretiza la estructura (crea una malla). El algoritmo SCAPS-1D está diseñado de tal manera que proporciona una mayor cantidad de puntos en la malla en regiones donde las propiedades de los materiales experimentan una mayor variación (cerca de interfaces/contactos), pero en áreas donde se espera que las propiedades permanezcan prácticamente constantes (bulk), el algoritmo proporciona menos puntos para la discretización de la malla [66]. SCAPS -1D permite aumentar o disminuir el número de puntos para optimizar la malla, sin embargo, en esta investigación se trabaja con el número de puntos de la malla predeterminado por el software porque al aumentar o disminuir el número de puntos en la malla, prácticamente no hay cambios en los resultados obtenidos.

3.3 Interfaz del software SCAPS 1-D

SCAPS 1-D es un programa de simulación de células solares unidimensional, diseñado para simular las características eléctricas de CC y CA de celdas solares de heterounión de película delgada. Este software está diseñado para simular la curva característica $J - V$, la eficiencia cuántica (QE) de la celda solar, eficiencia (η o PCE), factor de llenado (FF), densidad de corriente de cortocircuito (J_{sc}), voltaje de circuito abierto (V_{oc}), entre otros [65, 66].

La interfaz del software SCAPS 1-D está organizada en distintos paneles, en los cuales se pueden configurar distintos parámetros o visualizar los resultados tanto de forma gráfica como numérica. El panel principal es el "panel de acción" (Fig. 3.1), donde se encuentran todos los módulos o secciones que nos permitirán configurar la estructura de la celda solar, también se puede configurar la lista de acciones para los cálculos requeridos, ejecutar los diferentes cálculos, navegar a otros módulos, guardar y graficar los resultados, así como cerrar el software [66].

El módulo 1 denominado "Set problem" se usa para definir la estructura de una celda solar. Al iniciar este módulo (clic en el botón "Set problem") se abre otro panel "Solar Cell Definition Panel" (Fig. 3.2), donde se definen las diferentes propiedades físicas de las capas que componen la celda, contactos, defectos de interfaz, entre otros.

En el módulo **2** denominado “working point” se pueden configurar los valores de operación, tales como temperatura de trabajo, resistencias en serie o paralelo, condiciones de iluminación o de oscuridad.

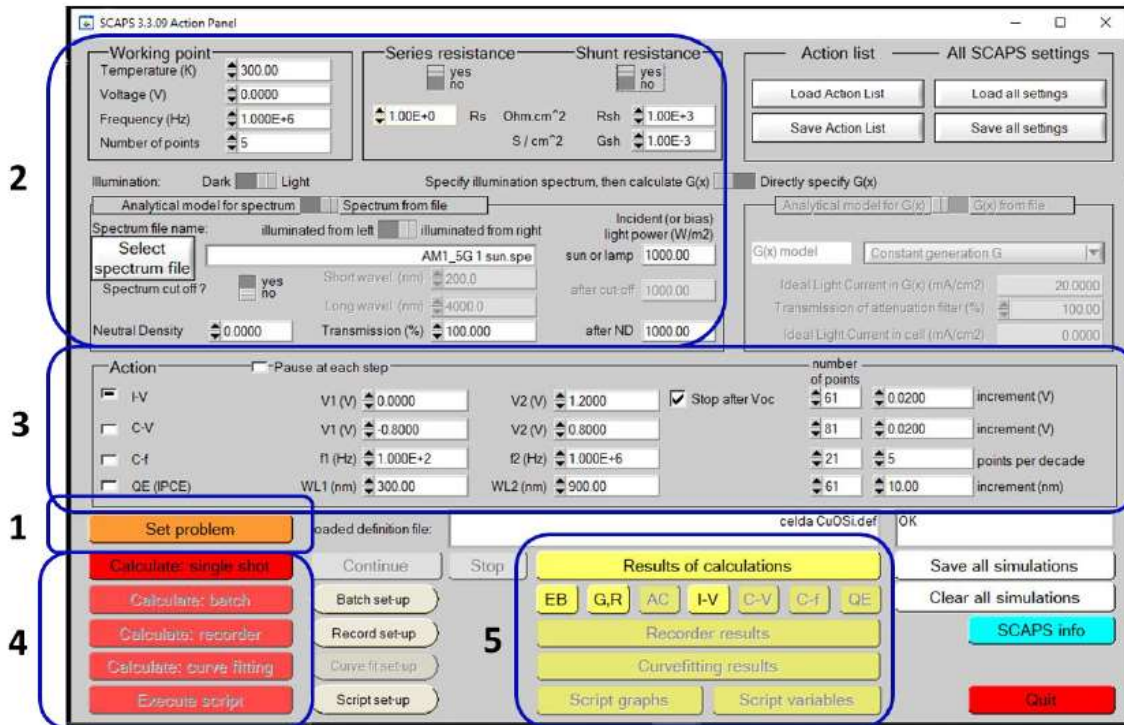


Figura 3.1. Modulo principal “Action panel” del software SCAPS 1-D

En el módulo **3** denominado "Action" se seleccionan las diferentes mediciones que se llevarán a cabo en las simulaciones realizadas. Esta sección incluye curvas características $I - V$, eficiencia cuántica (QE), medidas de capacitancia-voltaje ($C - V$) y frecuencia - capacitancia ($C - f$).

La manera de llevar a cabo las simulaciones, es decir, una simulación a la vez con todos los parámetros determinados fijos (single shot), o una serie de simulaciones donde automáticamente se puede variar en un rango determinado cierto parámetro de la celda (batch), como espesores, concentración de portadores, etc., se llevan a cabo en el módulo **4**.

En el módulo **5**, se pueden visualizar los resultados gráficos y numéricos de la simulación o simulaciones realizadas según sea el caso al hacer clic en el botón respectivo.

3.3.1 Definición de la celda solar en SCAPS-1D

Para editar o construir la celda solar a simular se usa el módulo “Solar Cell Definition”. En este módulo se configuran todos los parámetros de las capas que componen el modelo de celda solar a simular, es decir, en este módulo se introducen todas las capas (máximo 7 capas) y sus propiedades físicas, así como también, se definen contactos e interfaces de la celda solar. SCAPS 1-D de manera interactiva pone restricciones en la introducción de parámetros para que no se definan situaciones imposibles o poco realistas [66].



Figura 3.2. Panel Solar Cell Definition.

En la figura 3.2 se puede observar el módulo “Solar Cell Definition” desplegado, en este módulo se construye la celda solar, en la parte izquierda de la figura se puede observar que SCAPS 1-D nos permite introducir 7 capas para construir una celda

solar. Al hacer Clic en agregar capa “add layer” se despliega un panel (Fig. 3.3) en el cual se pueden introducir propiedades físicas de las capas que componen nuestra celda solar, tales como: espesor (0.01 nm-1 m) en el cual el usuario puede seleccionar varias unidades para la visualización del espesor (Å, nm, μm , mm y cm), band gap, afinidad electrónica, permitividad dieléctrica, densidad efectiva de estados en la banda de conducción y valencia, velocidad térmica de electrones y huecos, densidad de portadores así como su naturaleza (aceptores y donadores), movilidad de electrones y huecos. También se puede introducir el modelo óptico de absorción de cada capa (from model y from file), los cuales se abordarán más adelante.

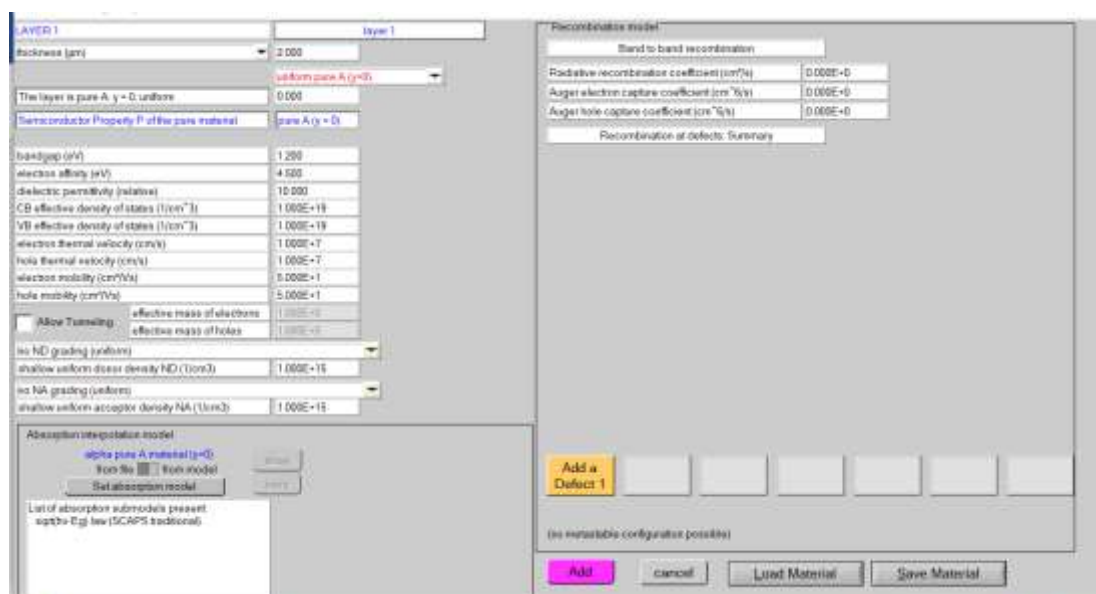


Figura 3.3. Introducción de parámetros físicos de la celda solar.

También en el mismo panel se pueden introducir para cada capa coeficientes de recombinación radiativa, y Auger para electrones y huecos. Además, permite definir hasta 7 defectos presentes en la capa actual (Fig. 3.4), en los cuales se define el tipo de defecto (neutral, aceptor simple o doble, donador simple o doble), el área de sección de captura tanto para electrones y huecos, el tipo de distribución energética de estos defectos, la densidad total de defectos (N_t), así como el nivel energético de estos defectos con respecto a la banda de valencia o conducción. Cabe mencionar que el tipo de defecto neutral solo es para fines de modelado ya que físicamente no existe un defecto de naturaleza neutral [66].

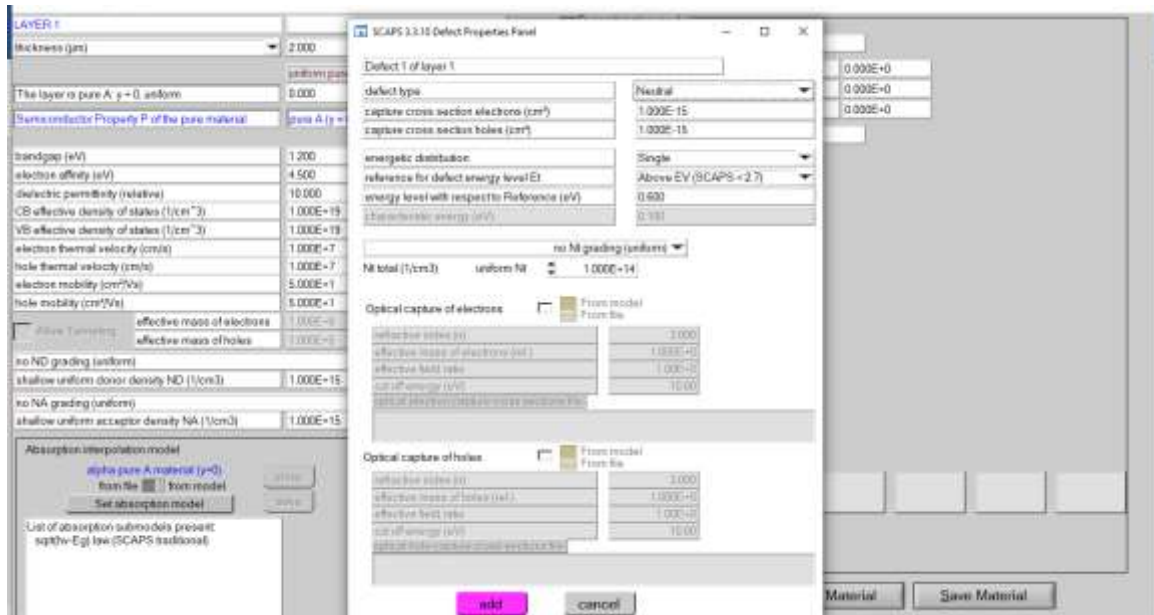


Figura 3.4. Panel para la introducción de defectos en las capas de la celda solar.

En la figura 3.2 se observa el panel donde se puede introducir las propiedades físicas de los contactos metálicos (delantero y posterior) de la celda solar. Las propiedades del contacto se pueden configurar haciendo clic en el botón de contacto frontal o trasero según sea el caso, al hacer clic se abre el "panel de propiedades de contacto", como se observa en la figura 3.5. En este panel se puede ingresar la función de trabajo (Φ_m) del metal considerado como contacto o también se puede usar la opción de "flat bands", para esta opción el software calcula para cada temperatura la función de trabajo del metal de tal manera que prevalezcan las condiciones de banda plana en todo momento. Para esto se utiliza un algoritmo simplificado el cual es: Cuando la capa adyacente al contacto es de tipo n, se usa la ecuación (3.7), cuando es de tipo p, se usa la ecuación (3.8), cuando se puede considerar intrínseca, se usa la ecuación (3.9).

$$\Phi_m = x + KT \ln\left(\frac{N_C}{N_D - N_A}\right) \quad 3.7$$

$$\Phi_m = x + E_g - KT \ln\left(\frac{N_C}{N_A - N_D}\right) \quad 3.8$$

$$\Phi_m = x + KT \ln\left(\frac{N_C}{n_i}\right) \quad 3.9$$

Como puede verse en las ecuaciones anteriores, sólo se considera la densidad de dopaje superficial para calcular la función de trabajo del metal en el caso de banda plana. Sin embargo, cuando hay una densidad considerable de defectos presentes cerca del contacto, es posible que, al colocar la opción de “flat bands” no se obtenga una condición de bandas planas en la simulación. En versiones recientes del software SCAPS (posteriores al 1-1-2014), se considera la densidad de defectos profundos; un algoritmo que implica la solución de una ecuación algebraica no lineal (que expresa que la carga total = cero) reemplaza las ecuaciones simples 3.7 a 3.9. Cuando la capa al lado del contacto es de tipo n o p (no intrínseca), se calcula y muestra en el panel de propiedades del contacto un nuevo cálculo de la altura de la barrera con respecto al nivel de Fermi y la banda de conducción/valencia. Sin embargo, estos valores sólo son indicativos para el usuario ya que no se utilizan en la simulación.

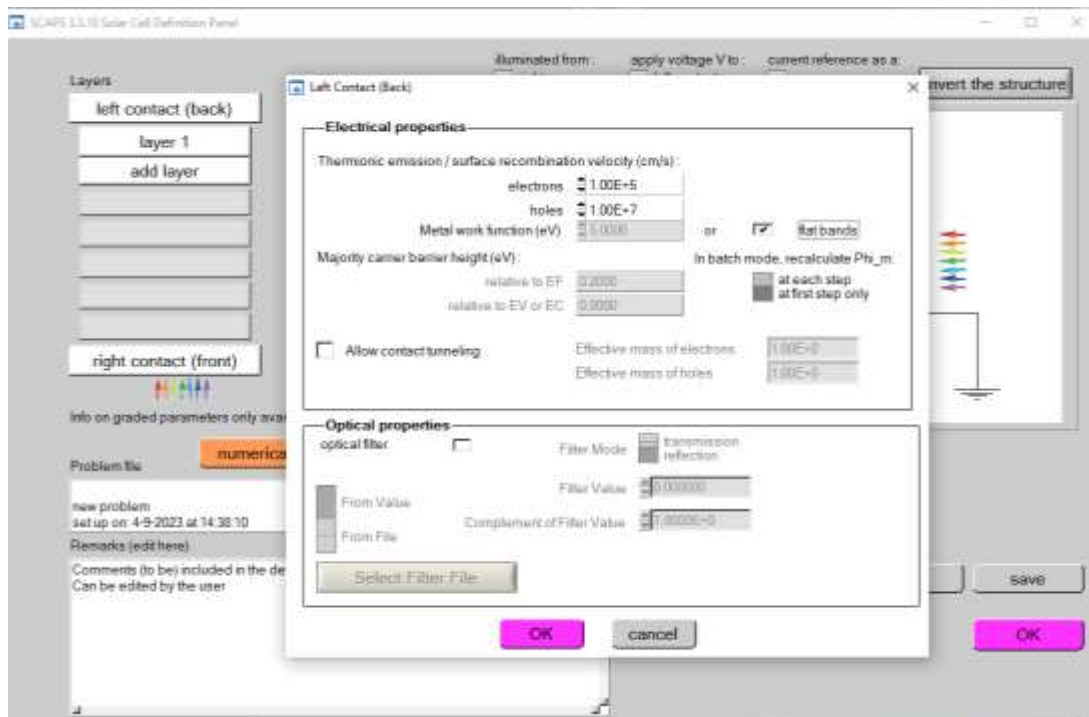


Figura 3.5. Panel de propiedades de contacto.

En la figura 3.2 se observa que este panel también permite definir tanto el lado de iluminación y a través de que contacto se aplica el voltaje (derecho o izquierdo).

Permite generar una estructura nueva (new), cargar una estructura hecha anteriormente (load) o guardar cambios en la estructura actual (save).

3.3.2 La constante de absorción óptica (α) de una capa

Como se había mencionado anteriormente, al hacer clic en “add layer”, se despliega un panel donde se pueden agregar parámetros físicos de las capas que componen el modelo de nuestra celda solar. Uno de esos parámetros que se puede introducir es el coeficiente de absorción óptica (α), el cual se puede introducir a través de dos formas: desde un archivo (from file) y desde el modelo (from model) [66].

Constante de absorción óptica from file: Los archivos de absorción del software SCAPS 1-D son archivos ASCII (archivos de texto simples) con la extensión '*.abs' y se encuentran de forma predeterminada en el subdirectorio SCAPS\absorción. Estos archivos se componen de una línea con al menos dos valores numéricos, el primer valor se interpreta como la longitud de onda (en nm) y el segundo como α (en 1/m). Una biblioteca de archivos de absorción está presente en el paquete de instalación de SCAPS 1-D.

Además de los datos de absorción de materiales reales, también el software ofrece un conjunto de archivos que se pueden utilizar en trabajos de modelado más orientados a la teoría. Sin embargo, SCAPS 1-D permite al usuario crear sus propios archivos de absorción (.abs) de datos experimentales. A través de datos de absorción o transmitancia en función de la longitud de onda se puede calcular el coeficiente de absorción (en unidades de 1/m) y de ahí crear un archivo de texto con la extensión abs, para ser usado como modelo de absorción para la capa respectiva, como se puede observar en la figura 3.6.



Figura 3.6. Ejemplo de archivo. abs con datos de absorción para usarse en SCAPS 1-D.

Constante de absorción óptica from model (SCAPS $\geq$ 3.3.07): Al usar la opción from model, el botón Set absorption model se encuentra activo, el cual, al activarlo despliega el panel Absorption Model Setup (Fig. 3.7). El título de este panel mostrará el band gap de la capa, así como el tipo de semiconductor (n o p). Los 6 modelos de absorción de SCAPS desde “back ground” hasta “sub-Eg tail” se muestran en una línea debajo del gráfico. Al cambiar el valor de un parámetro se calcula una nueva curva $\alpha(\lambda)$ o $\alpha(h\nu)$ y se agrega a la gráfica. Siempre debe haber al menos un submodelo de absorción activo. Cuando el usuario intenta desactivar la casilla en todos los submodelos en la interfaz de usuario de SCAPS, el modelo back ground será el considerado y será activado por el software.

El modelo “Eg-step” se usa principalmente para modelos completamente teóricos. Proporciona un α constante “ α_c ” por encima de la banda prohibida, por lo tanto, $h\nu > E_g$ o $\lambda < \lambda_g$, y un α con valor de cero al estar por debajo de la banda prohibida.

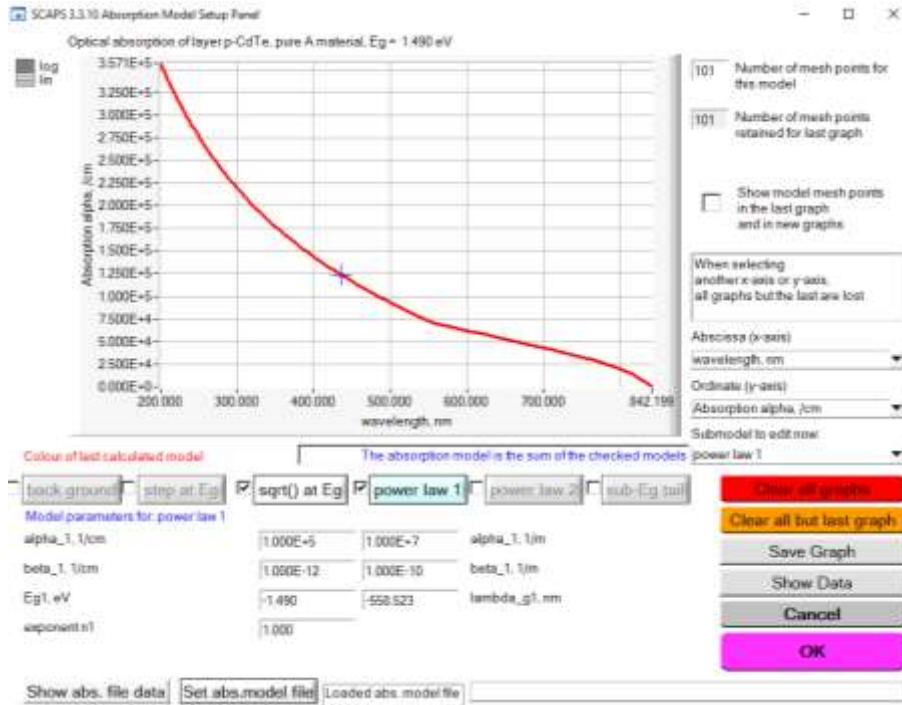


Figura 3.7. Panel Absorption Model Setup de SCAPS 1-D.

Los dos modelos de potencia, denominados 'power1' y 'power2', exhiben una considerable versatilidad en la capacidad de modelar el comportamiento $\alpha(h\nu)$ o $\alpha(\lambda)$ de una capa. Hay 4 parámetros por 'modelo de potencia': α_1 , β_1 , E_{g1} , y n_1 , (y similares para la potencia 2, con índice 2). Cuando E_{g1} o E_{g2} son positivos, deben entenderse como un parámetro fijo: es decir, no están relacionados con la banda prohibida real (E_g) de la capa/material la cual se introdujo al agregar la capa o material, por lo que cuando se varía E_g (por lotes, script o de manera manual), el parámetro E_{g1} o E_{g2} se mantiene con un valor constante o fijo.

Cuando E_{g1} o E_{g2} se introducen con un valor negativo, deben entenderse como una "banda prohibida relativa", o un múltiplo del E_g real: su valor se sustituye internamente por $|E_{g1}| \times E_g$. Cuando se varía E_g (por lotes o script o de manera manual), los parámetros internos E_{g1} o E_{g2} cambiarán según se modifique E_g . El modelo de absorción completo SCAPS 1-D para versiones $\geq 3.3.07$ está descrito por las siguientes ecuaciones:

$\alpha(h\nu)=$	α_{bg}	back ground	α constante
$\alpha_c \cdot u(h\nu - E_g)$		E_g -step	α_c si $h\nu > E_g$, 0 si $h\nu < E_g$
$\left(\alpha_0 + \beta_0 \frac{E_g}{h\nu}\right) \sqrt{\frac{h\nu}{E_g} - 1}$		E_g -sqrt	0 si $h\nu < E_g$
$\left(\alpha_1 + \beta_1 \frac{E_{g1}}{h\nu}\right) \left(\frac{h\nu}{E_{g1}} - 1\right)^{n_1}$		power 1	0 si $h\nu < E_{g1}$
$\left(\alpha_2 + \beta_2 \frac{E_{g2}}{h\nu}\right) \left(\frac{h\nu}{E_{g2}} - 1\right)^{n_2}$		power 2	0 si $h\nu < E_{g2}$
$\approx \exp\left(-\frac{E_g - h\nu}{E_0}\right)$		sub-bandgap	Inherente a otros mecanismos

El nuevo modelo de absorción de SCAPS incluirá dos leyes agrupadas en una ley de absorción la cual corresponde al modelo power 1($i = 1$) y 2 ($i = 2$).

$$\alpha(h\nu) = \left(\alpha_i + \beta_i \frac{E_i}{h\nu}\right) \left(\frac{h\nu}{E_{gi}} - 1\right)^{n_i} \quad (3.10)$$

El modelo E_g -sqrt corresponde a la ley de potencia de la ecuación 3.10 pero con exponente $n=1/2$. Las constantes del modelo α_0 y β_0 tienen la dimensión de la constante de absorción (por ejemplo, 1/cm) y están relacionadas con las constantes del modelo tradicional A y B dadas por:

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= A \sqrt{E_g} & A &= \frac{\alpha_0}{\sqrt{E_g}} \\ \beta_0 &= \frac{B}{\sqrt{E_g}} & B &= \beta_0 \sqrt{E_g} \end{aligned}$$

Los modelos Tauc de la ecuación 3.11 y modelos Tauc generalizados de la ecuación 3.10 tienen un significado físico: están relacionados con una propiedad del diagrama de bandas de energía $E(k)$ del semiconductor (banda prohibida directa o indirecta) y con la naturaleza de la excitación de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción tras la absorción de un fotón (transición permitida o prohibida).

$$\alpha(h\nu) = \beta_0 \frac{E_g}{h\nu} \left(\frac{h\nu}{E_g} - 1 \right)^n \quad (3.11)$$

Los valores para el exponente n que son válidos para los distintos mecanismos de excitación se enumeran en la tabla 3.1.

Tabla 3.1 Valores del exponente n para los mecanismos de excitación física.

Mecanismo de excitación	Valor n
banda prohibida directa, transición permitida	1/2
banda prohibida directa, transición prohibida	3/2
banda prohibida indirecta, transición permitida	2
banda prohibida indirecta, transición prohibida	3

CAPÍTULO 4

Resultados de simulación de la celda solar de heterounión AZO/CdTe

4.1 Simulación de la heterounión AZO/CdTe

En esta sección se describe el proceso por el cual se define la heterounión AZO/CdTe en el programa SCAPS-1D, así como los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas. En dichas simulaciones, la concentración de portadores y espesores tanto de la capa n y p, temperatura de operación, así como resistencias en serie y paralelo se fueron modificando para estudiar el comportamiento de la heteroestructura y optimizar la celda solar formada por la heterounión AZO/CdTe.

La estructura de la celda solar (Al/AZO/CdTe/NiO/Ni) simulada se puede observar esquemáticamente en la figura 4.1, donde la capa tipo n de óxido de zinc dopado con aluminio (AZO) se utiliza como capa ventana, la capa tipo p de CdTe es la capa absorbente, la capa p de óxido de níquel (NiO) se ha introducido como una capa transportadora de huecos (HTL), el aluminio (Al) se incorpora como contacto frontal y el níquel (Ni) se utiliza como contacto trasero.

El uso en la estructura de una capa HTL o capa p+ entre el contacto trasero y la capa absorbente es debido a que el CdTe tiene una alta función de trabajo (~5.5 eV) como se puede observar en el diagrama de bandas (Fig. 4.2) y para lograr un contacto óhmico con el contacto trasero se necesita un metal con una función de trabajo mayor a la del CdTe. Debido a que pocos materiales cuentan con una función de trabajo tan elevada y en casos como el platino cuya función es ~5.6 eV, donde el costo de este metal hace poco viable su uso como contacto en una celda solar, por lo cual es necesario buscar alternativas para lograr contactos óhmicos en celdas solares basadas en CdTe. Al incorporar una capa p+ entre el contacto trasero y la capa absorbente, tendremos un exceso de concentración de huecos, disminuyendo así la resistencia al flujo de los electrones desde el contacto trasero

hacia la capa p o capa absorbente, logrando un contacto de baja resistencia o contacto óhmico sin la necesidad de usar un metal con una elevada función de trabajo.

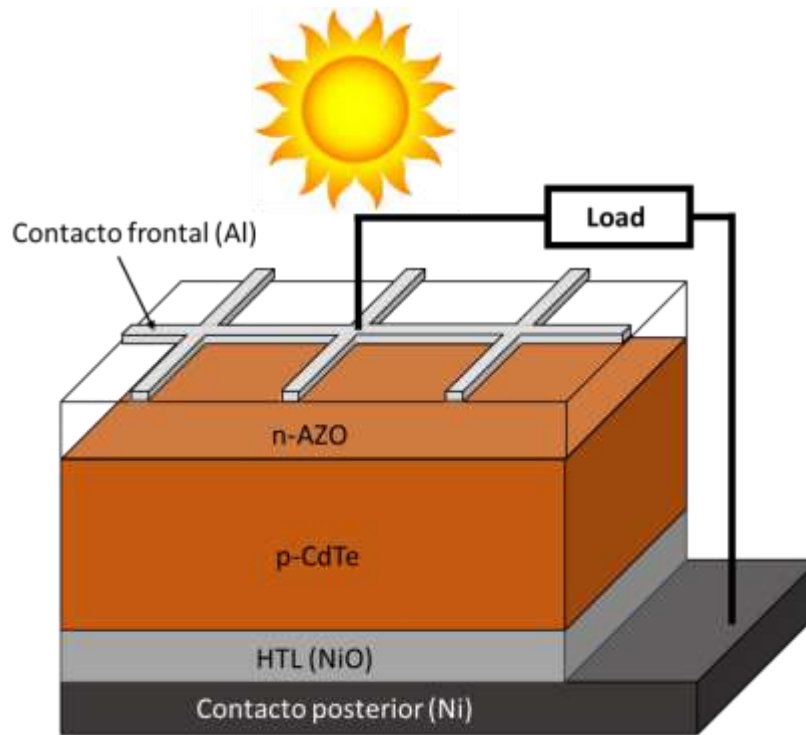


Figura 4.1. Representación esquemática de la estructura Al/AZO/CdTe/NiO/Ni simulada.

4.1.1 Diagrama de bandas de la heterounión AZO/CdTe

Se realizó el diagrama de bandas de la estructura simulada a través de las fórmulas correspondientes [49], comprándolo también con los valores obtenidos de SCAPS-1D.

Debido a las condiciones de la heterounión presente tenemos una unión pN escalonada, donde la letra mayúscula indica que el material de banda prohibida más grande [49]. El diagrama de bandas se construyó considerando al nivel de vacío como referencia como se observa en la figura 4.2, y usando esta figura como referencia se usan las ecuaciones 2.1, 2.2 y 4.1. Donde ϕ_{sp} y ϕ_{sn} son las funciones de trabajo del semiconductor tipo p (CdTe) y el semiconductor tipo n (AZO) respectivamente.

$$V_{bi} = \phi_{sp} - \phi_{sn} \quad 4.1$$

La diferencia entre las bandas de conducción (ΔEc) y bandas de valencia (ΔEv) es de 0.22 y 2.1 eV respectivamente. La barrera de potencial (V_{bi}) es de 0.94 V. Se calculo también la región de carga espacial o región de agotamiento (W), tanto para la región n (x_n) y p (x_p) con las ecuaciones 2.11 a 2.13 respectivamente, obteniendo un espesor de la zona de agotamiento en la región n de 9.83 nm, para la región p de 983 nm por lo que el espesor de la región de carga espacial total es de 992 nm.

También se calculó la barrera de potencial presente tanto en la región n ($V_{bin} = 0.0097 V$) como en la región p ($V_{bip} = 0.9292 V$) a través de las ecuaciones 2.10b y 2.10a respectivamente, cuya suma es el valor de la barrera de potencial total (Ec. 2.7) obteniendo un V_{bi} de 0.9389 V que coincide con el valor obtenido a través de la ecuación 4.1. Por otro lado, para la interfaz NiO/CdTe se tiene un ΔEc de 2.28 eV y un ΔEv de 0.51 eV, los cuales se calcularon a través de las fórmulas 2.1 y 2.2 respectivamente.

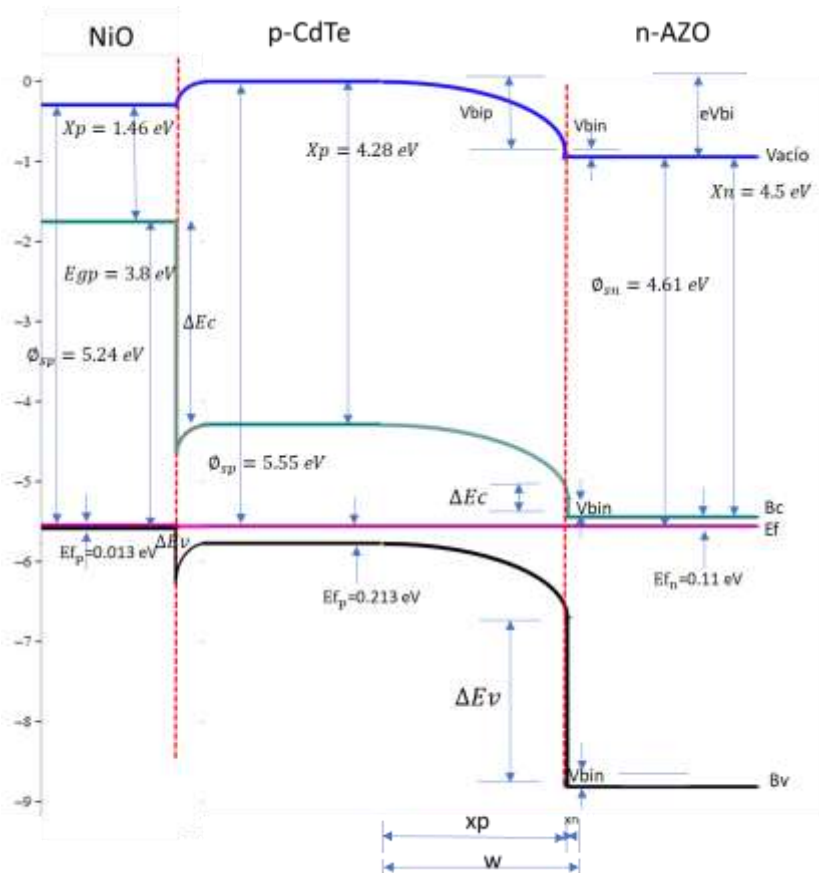


Figura 4.2. Diagrama de bandas de la heteroestructura NiO/CdTe/AZO.

4.1.2 Parámetros de simulación de la heterounión AZO/CdTe

En la sección definición del problema o “Set problem” se introducen las propiedades físicas de las diferentes capas del dispositivo, se pueden definir hasta 7 capas de semiconductores, las interfaces entre ellas y los contactos a utilizar, lo que nos permite configurar los parámetros físicos de las diferentes capas que conforman la estructura de la celda solar.

En la figura 4.3 se muestra esta interfaz ya con los parámetros de la heterounión estudiada en este capítulo de la tesis donde se puede observar, en la capa color rojo de la derecha la capa p (CdTe), en la capa roja de la izquierda la capa HTL de NiO, la capa n (AZO) en azul, contactos trasero y frontal, así como el punto de iluminación, simulándose con $T=300\text{K}$ a 1 sol ($\text{AM1.5G } 1000 \text{ W/M}^2$).

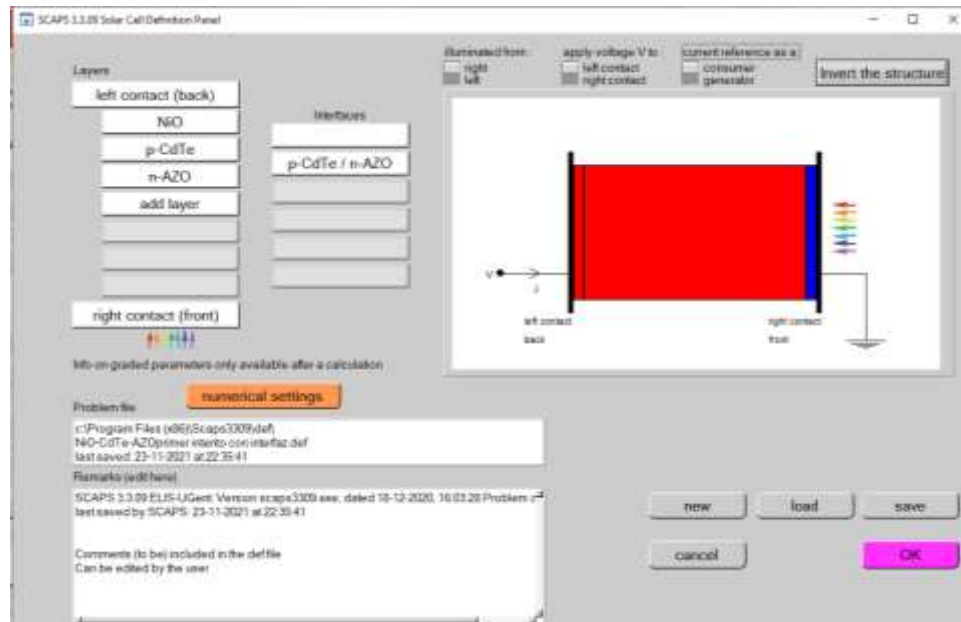


Figura 4.3. Panel de definición de celdas solares de SCAPS-1D para la estructura Al/AZO/CdTe/NiO/Ni

El proceso de simulación comienza ingresando algunos parámetros físicos en el panel de configuración de las capas (figura 4.4), tales como espesor, banda prohibida (E_g), Afinidades electrónicas (X), permitividad relativa ϵ_r , densidad de estados (N_c , N_v), movilidad del portador (μ), defectos cristalinos del material, entre otros.

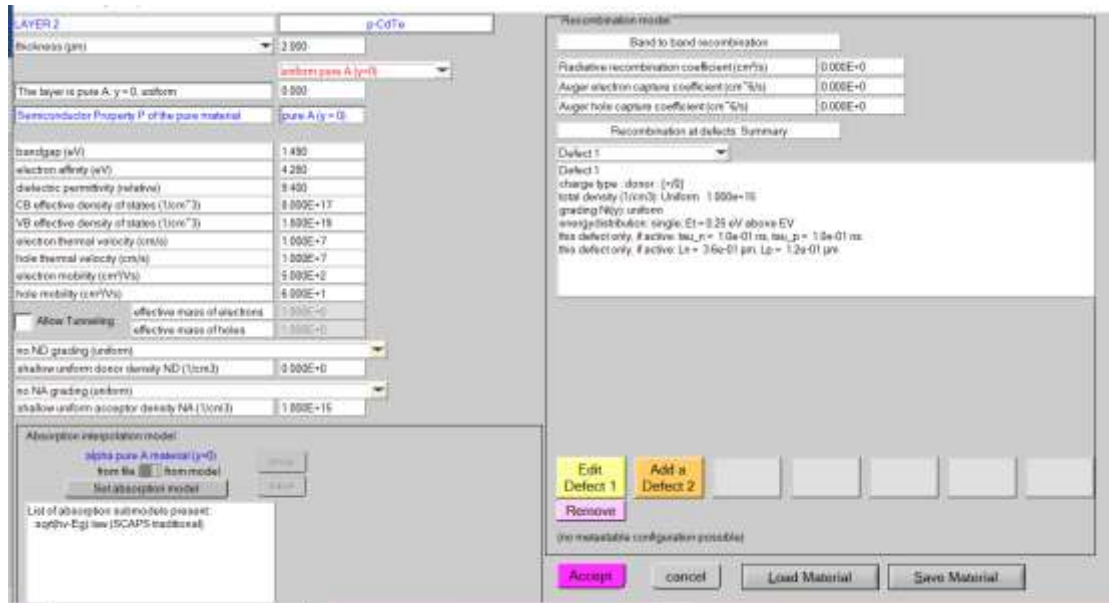


Figura 4.4. Panel de propiedades de las capas.

Estos parámetros de entrada se muestran en las Tabla 4.1 y 4.2, los cuales se seleccionaron principalmente en función de valores reportados en la literatura o se estimaron en rangos razonables.

Tabla 4.1. Parámetros usados para simular la estructura (Al/AZO/CdTe/NiO/Ni).

Parámetros	CdTe [3,22,67-69]	AZO [10,40,59,69,70]	NiO [22,71,83]
Espesor (μm)	0.5-6	0.01-0.4	0.020-0.1
Bandgap, E_g (eV)	1.49	3.37	3.8
Afinidad electrónica, χ (eV)	4.28	4.5	1.46
Permitividad relativa, ϵ_r	9.4	9	10
Densidad efectiva de estados BC, N_c (cm^{-3})	8×10^{17}	2.22×10^{18}	2.8×10^{19}
Densidad efectiva de estados VB, N_v (cm^{-3})	1.8×10^{19}	1.9×10^{19}	1×10^{19}
Movilidad de electrones, μ_n (cm^2/Vs)	500	100	12
Movilidad de huecos, μ_p (cm^2/Vs)	60	25	2.8
Velocidad térmica de electrones (cm/s)	10^7	10^7	10^7
Velocidad térmica de huecos (cm/s)	10^7	10^7	10^7
Concentración de donadores, N_D (cm^{-3})	0	$10^{15} - 10^{18}$	0
Concentración de aceptores, N_A (cm^{-3})	$10^{13} - 10^{17}$	0	$10^{15} - 10^{19}$
Densidad de defectos, N_t ($1/\text{cm}^3$)	10^{15}	10^{17}	10^{14}
Tipo de defectos	aceptor	donador	aceptor

Tabla 4.2. Parámetros de simulación para interfaz y contactos

<i>Densidad de defectos en la interfaz</i> [71]	
AZO/CdTe	10^{12} cm^{-2}
Tipo de defecto	aceptor
Sección transversal de captura de electrones/huecos	10^{-10} cm^{-2}
<i>Propiedades eléctricas del contacto trasero</i> [72, 73]	
Función de trabajo del Ni	5.15 eV
Velocidad de recombinación superficial de electrones	10^5 cm/s
Velocidad de recombinación superficial de huecos	10^7 cm/s
<i>Propiedades eléctricas del contacto frontal</i> [72, 73]	
Función de trabajo del Al	4.2 eV
Velocidad de recombinación superficial de electrones	10^7 cm/s
Velocidad de recombinación superficial de huecos	10^5 cm/s

4.2 Resultados de las Simulaciones de la heterounión AZO/CdTe

Después de definir los parámetros físicos de todas las capas se analizó el efecto de ciertos parámetros en específico sobre el rendimiento del dispositivo fotovoltaico. Estos parámetros físicos son los espesores y concentración de portadores de las capas n y p, la temperatura de funcionamiento y la resistencia en serie y paralelo.

Las simulaciones consistieron en dejar todos los parámetros fijos a excepción de uno, el cual, se fue variando para conocer su efecto dentro del rendimiento teórico de la celda, y así poder estudiar por ejemplo como afecta el espesor de las capas tanto n y p al comportamiento de la misma. Los parámetros de salida analizados fueron voltaje de circuito abierto (V_{oc}), densidad de corriente de corto circuito (J_{sc}), Factor de llenado, eficiencia (PCE) y eficiencia cuántica (QE).

Las condiciones de trabajo con las que se llevaron a cabo las simulaciones fueron las siguientes: iluminación estándar AM 1,5 G y una temperatura de 300 K, excepto en el apartado donde se analiza el efecto de la temperatura. Se utilizó una malla (discretización) predeterminada de 51 puntos con un tamaño de paso de 0,02 V para el análisis I-V.

4.2.1 Efecto del espesor de la capa absorbente CdTe

En esta sección se describe el estudio del efecto del espesor de la capa absorbente sobre los parámetros característicos de las celdas solares. Se varió el espesor de la capa CdTe de 0.5 a 6 μm con una concentración de portadores (N_A) de 10^{15} cm^{-3} y se calculó el efecto sobre los parámetros de salida (V_{oc} , J_{sc} , PCE, FF y QE). El rango de espesores de la capa CdTe se determinó con base a lo reportado en trabajos de simulación y experimentales. La capa AZO se mantuvo con un espesor de 10 nm, una densidad de portadores (N_D) de 10^{17} cm^{-3} , la capa de NiO se simuló usando un espesor de 20 nm y una concentración de portadores (N_A) de 10^{19} cm^{-3} , se usó como contacto trasero níquel con una función de trabajo de 5.15 eV y contacto frontal aluminio con una función de trabajo de 4.2 eV.

La Figura 4.5a muestra que el rendimiento del dispositivo tiene un comportamiento similar cuando el espesor de la capa absorbente está entre 2 y 6 μm . La Figura 4.5b muestra que la eficiencia cuántica más baja se obtiene con un espesor de 0.5 μm , especialmente en el rango de longitud de onda de 550 a 800 nm, esto se debe a una mayor transmisión de luz para espesores inferiores a 1 μm [3]. La eficiencia cuántica mejoró con mayores espesores de CdTe, obteniendo un 88-93% QE en el rango de longitud de onda de 500-730 nm para espesores superiores a 2 μm debido a que, para estos espesores, el CdTe puede absorber ~99% de la luz en ese rango de longitud de onda [3, 53].

Se observa en la figura 4.6a que V_{oc} tiene una pequeña disminución de 0.017 V cuando aumenta el espesor de CdTe, pasando de 0.747 V a 0.730 V para los espesores de 0.5 μm a 2 μm respectivamente, debido a que al tener solo 0.5 μm de espesor, la región de carga espacial abarcará en su totalidad el espesor del CdTe, por lo cual, al absorber los fotones incidentes en esta capa habrá una menor probabilidad de recombinación de los portadores fotogenerados, generando una mayor separación de cargas. Sin embargo, cuando el espesor del CdTe excede 1 μm el espesor habrá una mayor probabilidad de recombinación de los portadores fotogenerados, dado el espesor de W (992 nm). V_{oc} permanece constante cuando el espesor de la capa de CdTe es de 2 a 6 μm , debido a que J_{sc} permanece

constante (Fig. 4.6b) y la densidad de corriente de saturación (J_0) no está en función del espesor (Ec. 4.2) [62], como se puede observar en la ecuación 2.22.

$$J_0 = \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} + \frac{qD_n n_{p0}}{L_n} \quad 4.2$$

Donde L_n y L_p son las longitudes de difusión de electrones y huecos respectivamente. D_n y D_p son los coeficientes de difusión de electrones y huecos y n_{p0} y p_{n0} son la concentración de electrones y huecos en equilibrio en el lado n y p respectivamente.

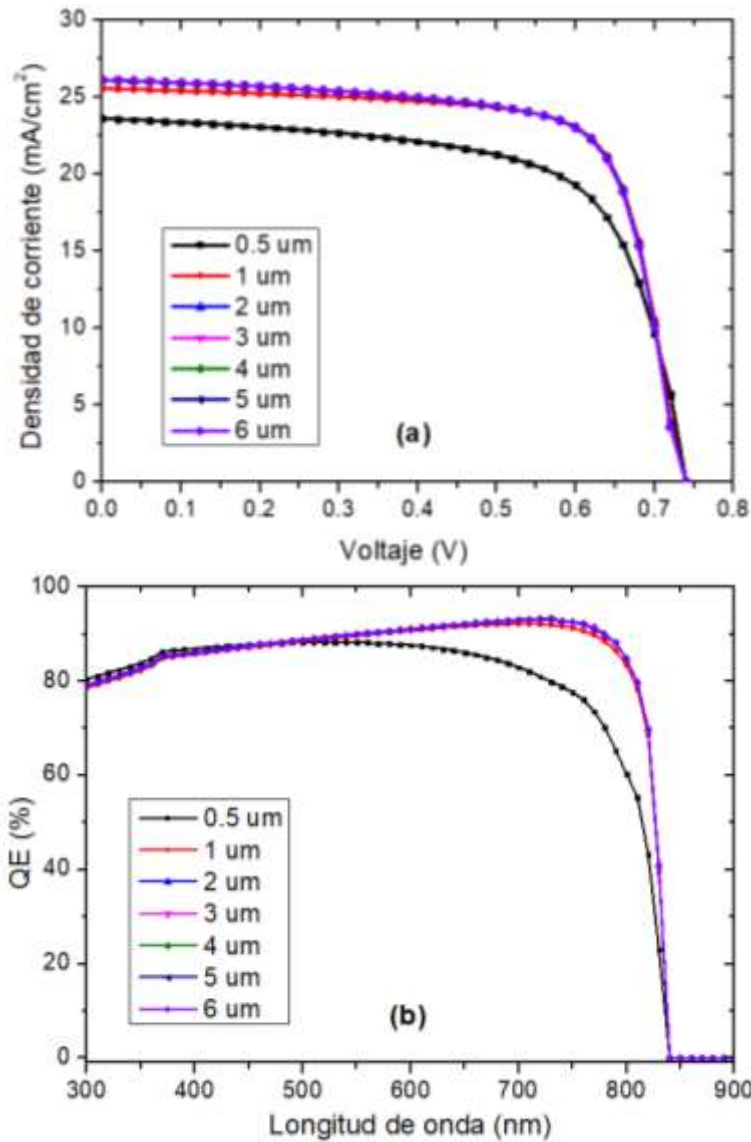


Figura 4.5. (a) curvas JV (b) eficiencia cuántica (QE) para diferentes espesores de la capa absorbente CdTe.

En la figura 4.6b se observa que el valor más bajo de J_{sc} es 23.62 mA/cm² a un espesor de 0.5 μ m. La razón de este comportamiento es la menor tasa de generación de huecos y electrones (Fig. 4.5b) especialmente en el rango de longitud de onda de 500 a 800 nm debido al grosor del CdTe. La J_{sc} aumenta a medida que aumenta el espesor de CdTe, alcanzando un valor máximo de 26.13 mA/cm² para 2 μ m de espesor. Esto se debe a una mayor absorción en películas más gruesas [3, 74] ya que la probabilidad de que los fotones sean absorbidos es mayor debido al camino óptico más largo. Para espesores de 2 a 6 μ m, el valor de J_{sc} se mantiene prácticamente constante debido a que probablemente la razón de recombinación de portadores es similar a la razón de generación de pares e-h, lo que conduce a la saturación de J_{sc} cuando aumenta el espesor de CdTe [75].

El comportamiento de FF se muestra en la figura 4.6c, donde aumenta de 65.58 a 74.31% cuando el espesor de CdTe aumenta de 0.5 a 1 μ m, esto se debe a que la potencia máxima del dispositivo incrementa por el incremento de J_{sc} (Ec. 2.20 y 2.27) debido a una mayor generación de pares e-h por el incremento del espesor. Sin embargo, disminuye a 72.62% cuando se aumenta el espesor de la capa de CdTe a 2 μ m, debido a que V_{max} decrece por la disminución de V_{oc} y J_{sc} incrementa (Ec. 2.20 y 4.3). Dado el comportamiento de V_{oc} y J_{sc} , FF se mantiene constante a partir de 2 μ m de espesor de la capa CdTe.

$$V_{max} = V_{oc} - \frac{KT}{q} \ln\left(1 + \frac{qV_{oc}}{KT}\right) \quad 4.3$$

En la figura 4.6d se observa que PCE tiene su valor mínimo de 11.58 % para un espesor de CdTe de 0,5 μ m. aumentando a 13.9% a un espesor de 1 μ m de CdTe debido al exceso de pares electrón-hueco generado por el mayor grado de absorción de la capa de CdTe dado por su espesor. Sin embargo, se tiene una pequeña disminución de 0.07%, al incrementar el espesor a más de 1 μ m obteniendo una eficiencia de 13.83%, manteniendo este valor constante al aumentar el espesor de la capa de CdTe de 1 a 6 μ m, ya que en este rango de espesores J_{sc} , V_{oc} y FF tienen un comportamiento constante (Ec. 2.30).

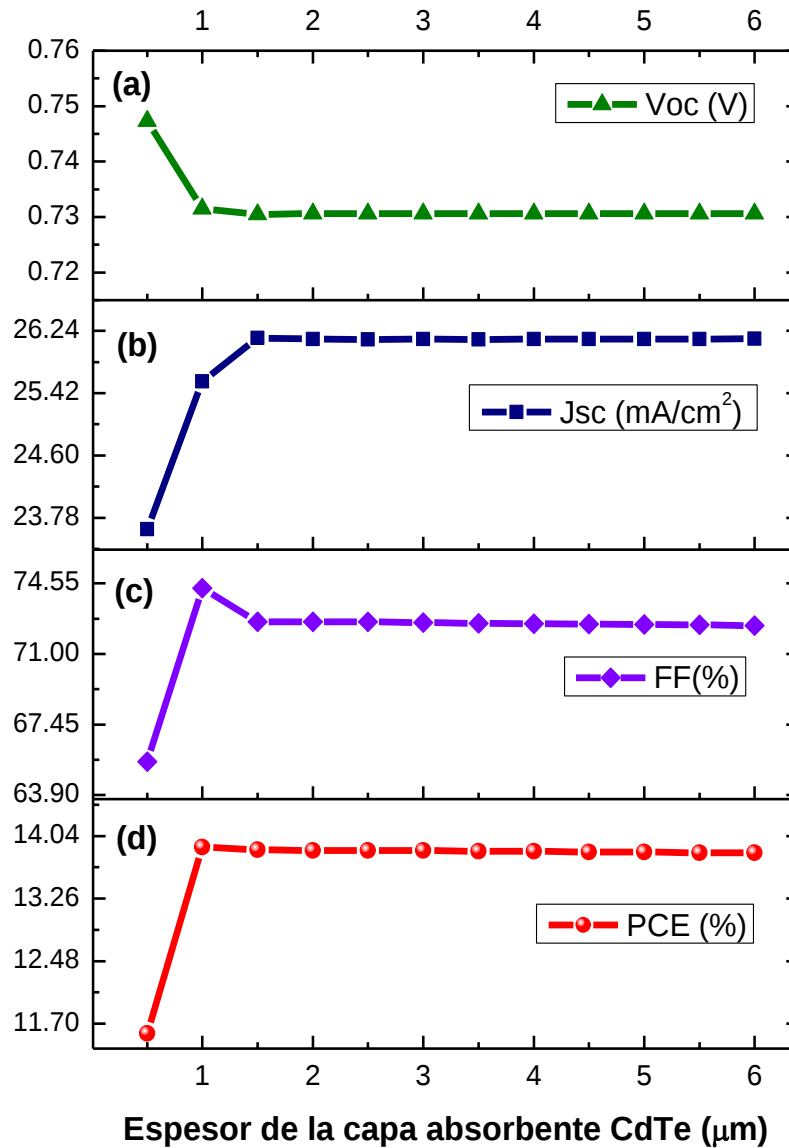


Figura 4.6. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa absorbente CdTe.

Después de analizar los resultados anteriores, se puede considerar un espesor de 2 μm , como el óptimo para la celda solar, ya que con espesores mayores se obtendrá la misma eficiencia.

4.2.2 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la capa absorbente CdTe

Para comprender el efecto de la concentración de portadores aceptores en la capa absorbente sobre el rendimiento del dispositivo, N_A se varió de 10^{13} a 10^{17} cm^{-3} . Este rango de concentración de portadores se determinó considerando los reportado teórica y experimentalmente, considerando como limite la concentración máxima de impurezas aceptoras reportadas [27,97]. El espesor de la capa CdTe se mantuvo en $2 \mu\text{m}$, la capa AZO se mantuvo con un espesor de 10 nm y una densidad de portadores de 10^{17} cm^{-3} , la capa de NiO se simulo usando un espesor de 20 nm y una concentración de portadores de 10^{19} cm^{-3} .

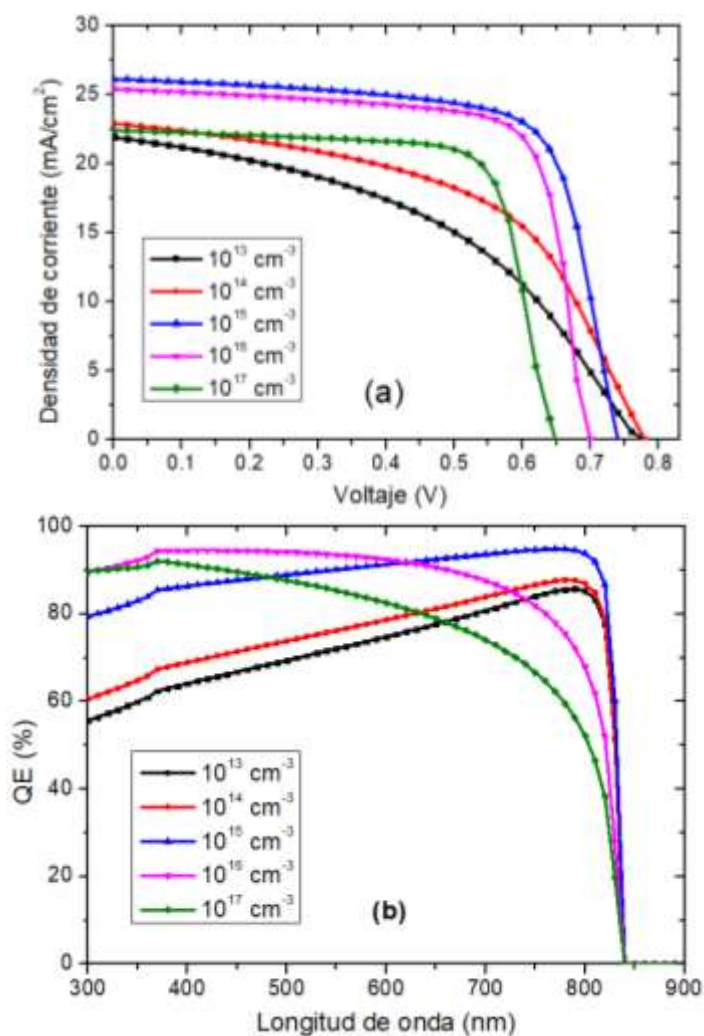


Figura 4.7. (a) curvas JV (b) eficiencia cuántica (QE) para diferentes concentraciones de portadores (N_A) en la capa absorbente CdTe.

Las curvas características J-V para diferentes concentraciones de portadores aceptores en la capa absorbente se presentan en la figura 4.7a, y se puede ver que la mejor respuesta se encuentra con $N_A=10^{15}\text{cm}^{-3}$. En la figura 4.7b se observa que la menor eficiencia cuántica se obtiene a un valor de $N_A=10^{13}\text{cm}^{-3}$ especialmente en longitudes de onda más cortas, también se observa que la eficiencia cuántica mejora a medida que aumentamos la concentración de portadores, tal que, a una concentración de $N_A=10^{15}\text{cm}^{-3}$ se logra el mejor desempeño con una eficiencia cuántica de 90-80% en el rango de longitud de onda de 300-550 nm y 90-95% de eficiencia en el rango de longitud de onda de 550-810 nm, sin embargo, al incrementar N_A , la eficiencia cuántica decae. Este comportamiento se puede atribuir al desplazamiento de la zona de agotamiento hacia la región p, provocado por la menor concentración de portadores en la capa absorbente (región p), lo que implica que gran parte de los pares electrón-hueco fotogenerados en la región n (capa AZO, que tiene una banda prohibida más ancha) no puedan ser separados por el campo eléctrico de la zona de agotamiento, por lo que se recombinarán y no contribuirán a la fotocorriente, y a medida que aumente la concentración de portadores, la zona de agotamiento se moverá más y más hacia la región n, lo que hace que se separen más pares electrón-hueco generados en esta región, contribuyendo así a la corriente fotogenerada.

En la figura 4.8a se observa el comportamiento de V_{oc} , el cual disminuye de 0.792 V a 0.622 V, debido a que la movilidad del portador disminuye al incrementar N_A [76], reduciendo así la longitud de difusión y n_{p0} , consecuentemente la corriente de saturación aumenta (Ec. 4.2) y V_{oc} disminuye (Ec.2.22).

En la figura 4.8b se observa que J_{sc} incrementa de 21.24 a 26.13 mA/cm^2 al pasar de un N_A de 10^{13} a 10^{15}cm^{-3} , ya que el aumento de la concentración de N_A en la capa absorbente de CdTe mejora la extracción del portador en el contacto trasero, sin embargo, al aumentar N_A hasta 10^{17}cm^{-3} , J_{sc} decae hasta 22.41 mA/cm^2 , esto se debe a que el nivel de fermi de los huecos disminuye, aumentando la barrera de potencial, dificultando el flujo de portadores.

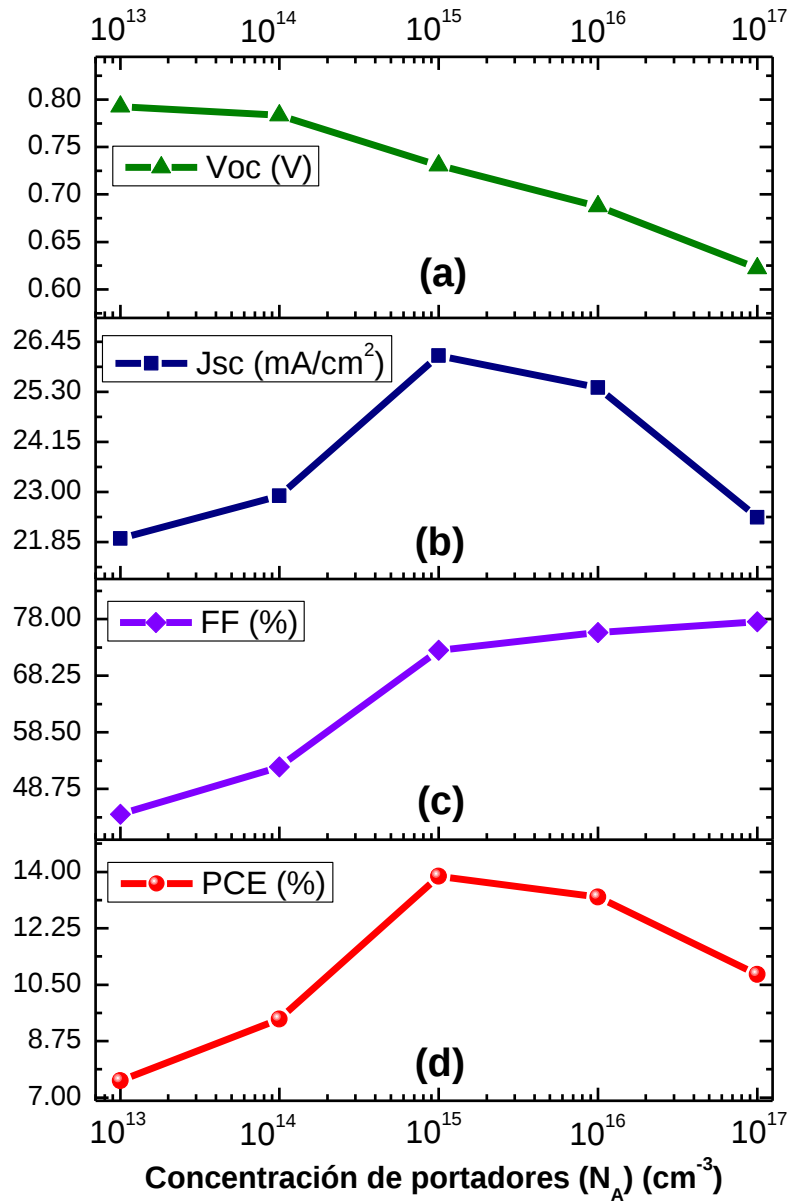


Figura 4.8. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa absorbente CdTe.

El comportamiento del factor de llenado y la eficiencia se muestran en la figura 4.8c y 4.8d respectivamente, el FF aumenta al incrementar N_A . PCE aumenta de 7.52% a 13.83% cuando N_A aumenta de 10^{13} a 10^{15} cm^{-3} respectivamente debido al aumento en FF y J_{sc} (Ec. 2.30), sin embargo, cuando N_A sigue incrementando, la barrera de potencial aumenta y se reduce la movilidad de los portadores [76] de tal

manera que genera una baja en la eficiencia, disminuyendo a 10.82%. Por lo que se obtiene una máxima eficiencia a una concentración N_A de 10^{15} cm^{-3} en la capa CdTe.

4.2.3 Efecto del espesor de la capa ventana AZO

Para estudiar el efecto del espesor de la capa ventana AZO en el rendimiento del dispositivo, el espesor de esta capa se varió de 10 a 400 nm con una concentración de portadores fija de $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, mientras que el CdTe se simuló con un espesor de 2 μm , y una concentración de portadores de $N_A = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, la capa de NiO se simuló usando un espesor de 20 nm y una concentración de portadores de $N_A = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, como contacto trasero níquel y aluminio como contacto delantero.

En la figura 4.9a se observa que el mejor comportamiento se obtiene con un espesor de la capa AZO de 10 nm, mientras que para espesores de 100 a 400 nm se tiene un comportamiento prácticamente similar. La Figura 4.9b muestra que entre el rango de longitud de onda de 370-900 nm, QE tiene el mismo comportamiento para los diferentes espesores de capa de ventana AZO, ya que en este rango de longitud de onda la energía de los fotones incidentes es menor que la brecha de banda de la capa de ventana, además, el espesor de la capa absorbente, así como la concentración del aceptor se mantienen constantes. Sin embargo, en el rango de longitud de onda de 300-600 nm, se observa el efecto de absorción de la capa ventana debido a que los fotones incidentes en este rango de longitud de onda tienen una energía mayor que la banda prohibida de esta capa y el aumento de espesor favorece una mayor absorción parásita dentro de esta capa, ya que se transmiten menos fotones a la capa absorbente CdTe [67]. Debido a la absorción de la capa de la ventana, J_{sc} (Fig. 4.10b) tiene una pequeña reducción de 0.37 mA/cm^2 cuando el espesor de la capa de la ventana aumenta de 10 a 400 nm.

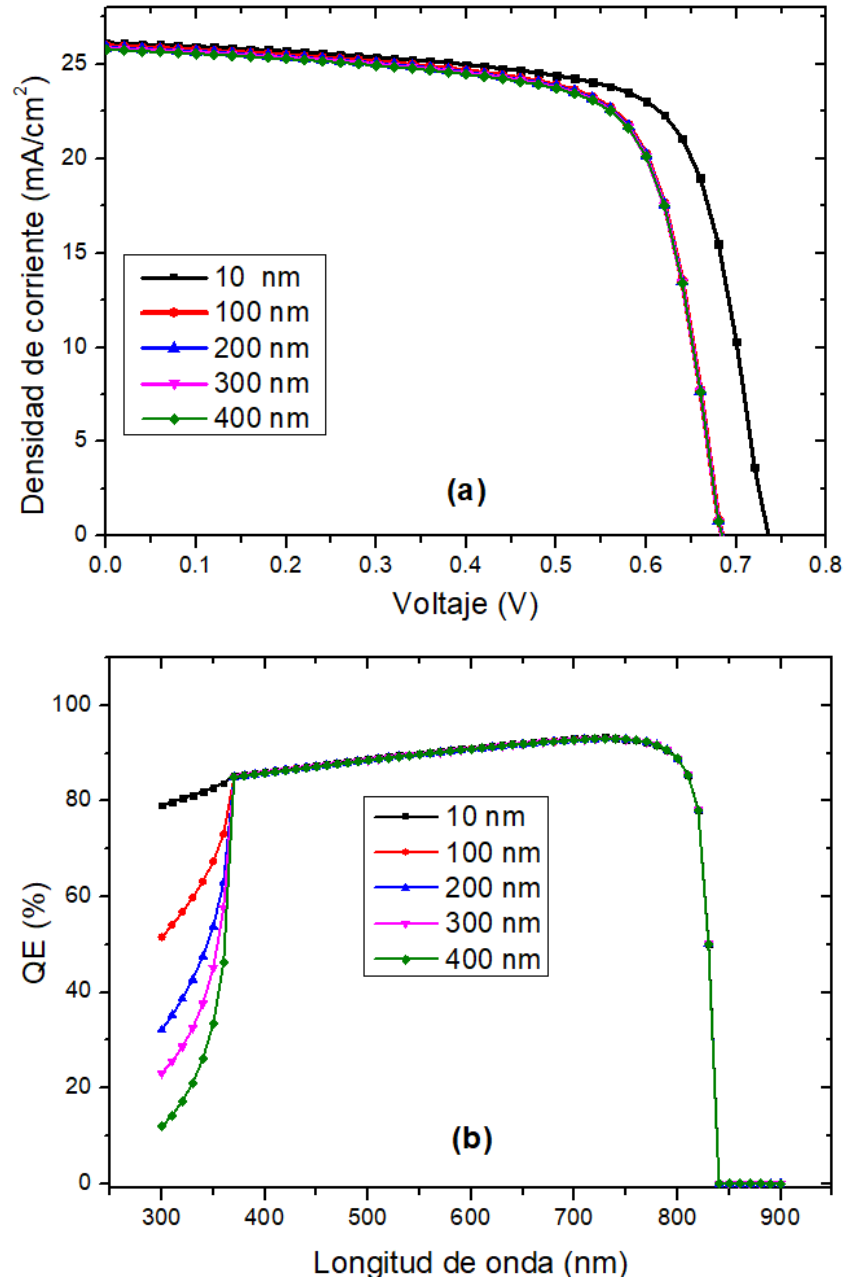


Figura 4.9. (a) curvas JV (b) eficiencia cuántica (QE) para diferentes espesores de la capa ventana AZO.

El aumento del espesor de la capa de la ventana AZO también reduce el V_{oc} (Fig. 4.10a), que alcanza su valor máximo de 0.73 V a 10 nm. El aumento del espesor de la capa ventana a 50 nm provoca una disminución de V_{oc} llegando a 0.68 V, y luego a partir de 50 nm V_{oc} tiene un valor prácticamente constante, ya que al aumentar el espesor de la capa AZO, los portadores separados por el campo eléctrico deben recorrer una distancia mayor para alcanzar el contacto frontal, superando la longitud

de difusión de los portadores (16 nm), favoreciendo así su recombinación y disminuyendo la separación de cargas. Ya que J_{sc} y V_{oc} disminuyen debido al aumento del espesor de la capa de la ventana y la potencia máxima de la celda cae ligeramente, FF y PCE también disminuyen como se muestra en la figura 4.10c y d respectivamente, estas disminuciones van del 72.68 % al 71.79 % y del 13.87 % al 12.62 %, respectivamente. Dado que para obtener la mayor eficiencia posible es necesario tener el menor espesor posible en la capa ventana, por lo que, el espesor óptimo para la capa AZO es de 10 nm.

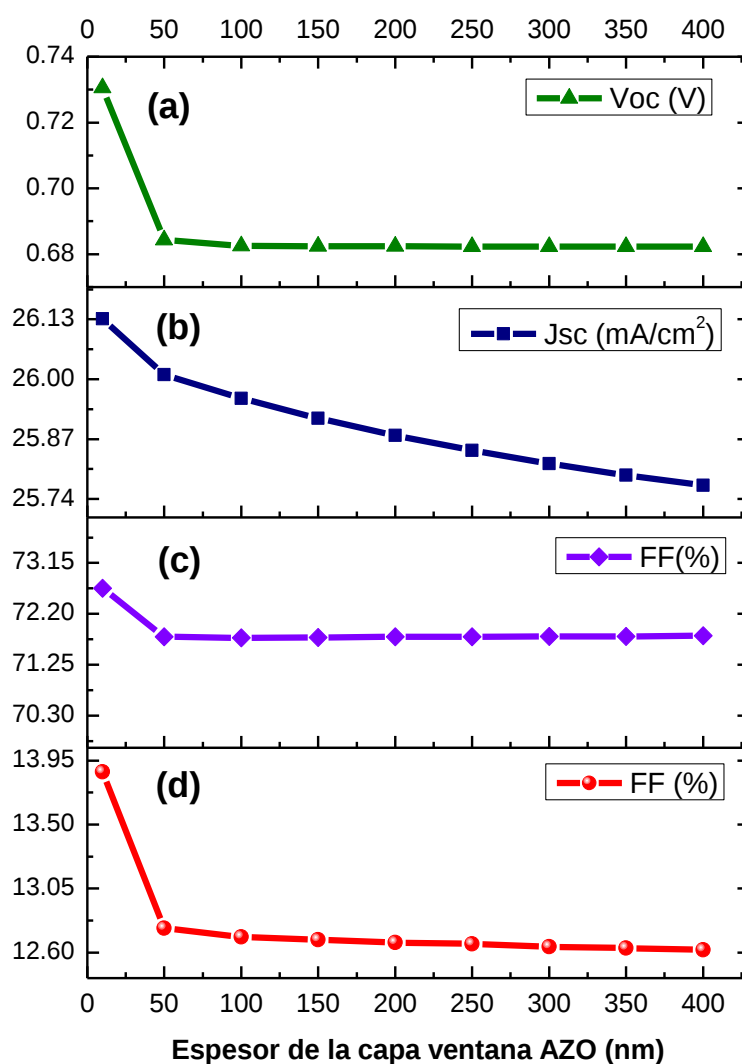


Figura 4.10. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa ventana AZO.

4.2.4 Efecto de la concentración de portadores N_D en la capa ventana AZO

El comportamiento de la celda solar cuándo se varía la concentración de portadores N_D de 10^{15} a 10^{18} cm^{-3} en la capa n (AZO) se muestra en las figuras 4.11 y 4.12, para esto se simuló la capa AZO con un espesor de 10 nm, el CdTe con un espesor de $2 \mu\text{m}$, y una concentración de portadores de 10^{15} cm^{-3} , la capa de NiO se simuló usando un espesor de 20 nm y una concentración de portadores de 10^{19} cm^{-3} , y como contactos los mencionados en las secciones anteriores.

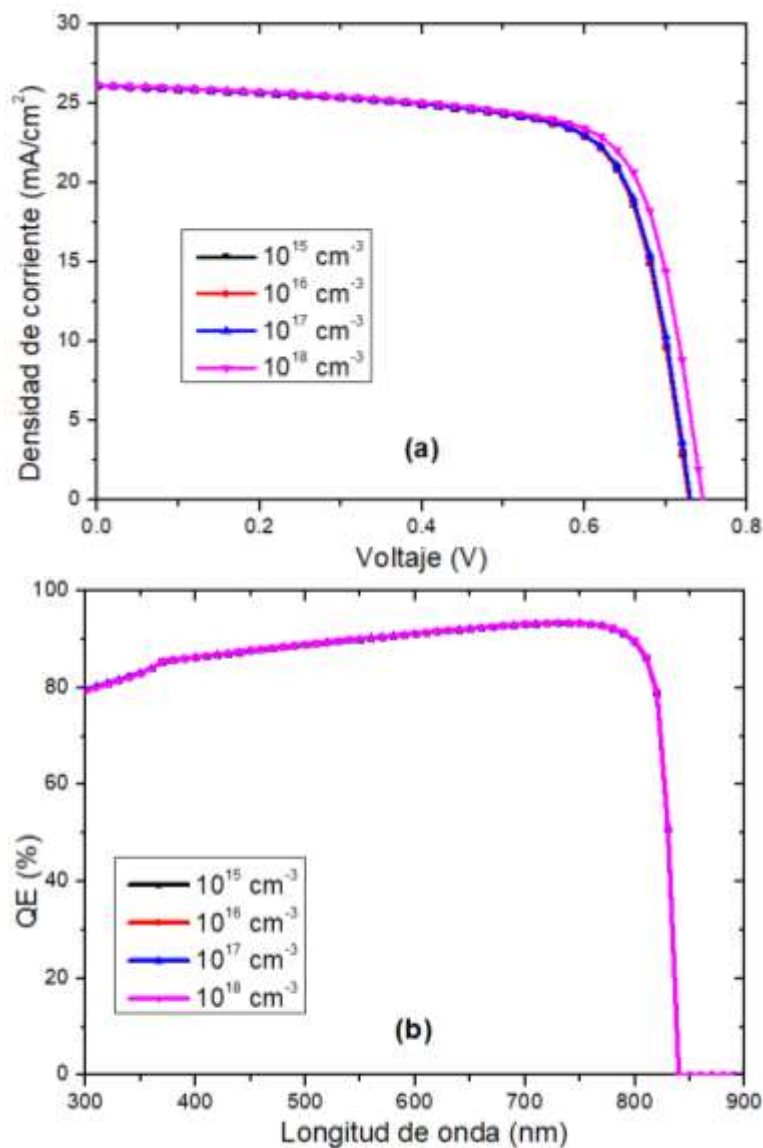


Figura 4.11. (a) curvas JV (b) eficiencia cuántica (QE) para diferentes concentraciones de portadores (N_D) en la capa ventana AZO.

La figura 4.11a muestra que el mejor comportamiento de la celda solar es cuando se tiene un N_D de 10^{18} cm^{-3} , mientras que para las demás concentraciones simuladas la densidad de corriente disminuye un poco, pero el comportamiento entre estas concentraciones es prácticamente el mismo.

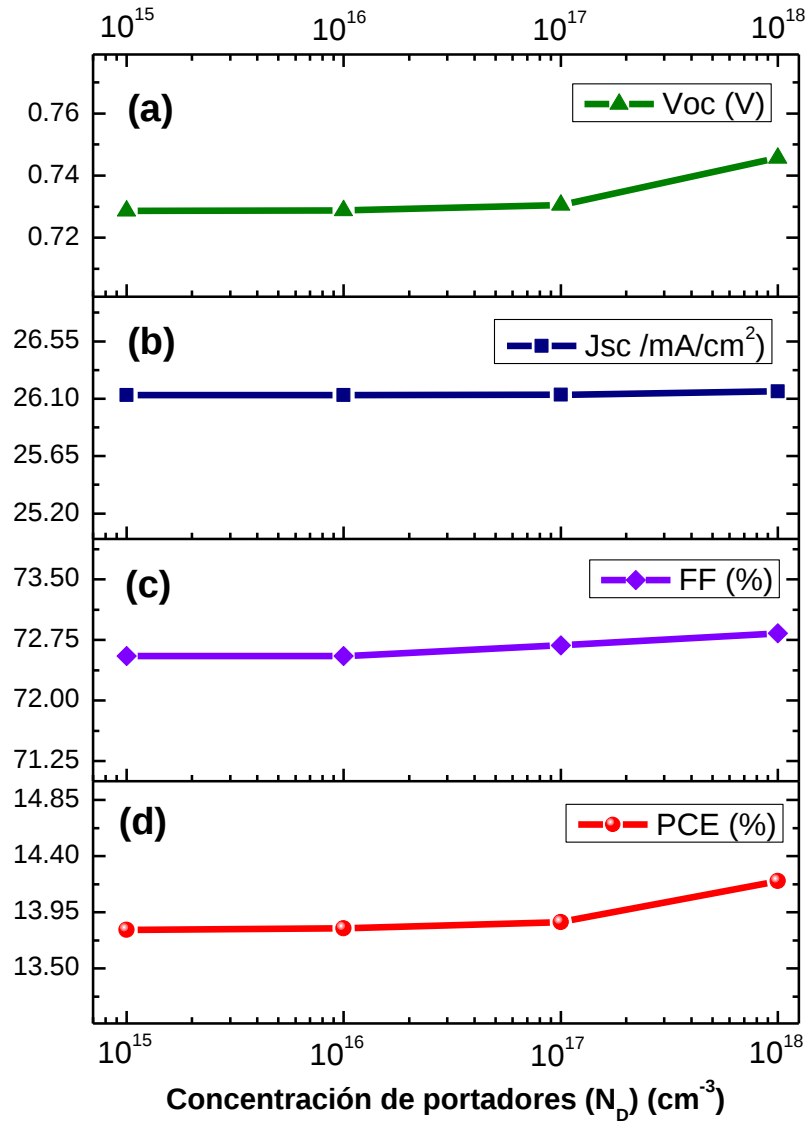


Figura 4.12. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores donadores (N_D) en la capa ventana AZO.

En la figura 4.11b se observa que la concentración N_D es un factor que no influye de manera determinante en la eficiencia cuántica, teniendo el mismo comportamiento en todas las concentraciones simuladas, alcanzando el 90-93% en

el rango de longitud de onda de 550- 800 nm y disminuyendo ligeramente en el rango de 300 a 360 nm que corresponde a la absorción dada en la capa de ventana.

En la figura 4.12 a y b se puede observar que V_{oc} y J_{sc} tienen la misma tendencia con respecto a la concentración de portadores donadores, teniendo un ligero aumento al incrementar N_D , determinado por el incremento de la zona de agotamiento (en el lado p), favoreciendo así la separación de portadores de carga y la recolección de los mismos en los contactos.

El FF tiene un ligero aumento de 72.55% a 72.83% (Fig. 4.12c), debido a que el voltaje máximo obtenido del dispositivo aumenta de 0.60 a 0.62 V cuando N_D incrementa. PCE aumenta de 13.81% a 14.20% cuando aumenta N_D debido a que los electrones fotogenerados tienen una mayor probabilidad de pasar a través de la unión y poder ser recolectados por el contacto frontal [75], aumentando así el PCE. Siendo una concentración N_D de 10^{18} cm^{-3} en la capa AZO como el óptimo para obtener la mayor eficiencia posible en la celda solar propuesta.

4.2.5 Efecto del espesor y densidad de portadores (N_A) de la capa HTL (NiO) en el funcionamiento del dispositivo.

Para analizar el efecto del espesor y la concentración de portadores aceptores (N_A) de la capa HTL en el rendimiento del dispositivo, N_A y el espesor se variaron de 10^{15} a 10^{19} cm^{-3} y de 20 a 100 nm respectivamente. El espesor y la concentración de los portadores de la capa de CdTe se mantuvieron constantes en 2 μm y 10^{15} cm^{-3} mientras que para la capa AZO fue de 10 nm y 10^{18} cm^{-3} respectivamente.

El J_{sc} y V_{oc} aumentaron de 25.84 a 26.16 mA/cm^2 y de 0.68 a 0.74 V respectivamente cuando N_A aumenta de 10^{15} a 10^{19} cm^{-3} como se muestra en las figuras 4.13 a y b respectivamente, esto se debe a que una mayor concentración de huecos entre la capa de CdTe y el contacto posterior favorece la generación de un mejor contacto óhmico, ya que los electrones pueden fluir más fácilmente desde el contacto posterior hacia los estados vacíos de las capas HTL y CdTe mejorando así la extracción del portador del contacto trasero.

El comportamiento del FF se observa en la figura 4.13c, el cual aumenta de 61.38% a 72.83% cuando se aumenta N_A de 10^{15} a 10^{19} cm^{-3} , ya que el voltaje máximo obtenido del dispositivo aumenta de 0.42 V a 0.63 V lo que hace que FF aumente su valor. Lo anterior provoca que el PCE también aumente de 10.8% a 14.2% (Fig. 4.13d).

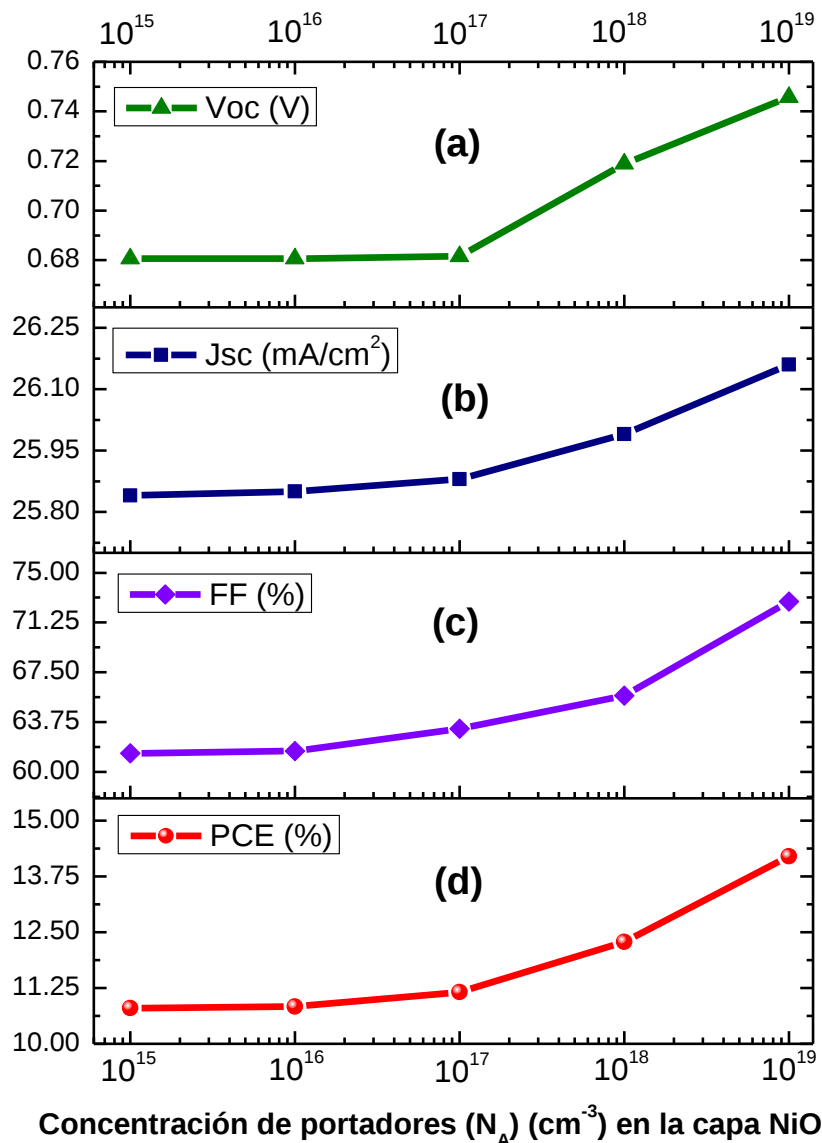


Figura 4.13. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa HTL (NiO).

La Figura 4.14 muestra el comportamiento de V_{oc} , J_{sc} , FF y PCE cuando se varía el espesor de la capa HTL y se observa que el comportamiento del dispositivo no varía

con el aumento de espesor, dado que la movilidad del portador cuando se extrae del contacto posterior, depende de la concentración de portadores de N_A en la capa de NiO.

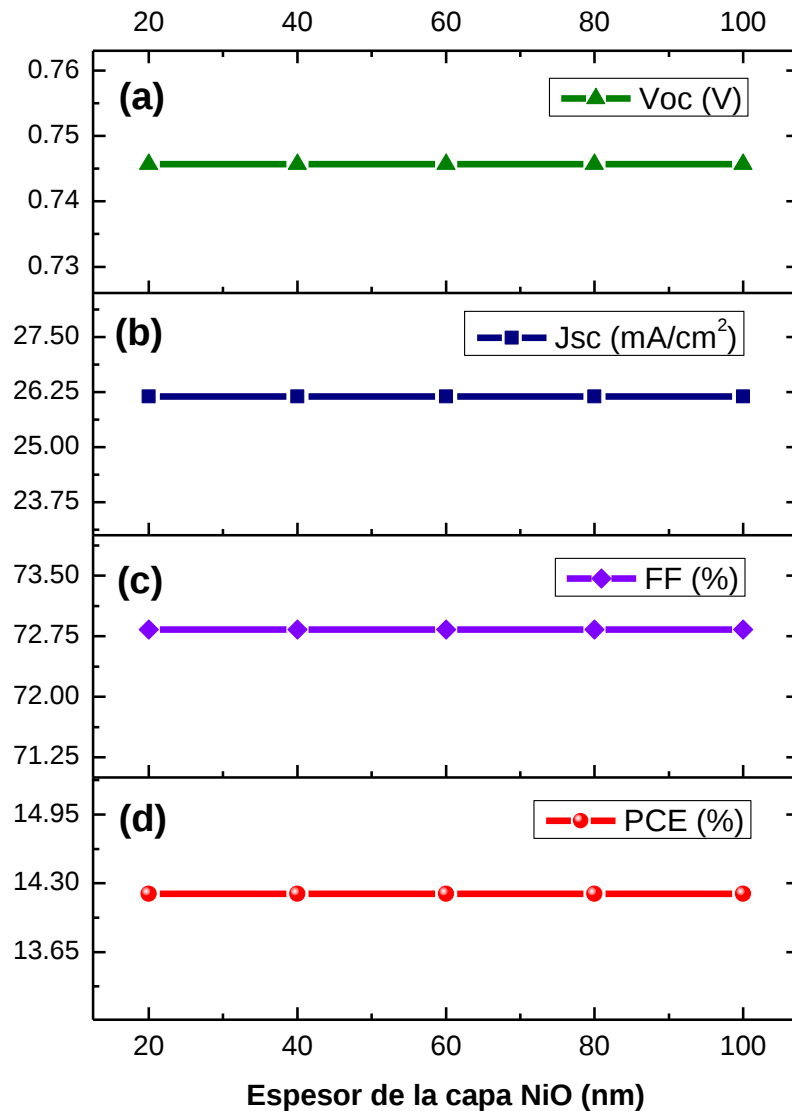


Figura 4.14. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa HTL (NiO).

La Figura 4.15 muestra las curvas J-V características para las estructuras Al/AZO/CdTe/NiO/Ni y Al/AZO/CdTe/Ni, de esta figura se puede ver que al introducir una capa de NiO (HTL) entre la capa absorbente de CdTe y el contacto posterior mejora en gran medida el rendimiento del dispositivo. Teniendo un PCE máximo de

11.07% sin capa HTL y un PCE máximo del 14. 2% al incorporar una capa HTL de NiO con un espesor de 20 nm y una concentración de portadores N_A de 10^{19} cm^{-3} .

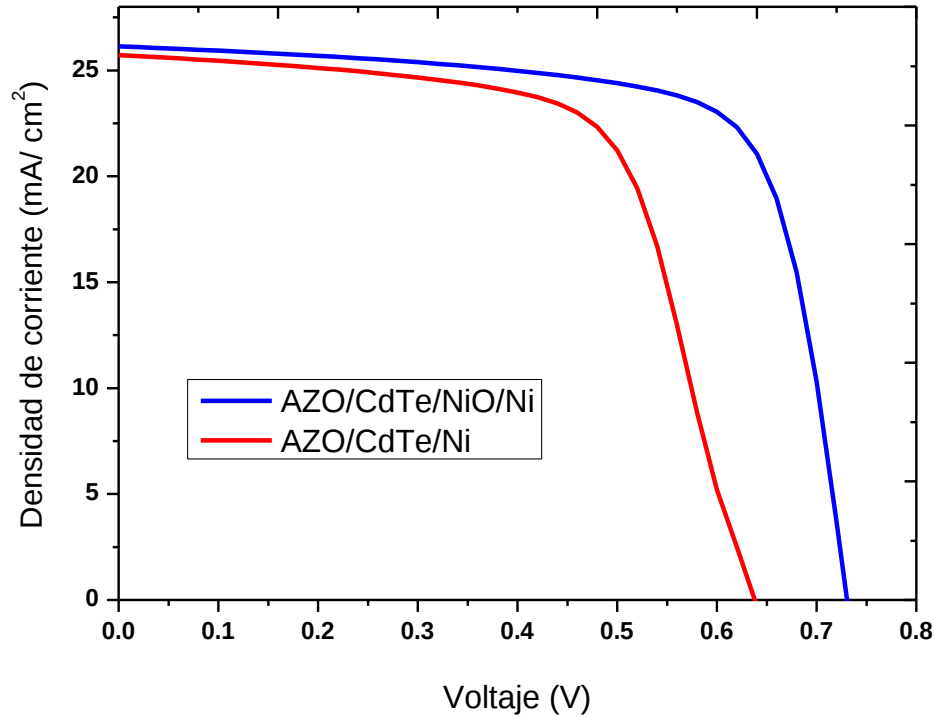


Figura 4.15. Curvas J-V para las estructuras Al/AZO/CdTe/NiO/Ni y Al/AZO/CdTe/Ni

4.2.6 Efecto de la temperatura de operación en η , V_{oc} , J_{sc} y FF

Normalmente, se considera que la temperatura de funcionamiento estándar para una celda solar es de 300 K. Sin embargo, es relevante estudiar el comportamiento de los dispositivos a diferentes temperaturas de operación, ya que, en condiciones normales de trabajo, suelen estar expuestos a un rango de temperatura diferente. Por lo cual, para analizar el efecto de la temperatura de operación en el funcionamiento de la celda solar propuesta, se varió la temperatura de funcionamiento de 270 K a 320 K, mientras que los demás parámetros analizados se mantuvieron constantes en su valor óptimo. El espesor de la película CdTe fue 2 μm , con una concentración de portadores de 10^{15} cm^{-3} , mientras que la capa AZO se simuló a un espesor de 10 nm y una concentración de portadores de 10^{18} cm^{-3} ,

la capa de NiO se simuló usando un espesor de 20 nm y una concentración de portadores de 10^{19} cm^{-3} , como contacto frontal aluminio y contacto posterior níquel.

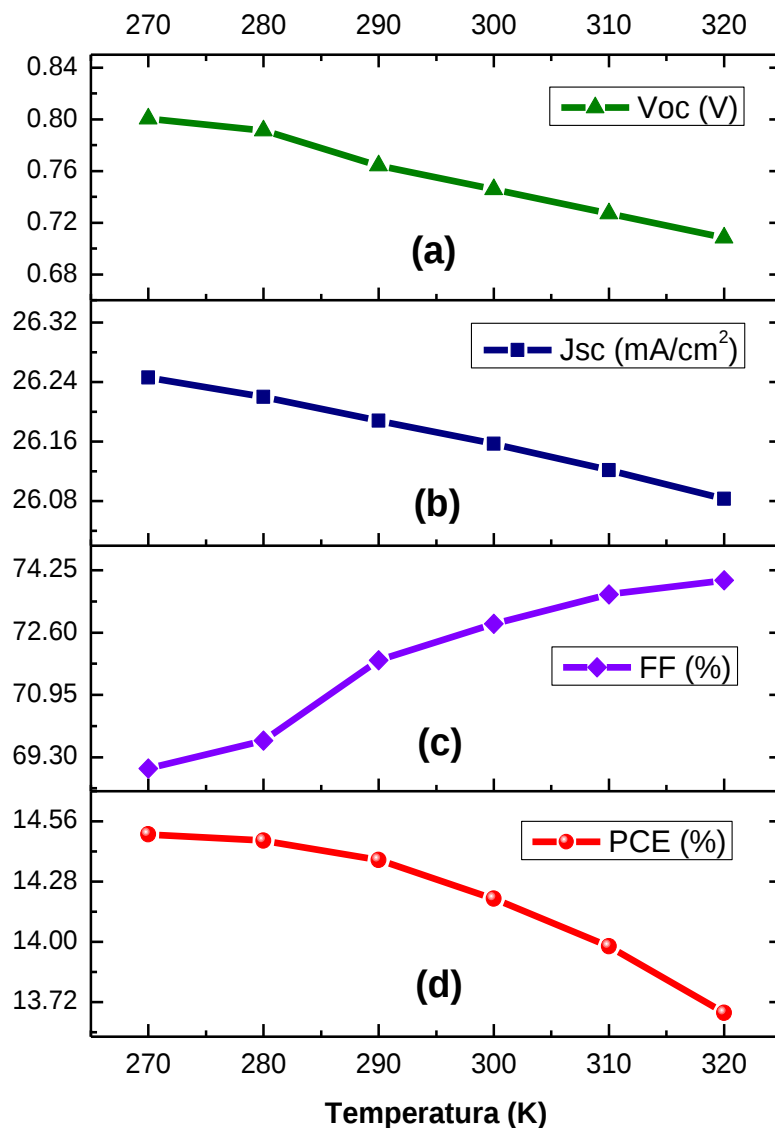


Figura 4.16. Cambio en Voc (a), Jsc (b), FF (c) y PCE (d) para diferentes temperaturas de operación.

La Figura 4.16 muestra que a medida que aumenta la temperatura, V_{oc} , J_{sc} y PCE disminuyen, mientras que FF aumenta. De la ecuación 2.22 se observa que con el aumento de la temperatura V_{oc} disminuirá significativamente, ya que a medida que aumenta la temperatura aumenta el número de portadores, disminuyendo así su

movilidad y en consecuencia J_0 aumenta (Ec. 4.2), por lo que V_{oc} disminuye 0.1 V a medida que la temperatura de operación se incrementa 50 K. FF aumenta de 69% a 73.98% (Fig. 4.16c), esto es determinado por la ecuación 2.20.

El aumento en la temperatura de operación proporciona energía adicional a los electrones en las celdas solares, por lo que a temperaturas más altas es más probable que se recombinen con los huecos antes de ser recolectados por el contacto [77], disminuyendo J_{sc} (Fig. 4.16b), además, al aumentar la temperatura, la conductividad del material se ve afectada por la dispersión de los portadores de carga, debido a la generación de fonones [72], como resultado se produce una disminución del PCE, el cual disminuye 0.87% al aumentar 50 K la temperatura de funcionamiento.

4.2.7 Efecto de la resistencia en serie (R_s) y paralelo (R_{sh}) en el funcionamiento del dispositivo

La resistencia en serie y en paralelo juegan un papel muy importante en los parámetros de rendimiento de las celdas solares, ya que tanto la resistencia en serie (R_s) como la resistencia en paralelo (R_{sh}) reducen la eficiencia de una celda solar. La figura 2.18 representa el circuito equivalente de una celda solar [62]. La R_s se origina principalmente por defectos en las interfaces y en los contactos metálicos delantero/trasero, mientras que un R_{sh} bajo se debe a defectos de fabricación o de depósito. [68, 78-79].

La R_s y R_{sh} se variaron en el rango de 0-10 Ωcm^2 y 100-2200 Ωcm^2 respectivamente, los demás parámetros se mantuvieron como en la sección anterior, con $T=300$ K. En la figura 4.17a se observa que V_{oc} permanece sin cambios a medida que R_s incrementa, sin embargo, J_{sc} si disminuye 0.58 mA/cm^2 cuando R_s incrementa de 0 a 10 Ωcm^2 ; en la misma figura también se puede observar que J_{sc} permanece sin cambios al variar R_{sh} , pero V_{oc} incrementa 20 mV al incrementar R_{sh} de 100 a 2200 Ωcm^2 .

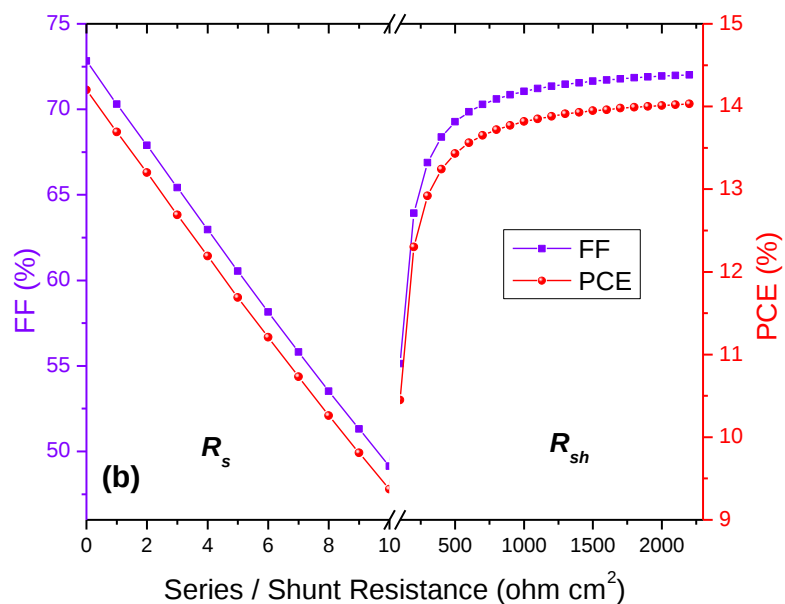
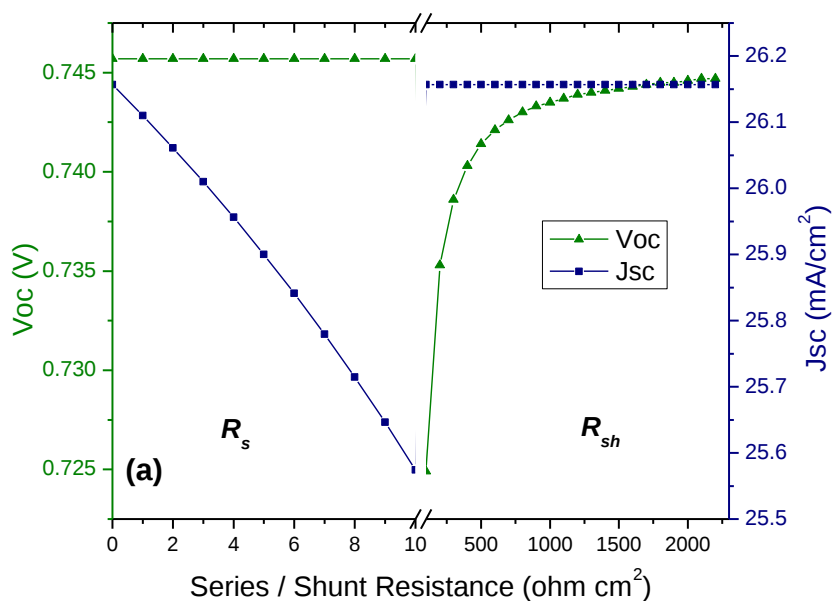


Figura 4.17. Comportamiento de (a) V_{oc} , J_{sc} y (b) PCE, FF con diferentes resistencias en serie y paralelo.

En la figura 4.17b se puede observar que R_s afecta negativamente al FF disminuyendo de 72.83 % a 49.14 % al incrementar R_s de 0 a 10 Ωcm^2 debido al decremento de la potencia máxima entregada por el dispositivo generado por la

diminución de la corriente máxima (de 22.78 a 20.83 mA/cm²) y el voltaje máximo generado (de 0.62 a 0.45 V); como PCE depende proporcionalmente del FF y J_{sc}, PCE disminuye 4.83 % al incrementarse R_s. Por otro lado, el incremento de R_{sh} aumenta el valor de FF, el cual se incrementa de 55.13 a 72.02% cuando R_{sh} aumenta de 100 a 2200 Ωcm². Dado el comportamiento de V_{oc} y FF, PCE disminuye 3.58% al disminuir R_{sh} (Fig 4.17b).

4.3 Efecto de la activación de la capa CdTe en el funcionamiento del dispositivo

La activación de películas de CdTe llevadas a cabo en una atmósfera que contenga cloro es necesaria para mejorar la eficiencia de las celdas solares, ya que el someter una película de CdTe a tratamientos térmicos con CdCl₂ y/o diclorofluorometanos (CF's) trae grandes beneficios para la elaboración de celdas solares basadas en CdTe, dichos beneficios se comentaron en la sección 2.1.4.

Dada la importancia de la activación de la película de CdTe en la elaboración de celdas solares, en esta sección se simuló y analizó el efecto de la activación de la película de CdTe en el rendimiento de la celda solar. Para esto, se depositó una capa de CdTe a través de la técnica de erosión catódica (sputtering), la cual se sometió a un proceso de activación con gases (CF's), y se caracterizó ópticamente, obteniendo las curvas de transmitancia. Dichos espectros fueron introducidos al software SCAPS 1-D a través del modelo óptico del coeficiente de absorción, que se describió en la sección 3.3.2. Este proceso nos permite simular la película de CdTe con un proceso de activación. El depósito, activación y caracterización óptica de la película de CdTe se describen en el apéndice 1 y 2.

4.3.1 Creación del archivo de absorbancia (.abs) en SCAPS 1-D y resultados de la simulación.

Como se describió en la sección 3.3.2, SCAPS 1-D permite crear un archivo (.abs) asociado a un material en específico, este archivo contiene el coeficiente de absorción asociado a una longitud de onda, y se obtiene a partir de una data

experimental. Para estudiar la influencia de la activación de la capa CdTe en el rendimiento de la celda solar, se tomaron en cuenta los resultados de las mediciones de transmitancia hechas a la capa CdTe activada (apéndice 2), con esos resultados se calculó el coeficiente de absorción definido por la ley de Lambert - Beer a través de la ecuación 4.4 [80], estos coeficientes de absorción se introdujeron en el modelo de la constante de absorción óptica de SCAPS 1-D para la capa CdTe a través del archivo .abs creado.

$$\alpha(\nu) = \frac{2.303 \times Abs(\lambda)}{d} \quad (4.4)$$

Donde $Abs(\lambda)$ es la absorbancia de la película en función de la longitud de onda y d es el espesor de la película.

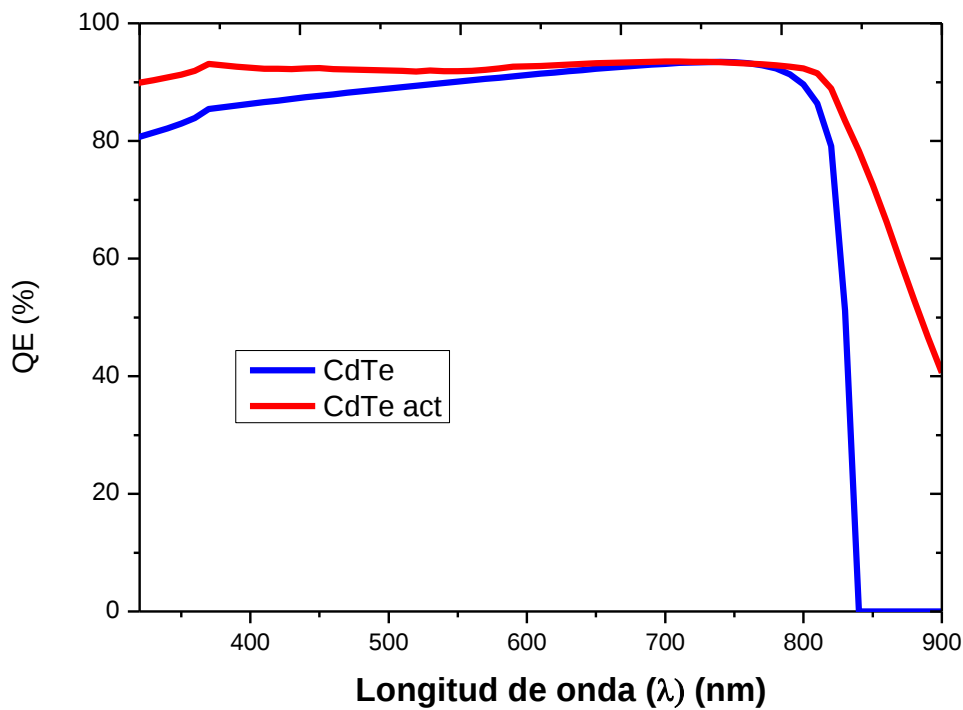


Figura 4.18. Gráficas de eficiencia cuántica (QE) de la celda solar simulada usando coeficiente de absorción teórico y experimental para la capa CdTe.

En la figura 4.18 se muestran las gráficas de eficiencia cuántica (QE) de la celda solar simulada, usando el coeficiente de absorción de la película CdTe sin activar (teórico) usado en la sección 4.2 y con activación (experimental). Se puede observar

que al tener la película activada de CdTe se tiene una mayor QE en longitudes de onda de 300 a 600 nm. Esto es debido a un mayor coeficiente de absorción en la película CdTe, que es generado por una mayor absorbancia debido al clorado (Fig. A2.1). En longitudes mayores a 830 nm también se tiene un mayor QE debido a que el modelo teórico de SCAPS 1-D, considera un coeficiente de absorción cero en fotones incidentes con energía menores al band gap.

La celda solar al ser simulada con la capa de CdTe activada presenta un comportamiento similar (apéndice 3) en los puntos analizados en la sección 4.2, lo que implica que los fenómenos explicados en la sección 4.2 son aplicables al comportamiento que tiene la celda solar analizada en esta sección. Sin embargo, debido al efecto de la activación del CdTe se tiene un mejor rendimiento en el dispositivo simulado, como se puede observar en la figura 4.19, se alcanza una eficiencia de 16.49%, con un V_{oc} de 0.74 V, un J_{sc} de 30.73 mA/cm² y un FF de 72.62%.

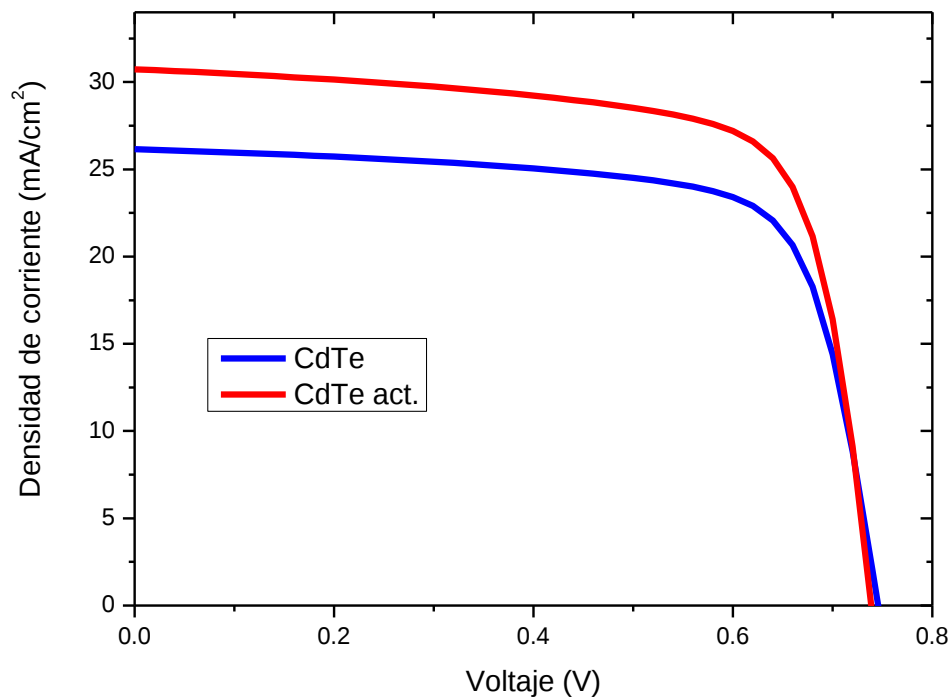


Figura 4.19. Gráficas J-V de la celda solar simulada usando el coeficiente de absorción teórico y el experimental para la capa CdTe.

Este aumento en la eficiencia comparado con lo obtenido en la sección 4.2 se debe principalmente a la mayor absorción en la capa CdTe activada lo que generó un aumento considerable en J_{sc} el cual incrementa a 30.73 mA/cm^2 . Este valor obtenido de J_{sc} está muy cercano al J_{sc} máximo teórico de 30.5 mA/cm^2 para celdas solares basadas en CdTe [96]. La diferencia de 0.23 mA/cm^2 entre el resultado simulado y máximo teórico puede deberse a error de cálculo o aproximación.

4.4 Efecto del uso de una segunda capa absorbente de FeSi_2

En esta sección se propone usar al disiliciuro de hierro (FeSi_2) como una segunda capa absorbente sumada a la capa absorbente CdTe en una configuración de doble capa absorbente en la celda solar, siendo la estructura del dispositivo la siguiente $\text{Al/AZO/CdTe/FeSi}_2/\text{Ni}$. El uso de una doble capa absorbente en celdas solares basadas en CdTe ya se ha analizado teórica y experimentalmente, alcanzando una eficiencia experimental reportada de 24.35% [81] con una estructura de dispositivo ($\text{FTO/ZMO/CdSe}_x\text{Te}_{1-x}/\text{CdTe}$) y una eficiencia teórica alcanzada de 27.35% [82] con una estructura de dispositivo de ($\text{Cu/FTO/In}_2\text{S}_3/\text{CdTe/FeSi}_2/\text{Ni}$).

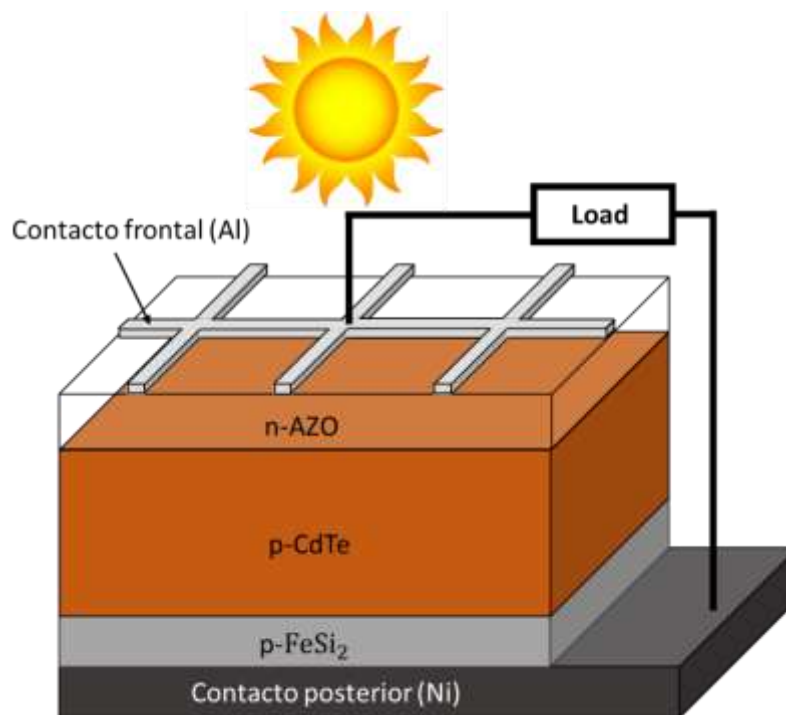


Figura 4.20. Representación de la celda solar simulada ($\text{Al/AZO/CdTe/FeSi}_2/\text{Ni}$).

En la figura 4.20 se presenta el diagrama esquemático de la celda solar propuesta, en la parte superior de la estructura se encuentra el contacto frontal de aluminio en una configuración tipo rejilla, seguido de la capa AZO como capa n o capa ventana, la primera capa absorbente de CdTe, la segunda capa absorbente de FeSi₂ y por último el contacto trasero de Níquel. El propósito de esta configuración de doble capa absorbente es el de mejorar la eficiencia debido a que el CdTe tiene band gap de 1.49 eV, que es mayor que el del FeSi₂ que tiene un band gap de 0.87 eV por lo cual, los fotones incidentes con una energía menor a 1.49 eV y mayor a 0.87 eV podrán ser absorbidos por la capa de FeSi₂.

En la figura 4.21a se muestra la eficiencia cuántica simulada para las estructuras (Al/AZO/CdTe/NiO/Ni) y (Al/AZO/CdTe/FeSi₂/Ni) donde se puede observar que al introducir la capa absorbente de FeSi₂ se tiene una QE del 100% en longitudes de onda de 370 a 1200 nm y por arriba de 70% en una longitud de onda de hasta 1400 nm. Sin embargo, cuando se tiene solo una capa absorbente de CdTe, se tiene una QE de entre 90-80% en longitudes de onda con una energía mayor a 1.5 eV (menores a ~800 nm) y para longitudes de onda con una energía menor a 1.5 eV tenemos una QE prácticamente de 0%. Los fotones incidentes que se absorben en la capa FeSi₂ incrementan la generación de pares e-h por lo cual se genera una mayor J_{sc}, que en última instancia mejora considerablemente la eficiencia del dispositivo simulado.

En la figura 4.21 b, se observa claramente el aumento en la densidad de corriente dada por una mayor absorción de fotones al colocar la capa FeSi₂ por lo cual se obtiene una eficiencia máxima de 27.19%, con un V_{oc} de 0.63 V, una J_{sc} de 51.43 mA/cm² y un factor de llenado de 82.99%.

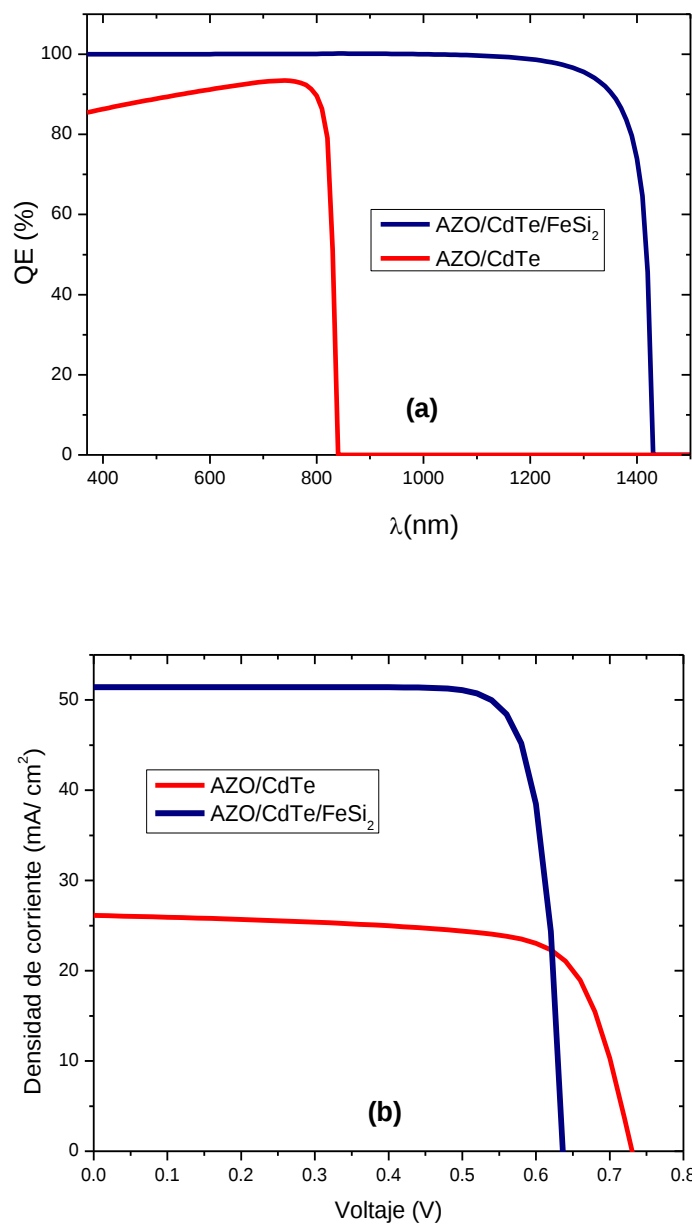


Figura 4.21. (a) QE simulada y (b) curva J-V para las estructuras AZO/CdTe/FeSi₂ y AZO/CdTe.

4.4.1 Diagrama de bandas de la heterounión AZO/CdTe/FeSi₂

Se calculó el diagrama de bandas de la estructura simulada a través de las fórmulas correspondientes presentadas en la sección 4.1.1 apoyado con los valores obtenidos de SCAPS 1-D. La figura 4.22 muestra el diagrama de bandas de la estructura simulada, la diferencia entre la banda de conducción y valencia del AZO

y CdTe es de $\Delta E_c = 0.22$ eV y $\Delta E_v = 2.1$ eV respectivamente, mientras que ΔE_c y ΔE_v en la interfaz FeSi₂ es de 0.12 eV y 0.74 eV respectivamente. Los niveles de Fermi para las capas AZO, CdTe y FeSi₂ con respecto a la banda de valencia son de 3.32 eV, 0.21eV y 0.09 eV respectivamente, lo que indica que ningún material simulado es degenerado. El espesor de la región de carga espacial (W) es de 378 nm, el cual fue calculado a partir de las ecuaciones 2.11 a la 2.13 y con los valores arrojados por el software, teniendo un $x_n=28$ nm y $x_p=350$ nm, esta reducción de W con respecto a lo obtenido en la sección 4.1.1 (992 nm) se debe al espesor de la capa CdTe, ya que a espesores menores a 1 μ m, W se verá afectado por el espesor de esta capa. Esta reducción en W modifica la barrera de potencial V_{bi} , por lo que se recalculo usando las ecuaciones 2.7, 2.10a y 2.10b, obteniendo un valor de 0.89 V.

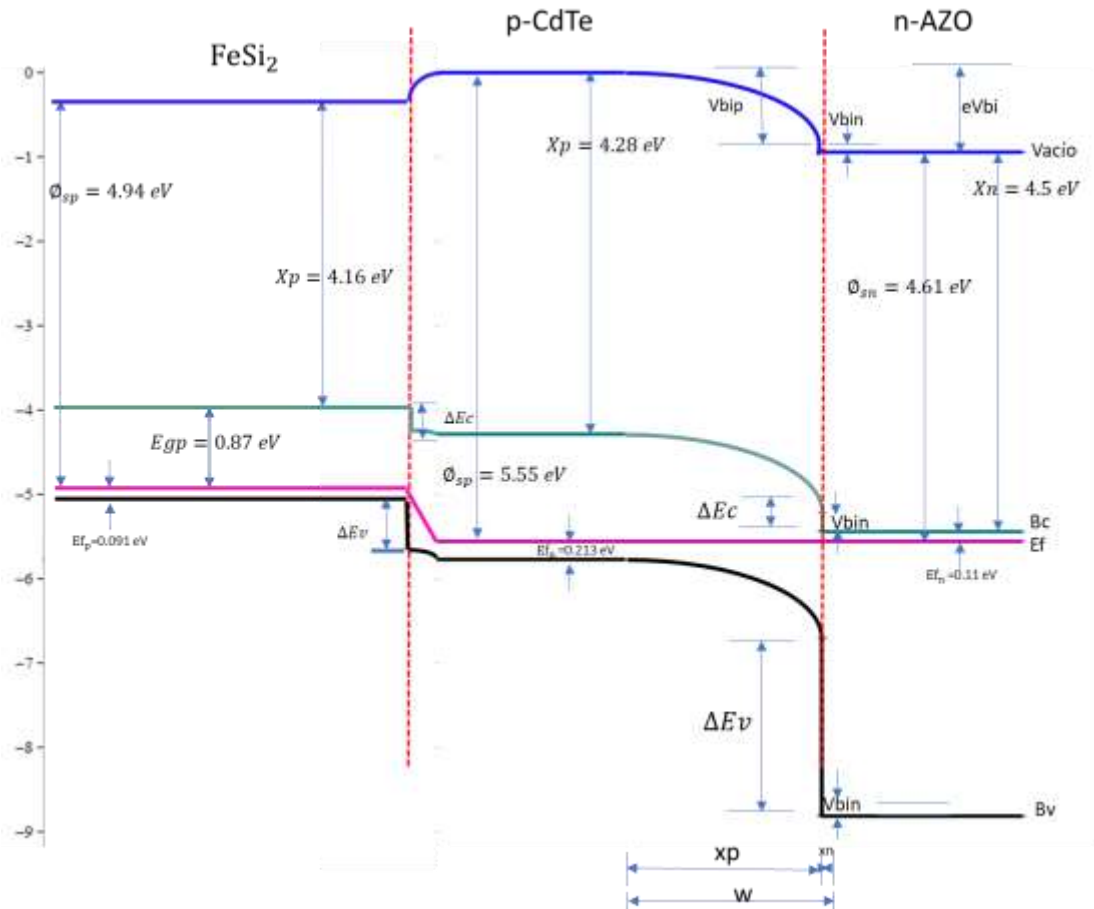


Figura 4.22. Diagrama de bandas de la heteroestructura FeSi₂/CdTe/AZO.

Una de las ventajas de usar FeSi_2 como capa absorbente en esta estructura, es la función de trabajo (WF) del FeSi_2 , la cual es de 4.93 eV, lo que permite usar un metal con una función de trabajo mayor a 4.93 eV para generar un contacto óhmico. Caso contrario ocurre con el CdTe que debido a su alta WF de 5.5 eV, pocos materiales tienen una función de trabajo adecuada para generar un contacto óhmico con el CdTe, lo que afecta a la eficiencia final del dispositivo y por consecuencia se tienen que buscar alternativas para ser usadas como contacto trasero para generar un contacto óhmico con el CdTe, como es el uso de capas HTL (NiO , MoO_2 , V_2O_5) o usar Pt como contacto trasero, el cual es un material de alto costo.

4.4.2 Parámetros de simulación de la estructura AZO/CdTe/ FeSi_2

Los parámetros físicos de las capas que componen el dispositivo simulado se describen en la tabla 4.3. En la tabla 4.4 se describen las densidades de estados (N_t) de las interfaces AZO/CdTe y CdTe/ FeSi_2 generados por el desajuste de red entre ambas capas de cada interfaz; las propiedades eléctricas del contacto frontal y posterior son los mismos mostrados en la tabla 4.2. La simulación se llevó a cabo bajo iluminación estándar AM 1.5 G y una temperatura de 300 K, excepto en el apartado donde se analiza el funcionamiento del dispositivo en función de distintas temperaturas de exposición.

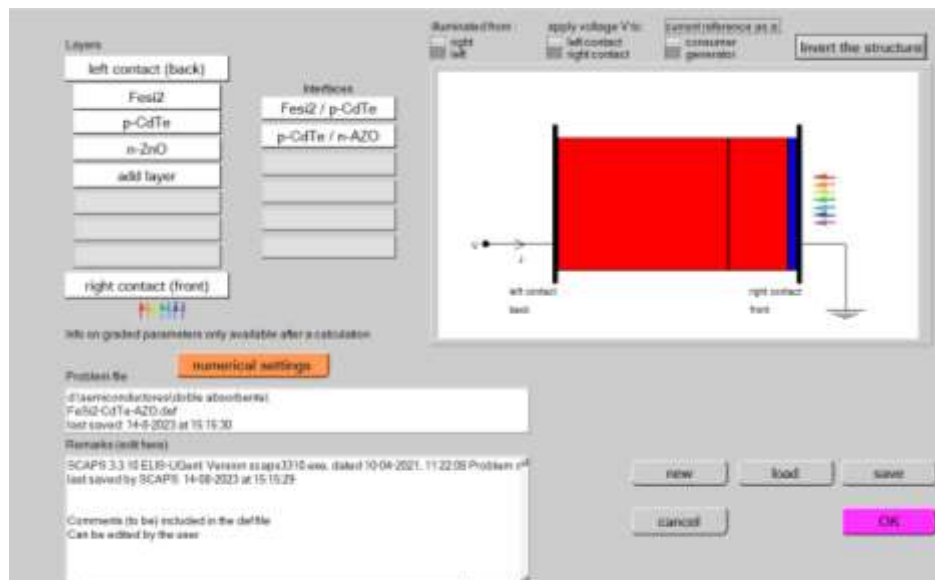


Figura 4.23. Panel de definición de celdas solares de SCAPS-1D para la estructura Al/AZO/CdTe/ FeSi_2 /Ni

En la figura 4.23 se puede observar la interfaz de definición de la estructura simulada, en rojo a la izquierda la capa FeSi₂, en rojo a la derecha la capa P (CdTe), la capa n (AZO) en azul, contactos trasero y frontal, así como el punto de iluminación.

Tabla 4.3. Parámetros usados en la simulación de la celda solar Al/AZO/CdTe/FeSi₂/Ni

Parámetros	CdTe [3, 22, 67-69]	AZO [10,40,59,69,70]	FeSi ₂ [46,82,94,95]
Espesor (μm)	0.3-1	0.01-0.1	0.2-1
Bandgap, E_g (eV)	1.49	3.37	0.87
Afinidad electrónica, χ (eV)	4.28	4.5	4.16
Permitividad relativa, ϵ_r	9.4	9	22.5
Densidad efectiva de estados en BC, N_c (cm ⁻³)	8×10^{17}	2.22×10^{18}	5.6×10^{19}
Densidad efectiva de estados en BV, N_v (cm ⁻³)	1.8×10^{19}	1.9×10^{19}	2.08×10^{19}
Movilidad de electrones, μ_n (cm ² /Vs)	500	100	100
Movilidad de huecos, μ_p (cm ² /Vs)	60	25	20
Velocidad térmica de electrones (cm/s)	10^7	10^7	10^7
Velocidad térmica de huecos (cm/s)	10^7	10^7	10^7
Concentración de donadores, N_D (cm ⁻³)	0	$10^{15} - 10^{18}$	0
Concentración de aceptores, N_A (cm ⁻³)	$10^{13} - 10^{17}$	0	$10^{14} - 10^{18}$
Densidad de defectos, N_t (1/cm ³)	10^{15}	10^{14}	10^{14}
Tipo de defectos	aceptor	donador	aceptor

Tabla 4.4. Parámetros de simulación para contactos y defectos en interfaces.

<i>Densidad de defectos en la interfaz</i>	
AZO/CdTe [71]	10^{12} cm^{-2}
Tipo de defectos	Aceptor
Sección transversal de captura de electrones/huecos	10^{-10} cm^{-2}
CdTe/ FeSi ₂ [82]	$10^{10} - 10^{17} \text{ cm}^{-2}$
Tipo de defecto	Aceptor
Sección transversal de captura de electrones/huecos	10^{-15} cm^{-2}

4.4.3 Efecto del espesor de la primera capa absorbente CdTe

Para analizar el efecto que tiene el espesor de la primera capa absorbente CdTe sobre el rendimiento del dispositivo, se varió el espesor de 0.3 a 1 μm, ya que, al tener una segunda capa absorbente, el espesor del CdTe puede reducirse, como se analizara a continuación. Al mismo tiempo que los demás parámetros se mantuvieron constantes durante las simulaciones.

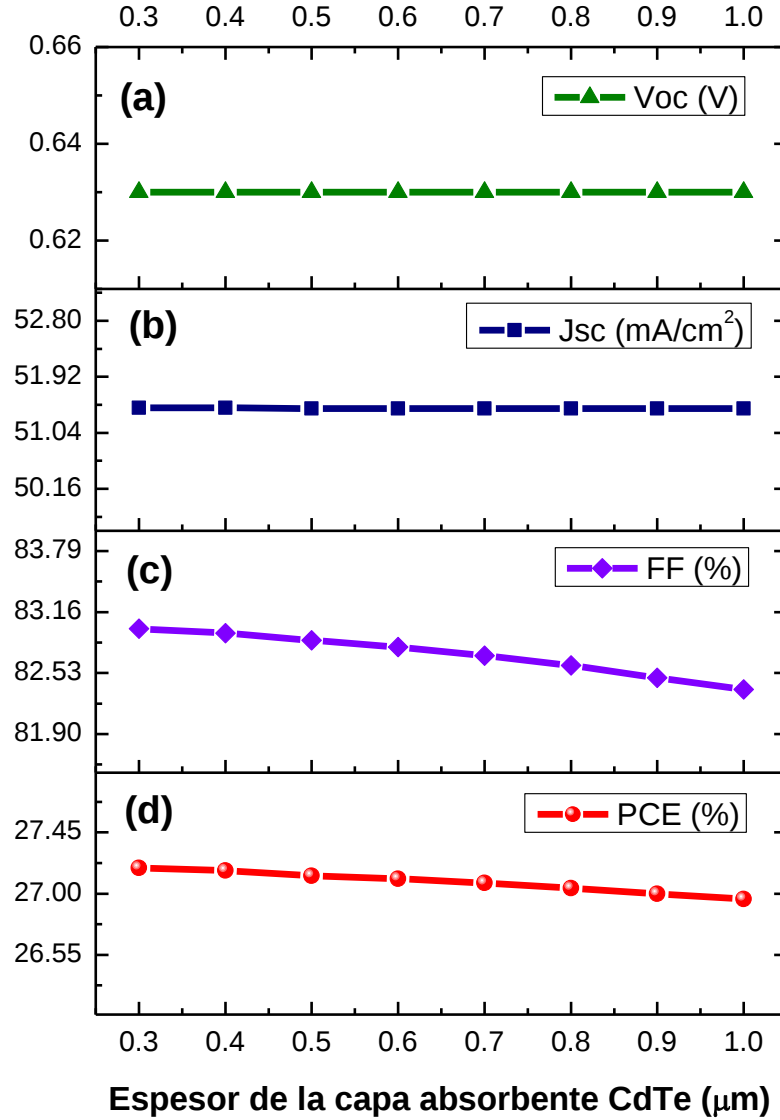


Figura 4.24. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa absorbente CdTe en la estructura Al/AZO/CdTe/FeSi₂/Ni.

En la figura 4.24b se puede observar que J_{sc} tiene un comportamiento prácticamente constante al variar el espesor de la capa CdTe debido probablemente a la longitud de difusión del portador en esta capa ($\sim 3.9 \mu\text{m}$), y que al tener una segunda capa absorbente de FeSi₂, los fotones que no son absorbidos por el CdTe serán absorbidos por el FeSi₂. De igual manera el V_{oc} tiene un comportamiento constante (Fig. 4.24a) al variar el espesor de la capa CdTe, ya que como se puede observar en la ecuación 4.2, la longitud y coeficiente de difusión del portador no están en

función del espesor de la capa, por lo que, la densidad de corriente de saturación J_0 no es afectada por el aumento del espesor del CdTe y J_{sc} se mantiene constante (Ec. 2.2).

El FF disminuyó de 82.99 a 82.36 % debido a un ligero decremento de P_{max} (Ec. 2.20) ya que la densidad de corriente máxima de la celda (J_{max}) disminuye de 49.20 mA/cm² a 48.96 mA/cm² al incrementar el espesor de la capa CdTe de 0.3 a 1 μ m. Debido al comportamiento de J_{sc} , V_{oc} y FF, el PCE también sufrió un ligero decremento de 27.19 a 26.96% (Fig. 4.24d).

4.4.4 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la capa absorbente CdTe

Para estudiar el efecto que tiene la concentración de portadores aceptores (N_A) de la primera capa absorbente CdTe sobre el rendimiento del dispositivo, se varió de 10^{13} a 10^{17} cm⁻³. Siendo el mismo rango usado en la sección 4.2.2.

En la figura 4.25a y b se puede observar el comportamiento del V_{oc} y J_{sc} al variar N_A en la capa absorbente CdTe, el V_{oc} no sufrió variación al incrementar N_A , sin embargo, J_{sc} disminuyó de 51.43 a 49.85 mA/cm² al pasar de un N_A de 10^{16} a 10^{17} cm⁻³, esto se puede explicar que debido al incremento de N_A , el nivel de Fermi de los huecos en la capa de CdTe disminuye, incrementando V_{bi} lo que dificultaría el flujo de los portadores a través de la unión.

El FF tiene un decremento total (Fig. 4.25c) del 2.56% al incrementar N_A de 10^{13} a 10^{17} cm⁻³. Por otra parte, el PCE también mostro una disminución de 27.19 a 25.46% cuando N_A supera 10^{15} cm⁻³, debido al comportamiento de FF y J_{sc} (Ec. 2.30).

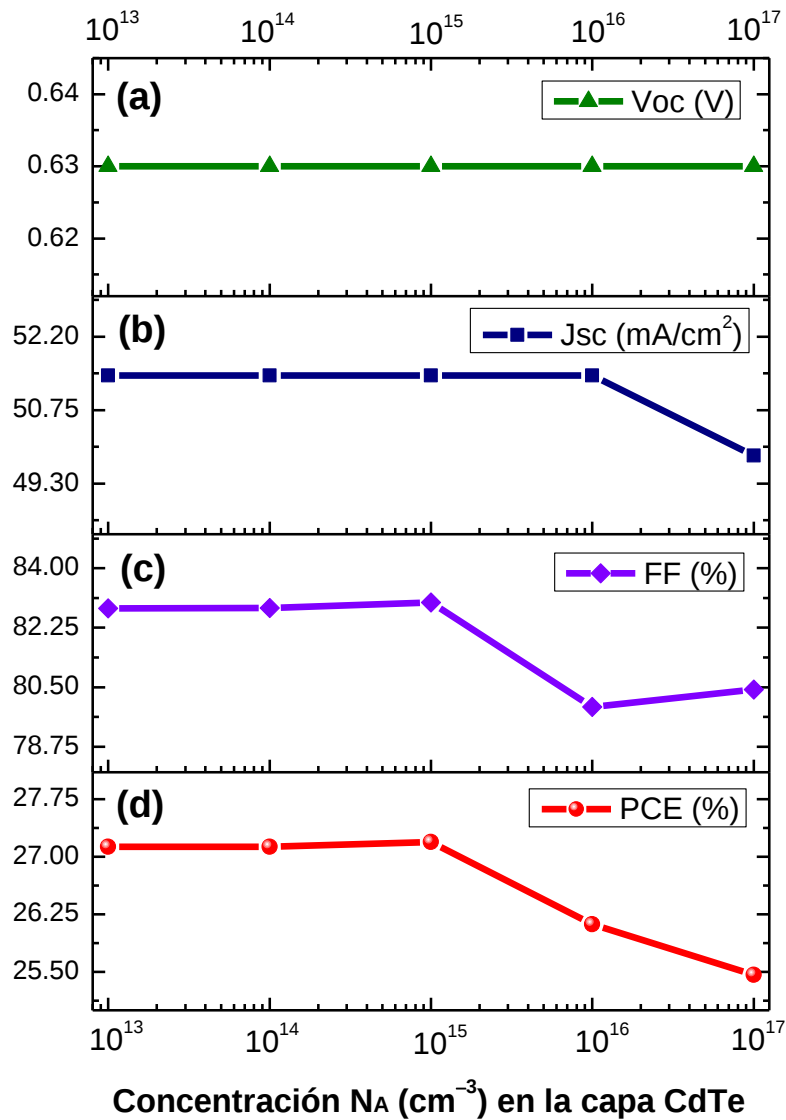


Figura 4.25. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa absorbente CdTe en la estructura Al/AZO/CdTe/FeSi₂/Ni.

4.4.5 Efecto del espesor de la capa ventana AZO al tener una segunda capa absorbente FeSi₂

En esta sección se analizó el efecto de variar el espesor de 10 a 100 nm de la capa ventana AZO sobre el rendimiento fotovoltaico de la celda solar propuesta. Los parámetros de las otras capas se mantuvieron constantes en esta sección.

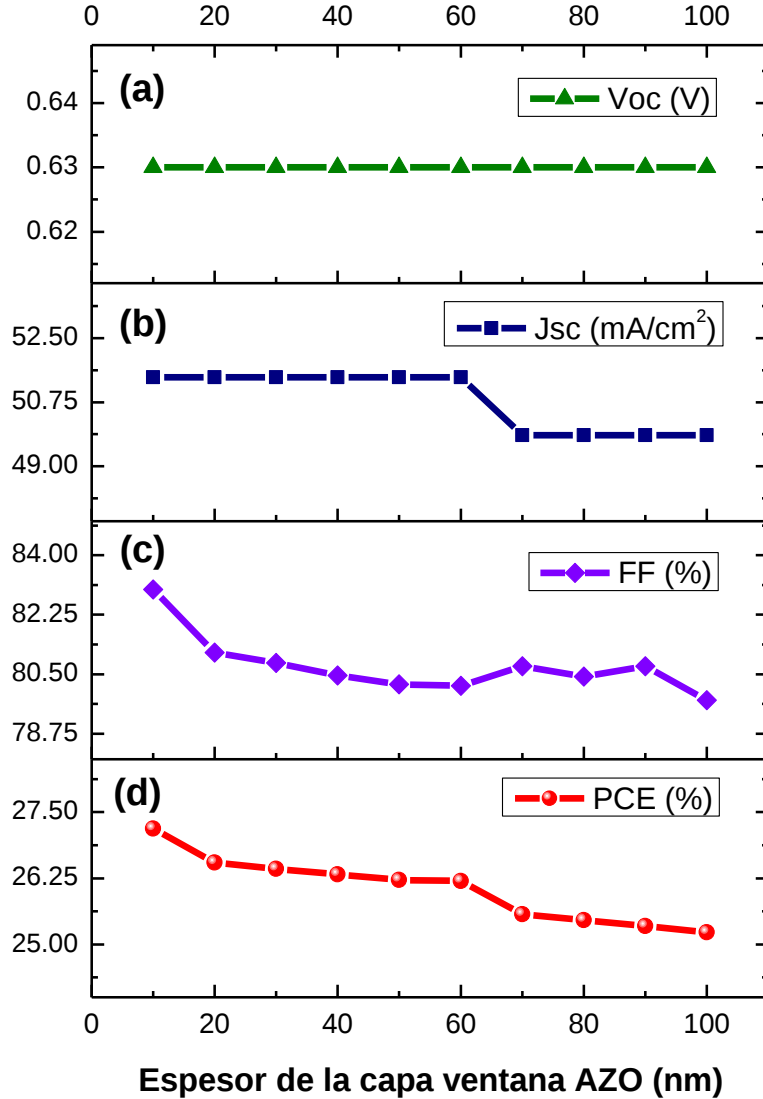


Figura 4.26. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa ventana AZO en la estructura Al/AZO/CdTe/FeSi₂/Ni.

En la figura 4.26a se puede observar que el comportamiento de V_{oc} no se ve afectado por el cambio de espesor de la capa AZO, ya que la separación de cargas se mantiene debido a que la longitud de difusión de los portadores (~ 510 nm) permite que los portadores al ser separados por el campo eléctrico de la unión p-n alcancen la región n y p respectivamente. La J_{sc} tiene una ligera disminución de 1.58 mA/cm^2 al incrementar el espesor de la capa AZO de 10 a 70 nm (Fig. 4.26b), manteniendo un comportamiento prácticamente constante a partir de este espesor.

La disminución de J_{sc} puede explicarse debido a que al haber un mayor espesor de la capa ventana se favorece una mayor absorción en esta capa, transmitiendo menos fotones a las capas absorbentes. El FF tuvo un decremento de 3.25 % al incrementar el espesor de la capa ventana de 10 a 100 nm (Fig. 4.26c). Ya que el comportamiento del PCE es directamente proporcional a FF, J_{sc} y V_{oc} como se describe en la ecuación 2.3, PCE disminuye de 27.19 a 25.23% al incrementar el espesor de la capa ventana.

4.4.6 Efecto de la concentración de portadores N_D en la capa ventana AZO al tener una segunda capa absorbente $FeSi_2$

El comportamiento de la celda solar cuándo se varía la concentración de portadores N_D de 10^{15} a 10^{18} cm^{-3} en la capa n (AZO) se muestra en la figura 4.27, para esto se simuló la capa AZO con un espesor de 10 nm, el CdTe con un espesor de 2 μm , y una concentración de portadores de 10^{15} cm^{-3} , la capa de $FeSi_2$ se simuló usando un espesor de 1 μm y una concentración de portadores de 10^{18} cm^{-3} , y como contactos los mencionados en las secciones anteriores.

En la figura 4.27a y b se puede observar que el comportamiento de V_{oc} y J_{sc} es prácticamente constante al variar la concentración de portadores N_D en la capa ventana AZO, esto se debe a que al tener una doble capa absorbente en este caso el $FeSi_2$ con un band gap de 0.87 eV absorbe los fotones que pasan a través de las capas AZO y CdTe generando pares e-h que son separados por el campo eléctrico, sin que esto sea afectado por el comportamiento de la zona de agotamiento determinado por N_D .

El FF tiene un ligero incremento al pasar de 82.67 a 82.99% al incrementar N_D de 10^{15} a 10^{18} cm^{-3} (Fig. 4.27c), ya que se tiene un pequeño aumento en el voltaje máximo de la celda (V_{max}) de 0.550 a 0.553 V generando que la potencia máxima (P_{max}) (Ec. 2.20) del dispositivo simulado aumente ligeramente con el aumento de N_D . Dado al ligero aumento de FF, el PCE tiene un pequeño incremento de 0.14% (Fig. 4.27d).

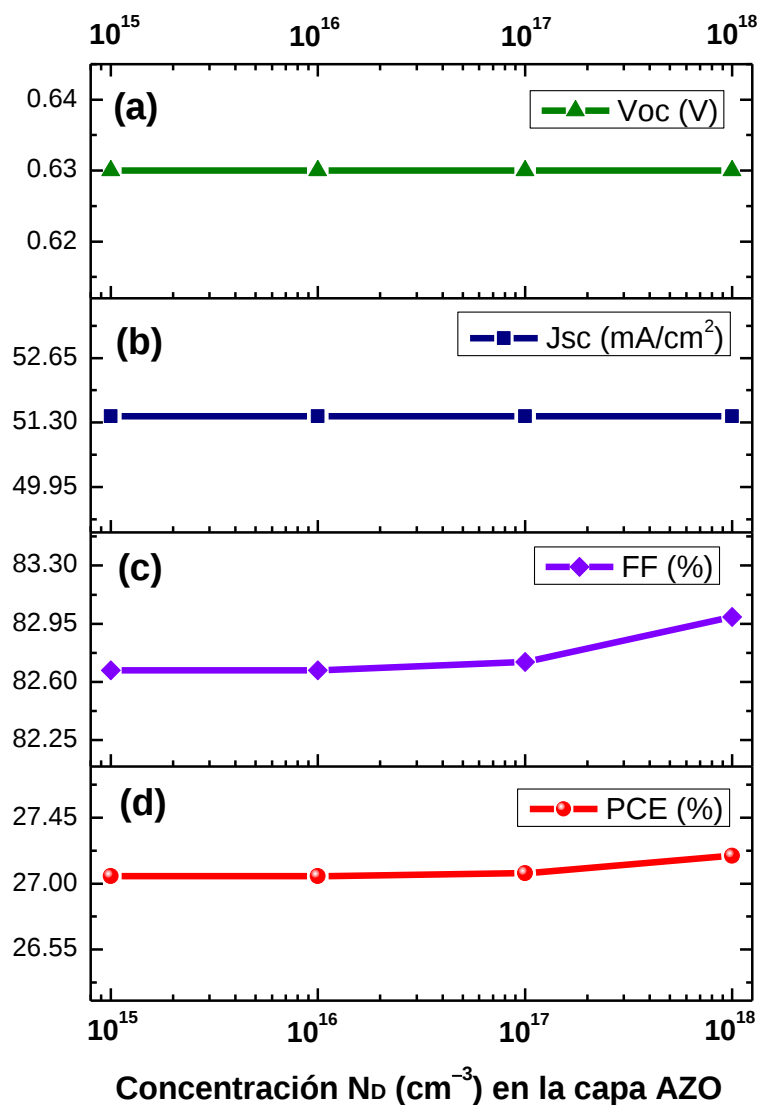


Figura 4.27. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores donadores (N_D) en la capa ventana AZO en la estructura Al/AZO/CdTe/FeSi₂/Ni.

4.4.7 Efecto del espesor de la capa absorbente de FeSi₂

Para entender la influencia del espesor de la capa absorbente de FeSi₂ sobre el rendimiento fotovoltaico, el espesor se varió de 0.2 a 1 μm . Los demás parámetros se mantuvieron constantes.

En la figura 4.28a se puede observar que cuando se incrementa el espesor de la película de FeSi₂ no afecta a el V_{oc} el cual tienen un comportamiento constante. Sin

embargo, J_{sc} incrementa de 43.41 a 53.41 mA/cm^2 (Fig. 4.28b) al incrementar el espesor de la capa FeSi_2 de 0.2 A $1\mu\text{m}$, ya que, al aumentar el grosor de la película, el camino óptico se incrementa, por lo que la probabilidad de que los fotones incidentes sean absorbidos es mayor [3].

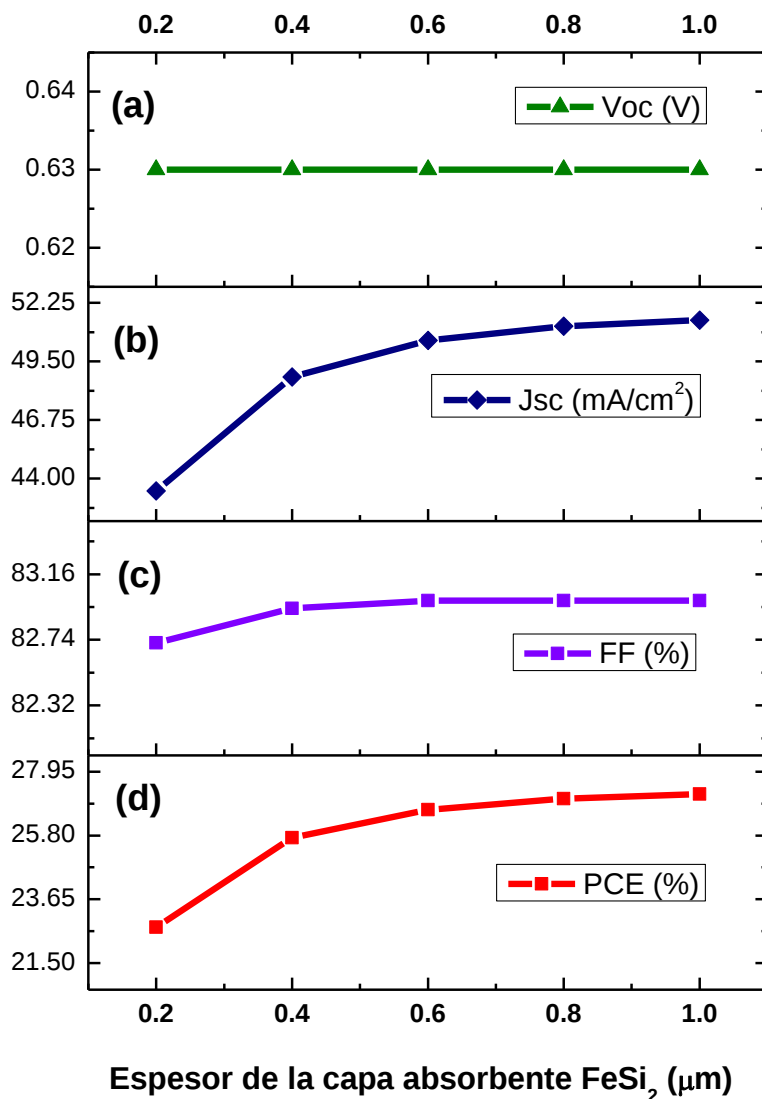


Figura 4.28. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores en la capa absorbente FeSi_2 .

El FF tiene un ligero incremento al pasar de 82.72 a 82.99% como se puede observar en la figura 4.28c. Por otra parte, el PCE aumenta de 22.71 a 27.19% al incrementar el espesor de la capa de FeSi_2 de 0.2 a $1\mu\text{m}$ (Fig. 4.28d), determinado principalmente por el comportamiento de J_{sc} , como se describe en la ecuación 2.30.

4.4.8 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la capa absorbente FeSi_2

Para analizar el efecto que la concentración de portadores aceptores (N_A) de la capa absorbente FeSi_2 tiene sobre el rendimiento del dispositivo, N_A se varió de 10^{14} a 10^{18} cm^{-3} . Los demás parámetros se mantuvieron constantes durante las simulaciones.

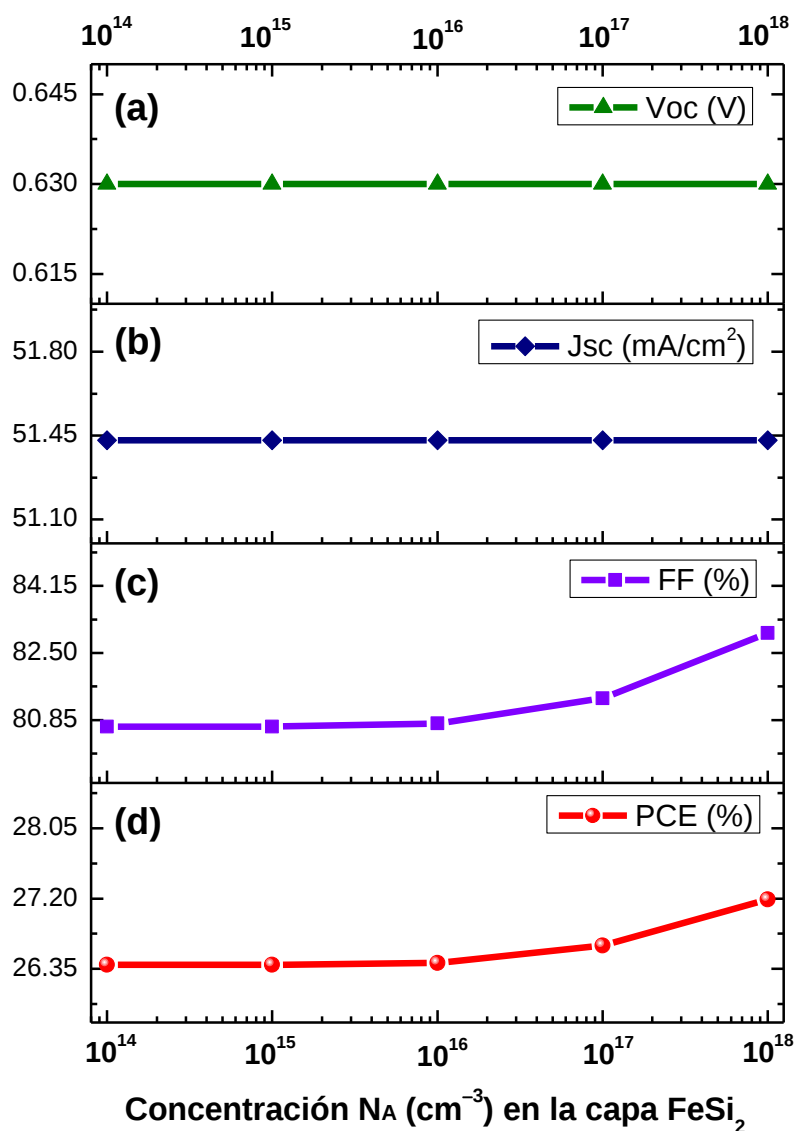


Figura 4.29. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa absorbente FeSi_2 .

El V_{oc} tiene un comportamiento prácticamente constante (Fig. 4.29a) al tener un ligero incremento de 1mV al incrementar N_A , ya que la densidad de electrones en equilibrio en la región p (n_{p0}) disminuye al incrementar N_A , por lo que J_0 disminuirá (Ec. 4.2), provocando así el ligero incremento en V_{oc} . El J_{sc} tienen un comportamiento invariable al incrementar la concentración de portadores en la capa $FeSi_2$ (Fig. 4.29b) dado que una mayor o menor absorción de los fotones incidentes está determinado por el espesor de la capa $FeSi_2$, como se concluyó en la sección anterior.

El FF aumenta de 80.69 a 82.99% al incrementar N_A de 10^{14} a 10^{18} cm^{-3} cómo se puede observar en la figura 4.29c, ya que la potencia máxima de la celda simulada aumenta (Ec. 2.20) debido a que V_{max} y J_{max} incrementan de 0.54 a 0.55 V y 48.21 a 49.20 mA/cm^2 respectivamente. El incremento de V_{max} es debido al ligero incremento de V_{oc} (Ec. 4.3), mientras que J_{max} aumenta debido al comportamiento de V_{max} (Ec.2.27). Además, el PCE incrementa de 26.40 a 27.19% ya que al tener una mayor concentración de huecos entre la capa de CdTe y el contacto trasero facilita el flujo de los electrones desde el contacto trasero hacia los huecos de la película de $FeSi_2$ y la de CdTe mejorando así la extracción de los portadores del contacto posterior.

4.4.9 Efecto de la densidad de defectos (N_t) en la interfaz CdTe/ $FeSi_2$

Para comprender el efecto de la densidad de estados (N_t) de la interfaz $FeSi_2/CdTe$, N_t se varió de 10^{10} a 10^{17} cm^{-2} , mientras que los demás parámetros se mantuvieron constantes durante la simulación.

La figura 4.30 muestra que el rendimiento de la celda solar se ve afectado negativamente por una mayor densidad de defectos en la interfaz. El V_{oc} tiene una disminución considerable al aumentar la densidad de defectos en la interfaz (Fig. 4.30a), disminuyendo de 0.63 a 0.34 V, ya que al tener un valor mayor de N_t , habrá una mayor probabilidad de recombinación, por lo que los tiempos de recombinación disminuirán, provocando que la longitud de difusión de los portadores sea menor,

por lo cual, J_0 tendrá un incremento (Ec. 4.2), afectando negativamente a V_{oc} (Ec. 2.22).

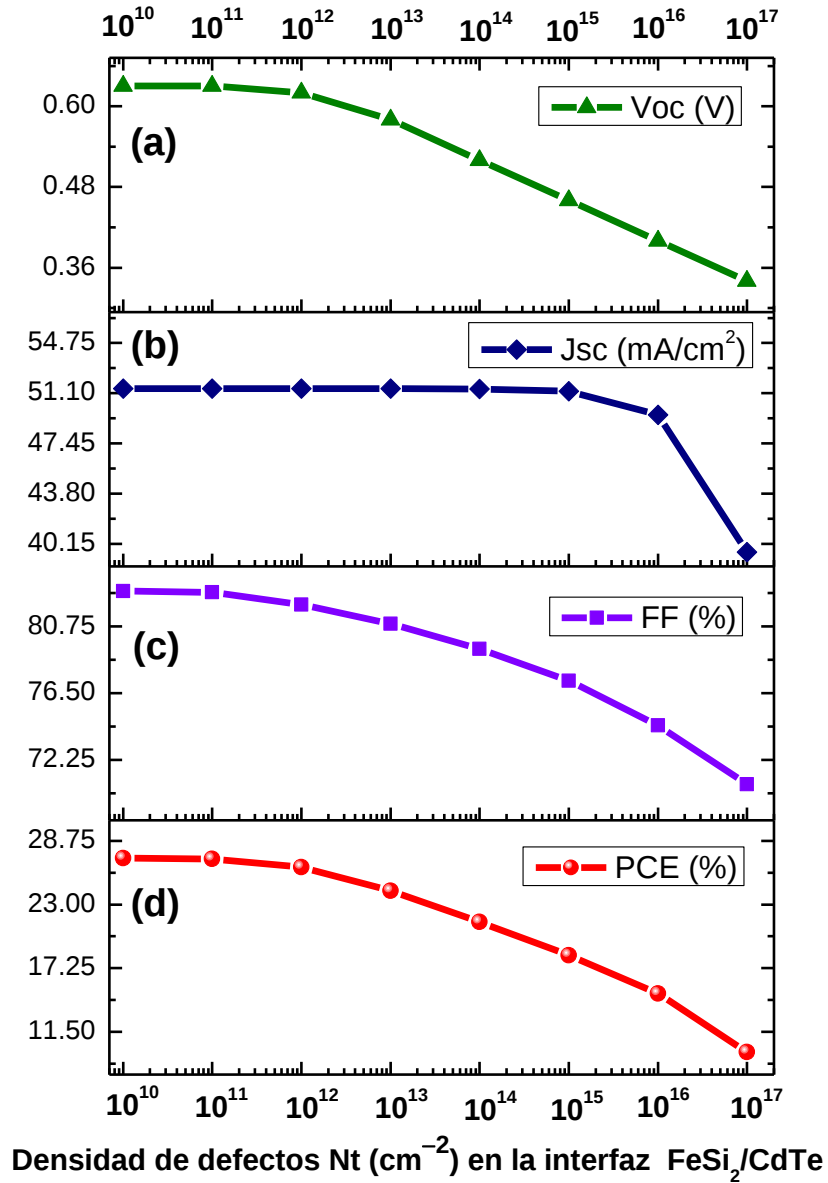


Figura 4.30. Cambio en (a) PCE, (b) FF, (c) J_{sc} y (d) V_{oc} para diferentes concentraciones de defectos (N_t) en la interfaz CdTe/FeSi₂.

Por su parte, J_{sc} también mostro una disminución considerable, disminuyendo 11.9 mA/cm^2 al aumentar la densidad de defectos de 10^{10} a 10^{17} cm^{-2} , ya que al tener mayor densidad de defectos tiene mayor número de centros de recombinación [71], lo que genera que la sea menor la probabilidad de que los portadores fotogenerados

sean separados, observándose un descenso abrupto al tener un N_t de 10^{17} cm^{-2} (Fig.4.30b), ya que probablemente al llegar a esta concentración de defectos en la interfaz, supera a la tasa de generación de pares e-h, por lo cual, se tiene este descenso en J_{sc} .

Al aumentar N_t existe mayor probabilidad de que los portadores fotogenerados se recombinen, provocando que V_{max} disminuya de 0.55 a 0.27 V y J_{max} disminuya de 49.20 a 35.45 mA/cm^2 , por lo tanto, la potencia máxima de la celda disminuye y, en consecuencia, el FF disminuye (Ec. 2.20) de 82.99 a 70.7% incluso si J_{sc} y V_{oc} disminuyen. El PCE disminuye de 27.9 a 9.68% a medida que aumenta N_t (Fig.4.30d), provocado por la disminución de V_{oc} , J_{sc} y FF.

4.5 Resumen de resultados de la simulación de la celda solar optimizada de heterounión AZO/CdTe

Con base en los resultados obtenidos en las simulaciones realizadas anteriormente, donde se analizó la influencia del espesor y concentración de portadores las capas AZO, CdTe, NiO y FeSi_2 en el rendimiento del dispositivo, se encontraron los parámetros óptimos para obtener la mayor eficiencia teórica posible en la celda solar de heterounión AZO/CdTe. En la tabla 4.5 se concentran los resultados optimizados de V_{oc} , J_{sc} , FF y PCE, mostrando el espesor y concentración de portadores necesarios para obtener la mayor eficiencia posible en las estructuras de la celda solar AZO/CdTe analizadas en este capítulo.

Tabla 4.5 Concentrado de resultados optimizados de la celda solar AZO/CdTe.

Estructura	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm^2)	FF (%)	PCE (%)	CdTe		AZO		NiO		FeSi_2	
					Espesor (μm)	N_A (cm^{-3})	Espesor (μm)	N_D (cm^{-3})	Espesor (μm)	N_A (cm^{-3})	Espesor (μm)	N_A (cm^{-3})
Al/AZO/CdTe/NiO/Ni	0.74	26.15	72.83	14.2	2	10^{15}	0.01	10^{18}	0.02	10^{19}	N/A	N/A
Al/AZO/CdTe-ACT/NiO/Ni	0.74	30.73	72.62	16.49	2	10^{15}	0.01	10^{18}	0.02	10^{19}	N/A	N/A
Al/AZO/CdTe/ FeSi_2 /Ni	0.63	51.43	82.99	27.19	0.3	10^{15}	0.01	10^{18}	N/A	N/A	1	10^{18}
					Interfaz				Contactos			
					AZO/CdTe		10^{12} cm^{-2}		Frontal		Al (4.2 eV)	
					CdTe/ FeSi_2		10^{10} cm^{-2}		Posterior		Ni (5.15 eV)	

CAPÍTULO 5

Resultados de simulación de la celda solar de heterounión WO_3/CdTe

5.1 Simulación de la heterounión WO_3/CdTe

En esta sección se presenta la simulación de la heterounión WO_3/CdTe con el programa SCAPS-1D, así como también se analizan los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas. En las simulaciones llevadas a cabo se usaron parámetros tales como la concentración de portadores y espesores tanto de la capa n y p, temperatura de operación, así como resistencias en serie y paralelo, las cuales se fueron modificando para analizar la influencia de estos parámetros en el comportamiento de la heteroestructura, con el objetivo de optimizar la celda solar formada por la heterounión WO_3/CdTe .

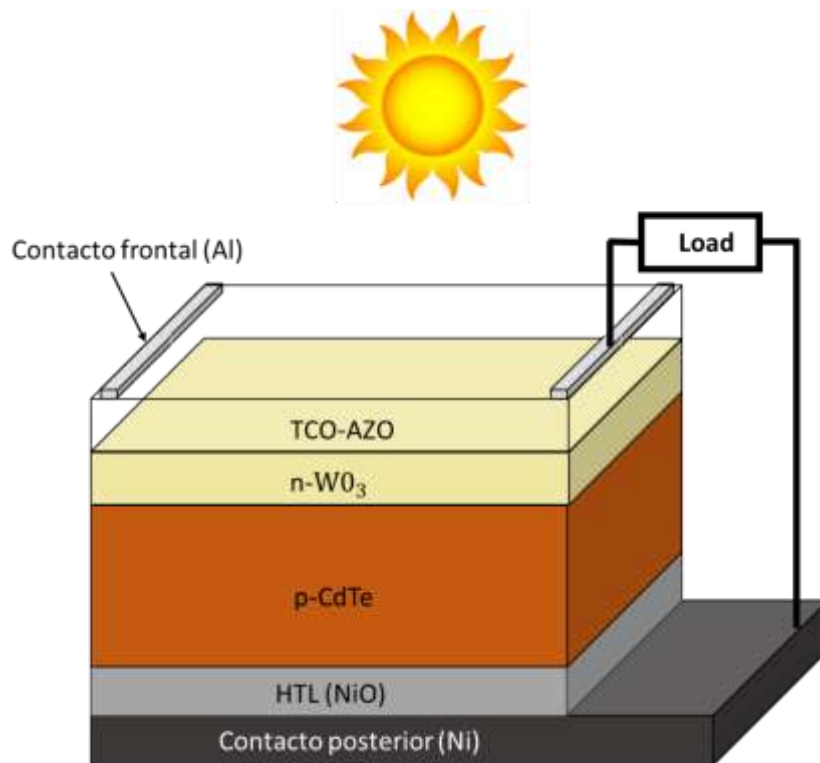


Figura 5.1. Representación esquemática de la estructura $\text{Al}/\text{AZO}/\text{WO}_3/\text{CdTe}/\text{NiO}/\text{Ni}$ simulada.

La estructura de la celda solar (Al/AZO/WO₃/CdTe/NiO/Ni) simulada se presenta esquemáticamente en la figura 5.1, donde la capa tipo n de óxido de zinc dopado con aluminio (AZO) se utiliza como TCO, la capa tipo n de WO₃ se usa como capa ventana, la capa tipo p de CdTe es la capa absorbente, la capa p de óxido de níquel (NiO) se ha introducido como una capa de transporte de huecos (HTL), el aluminio (Al) se incorpora como contacto frontal y el níquel (Ni) se utiliza como contacto tarsero. Se introdujo una capa HTL de NiO por los motivos que se explican en la sección 4.1

5.1.1 Diagrama de bandas de la heterounión WO₃/CdTe

Se realizó el diagrama de bandas de la estructura simulada con el mismo procedimiento presentado en la sección 4.1.1. El diagrama de bandas se construyó considerando al nivel de vacío como referencia como se observa en la figura 5.2. La diferencia entre las bandas de conducción (ΔE_c) y bandas de valencia (ΔE_v) es de 0.27 y 1.93 eV respectivamente. Se calculó también la región de carga espacial o región de agotamiento (W), tanto para la región n (x_n) y p (x_p) con las ecuaciones 4.4 a 4.6 respectivamente, obteniendo un espesor de la zona de agotamiento en la región n de 0.14 nm, para la región p de 731 nm por lo que el espesor de la región de carga espacial total es de 731.14 nm.

La barrera de potencial (V_{bi}) es de 1.03 V la cual se calculó a través de las ecuaciones 4.3, y 4.7 a 4.9. La barrera de potencial presente en la región n es de $V_{bin} = 0.000193$ V y en la región p es de $V_{bip} = 1.0277$ V, calculado a través de las ecuaciones 4.7 y 4.8 respectivamente. Por otro lado, para la interfaz NiO/CdTe se tiene un ΔE_c de 2.28 eV y un ΔE_v de 0.51 eV, los cuales se calcularon a través de las fórmulas 4.1 y 4.2 respectivamente.

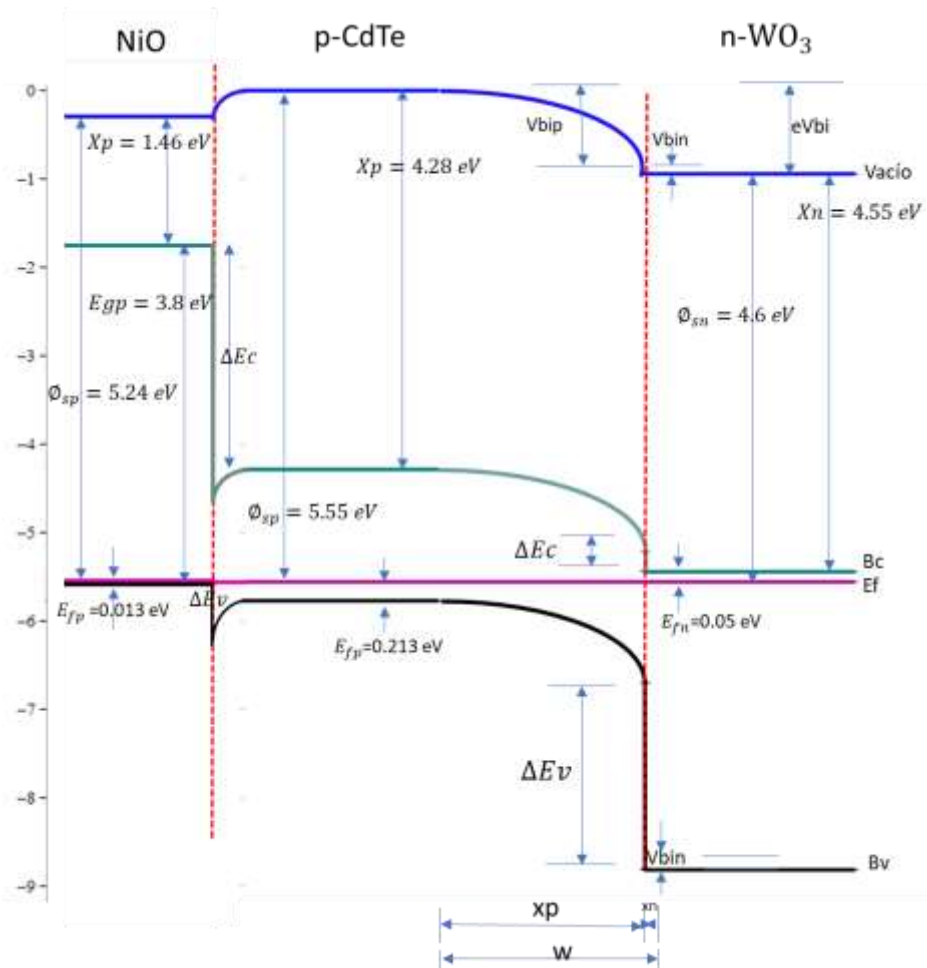


Figura 5.2. Diagrama de bandas de la heteroestructura NiO/CdTe/WO₃.

5.1.2 Parámetros de simulación de la heterounión WO₃/CdTe

En la figura 5.3 se puede observar la interfaz Solar Cell Definition, ya con la estructura definida de la celda solar de la heterounión estudiada, se puede observar en rojo a la derecha la capa P (CdTe), en la capa roja izquierda la capa HTL NiO, la capa n o capa ventana (WO₃) en azul izquierda, y la capa TCO (AZO) en azul derecha, los contactos: posterior (níquel) y frontal (aluminio), así como el punto de iluminación.

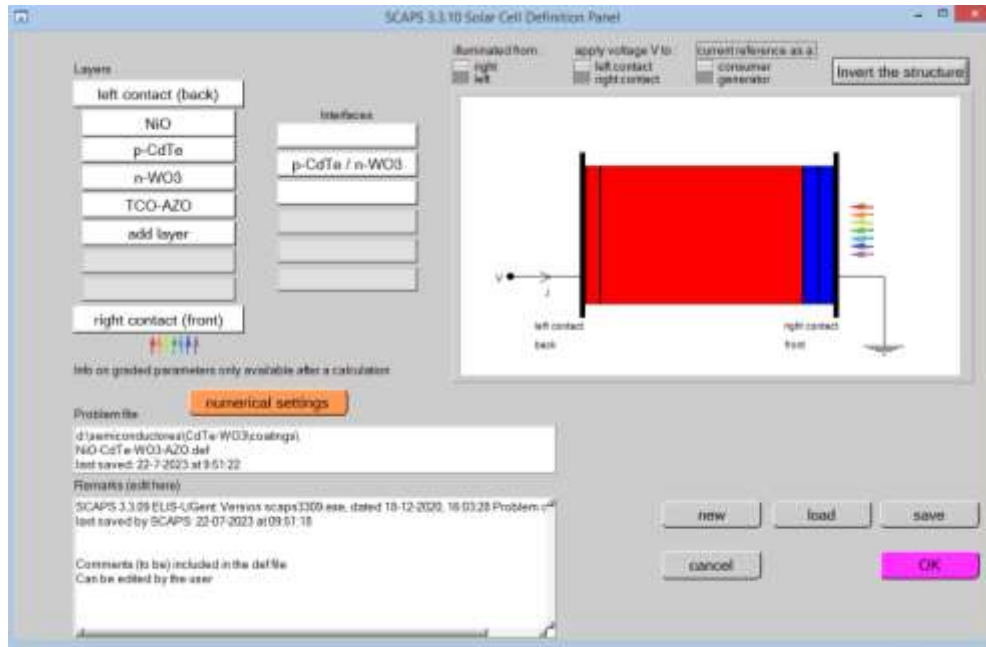


Figura 5.3. Panel de definición de celdas solares de SCAPS-1D para la estructura Al/AZO/WO₃/CdTe/NiO/Ni

Antes de realizar el proceso de simulación, se ingresan algunos parámetros físicos en el panel de configuración de las capas (figura 5.4), tales como espesor, banda prohibida (E_g), Afinidades electrónicas (X), permitividad relativa ϵ_r , densidad de estados (N_c , N_v), movilidad del portador (μ), defectos cristalinos del material, densidad de defectos en los materiales, entre otros.



Figura 5.4. Panel de propiedades de la capa WO₃.

Estos parámetros de entrada se muestran en las Tabla 5.1 y 5.2, los cuales se seleccionaron principalmente en función de valores reportados en la literatura o se estimaron en rangos razonables. Las propiedades eléctricas del contacto posterior y frontal se describen en la tabla 4.2.

Tabla 5.1. Parámetros usados para simular la estructura (Al/AZO/WO₃/CdTe/NiO/Ni).

Parámetros	CdTe [3, 22, 67-69]	WO ₃ [71, 84-85]	NiO [22,71,83]	AZO [83, 86]
Espesor (μm)	0.5-3	0.01-0.15	0.020	0.050
Bandgap, E_g (eV)	1.49	3.15	3.8	3.3
Afinidad electrónica, χ (eV)	4.28	4.55	1.46	4.55
Permitividad relativa, ϵ_r	9.4	10	10	8.12
Densidad efectiva de estados BC, N_c (cm ⁻³)	8×10^{17}	4.2×10^{18}	2.8×10^{19}	4.1×10^{18}
Densidad efectiva de estados BV, N_v (cm ⁻³)	1.8×10^{19}	9×10^{18}	1×10^{19}	8.2×10^{18}
Movilidad de electrones, μ_n (cm ² /Vs)	500	20	12	100
Movilidad de huecos, μ_p (cm ² /Vs)	60	10	2.8	20
Velocidad térmica de electrones (cm/s)	10^7	10^7	10^7	2.2×10^7
Velocidad térmica de huecos (cm/s)	10^7	10^7	10^7	1.5×10^7
Concentración de donadores, N_D (cm ⁻³)	0	$10^{13} - 10^{19}$	0	10^{21}
Concentración de aceptores, N_A (cm ⁻³)	$10^{13} - 10^{17}$	0	10^{21}	0
Densidad de defectos, N_t (1/cm ³)	10^{15}	10^{12}	10^{14}	5×10^{14}
Tipo de defectos	aceptor	donador	aceptor	aceptor

Tabla 5.2. Parámetros de simulación para interfaz y contactos de la celda solar

<i>Densidad de defectos en la interfaz [84, 85]</i>	
WO ₃ /CdTe	$10^{10} - 10^{17} \text{ cm}^{-2}$
Tipo de defecto	Aceptor
Sección transversal de captura de electrones/huecos	10^{-10} cm^{-2}

5.2 Resultados de las Simulaciones de la heterounión WO₃/CdTe

Definidos los parámetros físicos de todas las capas se analizó la influencia de ciertos parámetros físicos en el rendimiento de la celda solar simulada en este capítulo. Estos parámetros físicos son los espesores y concentración de portadores de las capas n y p, la temperatura de funcionamiento y la resistencia en serie y paralelo. Las simulaciones se llevaron a cabo con la misma metodología descrita en la sección 4.2. Los parámetros de salida analizados fueron el V_{oc} , J_{sc} , FF, PCE y QE. Se usaron las mismas condiciones de iluminación, temperatura, y tamaño de malla descritos en la sección 4.2.

5.2.1 Efecto del espesor de la capa absorbente CdTe

En esta sección se estudió el efecto del espesor de la capa absorbente CdTe en el rendimiento fotovoltaico, para lo cual se varió el espesor de la capa de CdTe de 0.5 a 3 μm . Se definió este rango de espesores ya que el comportamiento del dispositivo se estabiliza a partir de 1.5 μm de espesor. Los demás parámetros se mantuvieron constantes durante la simulación.

El comportamiento del V_{oc} se mantiene prácticamente constante al variar el espesor de la capa absorbente (Fig. 5.5a), teniendo un muy ligero descenso de 10 mV a medida que el espesor aumenta de 0,5 a 1 μm . Este comportamiento se puede explicar a partir de la ecuación 2.22, dado que J_{sc} permanece constante a partir de 1,5 μm y la densidad de corriente de saturación (J_0) no se ve afectada por el aumento en el espesor de la capa absorbente.

En la figura 5.5b se puede observar que J_{sc} tiene un valor de 24.35 mA/cm^2 a un espesor de 0.5 μm , y alcanza un valor máximo de 26.6 mA/cm^2 a partir de 1.5 μm , ya que al tener una película más gruesa tiene mayor absorción [3] porque la probabilidad de que los fotones sean absorbidos es mayor, debido a una trayectoria óptica más larga por el incremento del espesor de la película.

El FF es inversamente proporcional a V_{oc} y J_{sc} (Ec.2.20), y dado el comportamiento de J_{sc} , FF disminuye de 78.5 a 76.62% al aumentar el espesor de la capa CdTe de 0.5 a 3 μm (Fig. 5.5 c). En la figura 5.5d se observa que PCE aumenta de 14.74 a 15.67% cuando aumenta el espesor de la capa absorbente, ya que se produce una mayor generación de pares electrón-hueco dado por una mayor capacidad de absorción al tener una capa de CdTe más gruesa.

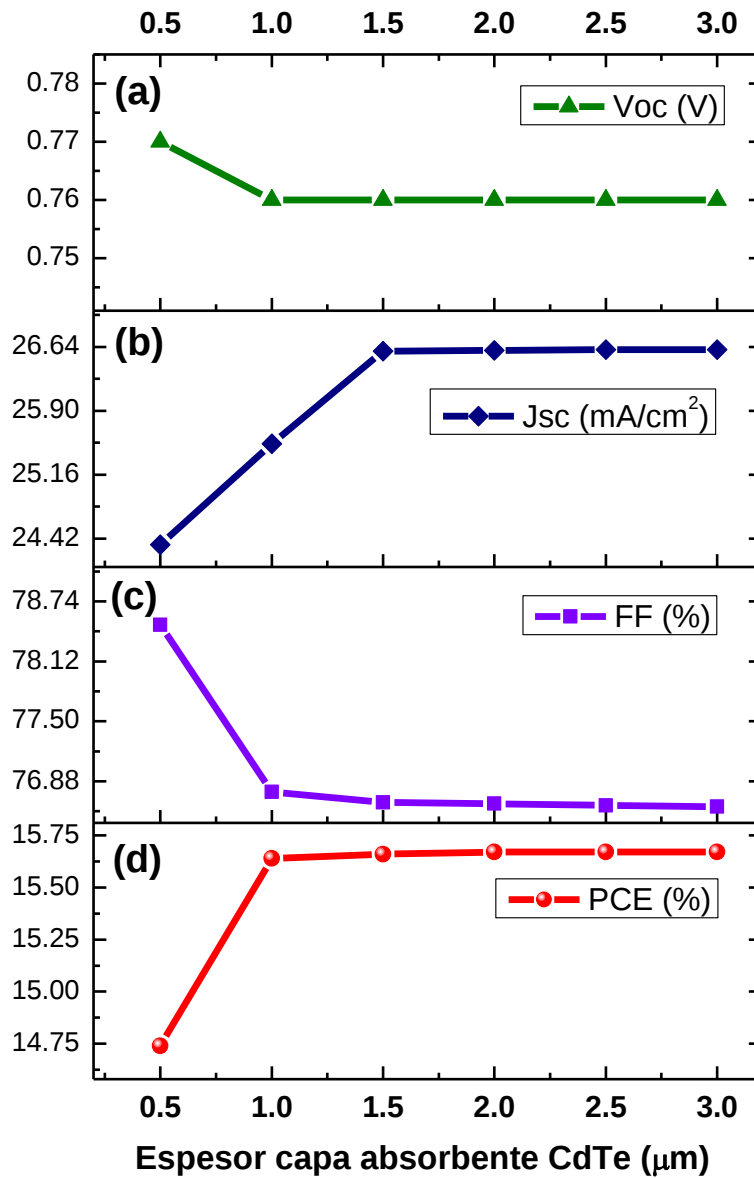


Figura 5.5. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa absorbente CdTe en la heterounión WO_3/CdTe .

5.2.2 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la capa absorbente CdTe

Para estudiar el efecto de la concentración de portadores aceptores (N_A) de la capa absorbente sobre el rendimiento del dispositivo simulado, N_A se vario de 10^{13} a 10^{17} cm^{-3} . Se usó el mismo rango de N_A definido en la sección 4.2.2.

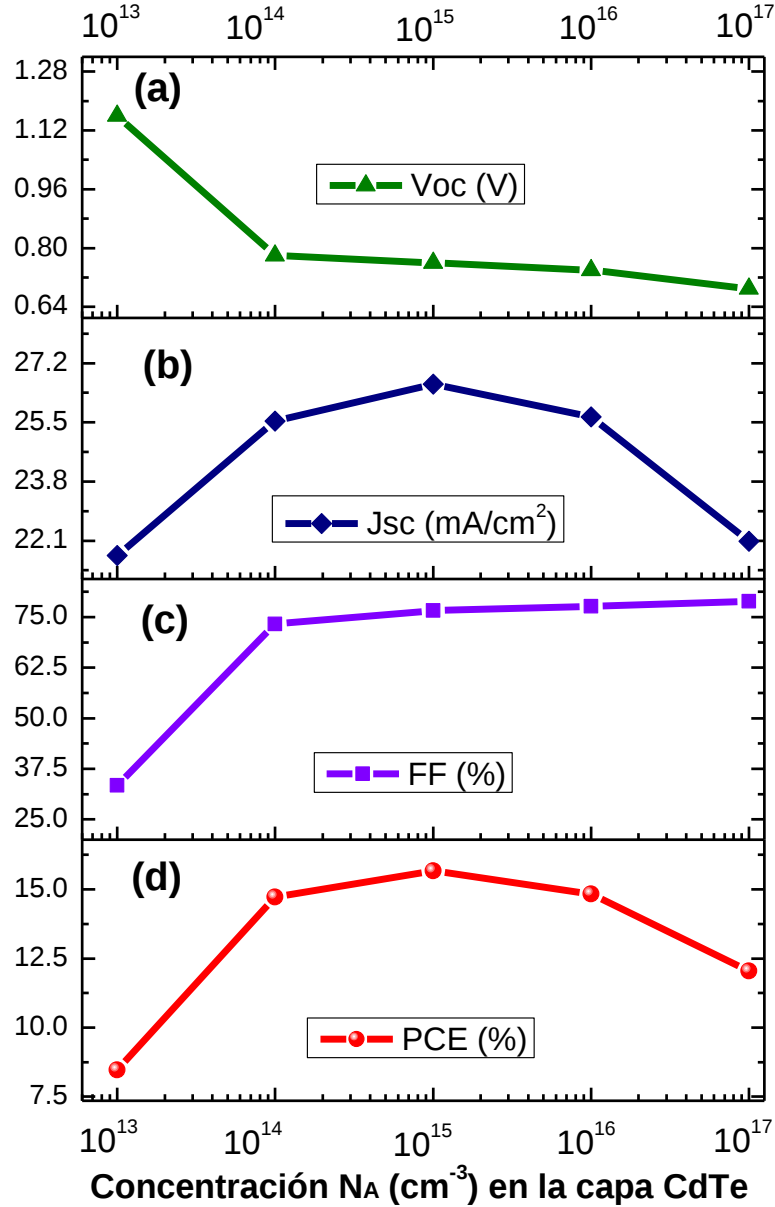


Figura 5.6. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa absorbente CdTe en la heterounión WO_3/CdTe .

El V_{oc} disminuye de 1.16 a 0.69 V cuando N_A aumenta de 10^{13} a 10^{17} cm^{-3} (Fig. 5.6a), esto se debe a que la movilidad de los portadores disminuye cuando N_A aumenta [76], lo que reduce la longitud de difusión del portador (L_n) y la densidad de electrones en equilibrio en el lado p (n_{p0}) aumentando así la corriente de saturación J_0 , como se describe en la ecuación 4.2.

La Figura 5.6b muestra el comportamiento de J_{sc} en función de la concentración de portadores de N_A en la capa absorbente, el cual aumenta de 21.67 a 26.6 mA/cm² a medida que N_A aumenta de 10^{13} a 10^{15} cm⁻³, ya que al tener una mayor concentración de portadores mejora la conductividad del material, favoreciendo así una mejor extracción del portador del contacto trasero, sin embargo, J_{sc} disminuye al superar un N_A de 10^{15} cm⁻³, disminuyendo su valor a 22.08 mA/cm² con un N_A de 10^{17} cm⁻³, ya que el nivel de Fermi de los huecos en el lado p disminuye, aumentando así la barrera de potencia V_{bi} , lo que dificulta que los portadores fluyan a través de la unión.

J_0 incrementa al tener un mayor N_A , lo que implica que J_{max} aumente su valor (Ec. 2.27), por lo que se tendrá un mayor P_{max} , aumentando el FF de 33.44 a 78.85% (Fig. 5.6c) a medida que N_A aumenta de 10^{13} a 10^{17} cm⁻³. PCE tiene su valor máximo de 15.67% a un N_A de 10^{15} cm⁻³ debido al aumento de J_{sc} y FF (Fig. 5.6d), sin embargo, PCE disminuye cuando N_A supera los 10^{15} cm⁻³, esto debido a la disminución de J_{sc} .

5.2.3 Efecto del espesor de la capa ventana WO₃

El efecto del espesor de la capa ventana WO₃ sobre el rendimiento del dispositivo se analizó variando el espesor de esta capa de 10 a 150 nm. Los demás parámetros de simulación se mantuvieron constantes.

El V_{oc} permanece prácticamente constante (Fig. 5.7a) a medida que aumenta el espesor de la capa de la ventana, ya que al tener una densidad de defectos N_t de 10^{12} cm⁻³ en la capa WO₃ se tiene una longitud de difusión de los portadores de 7.2 μ m por lo que se tiene una menor probabilidad de recombinación y en consecuencia (Ec. 4.2) se tiene un valor bajo de J_0 (4.8×10^{-12} mA/cm²). Este valor de J_0 y la pequeña disminución de J_{sc} (Fig. 5.7b) mantienen prácticamente constante el valor de V_{oc} al incrementar el espesor de la capa ventana, permitiendo así que la longitud de difusión de los portadores mantenga la separación de cargas.

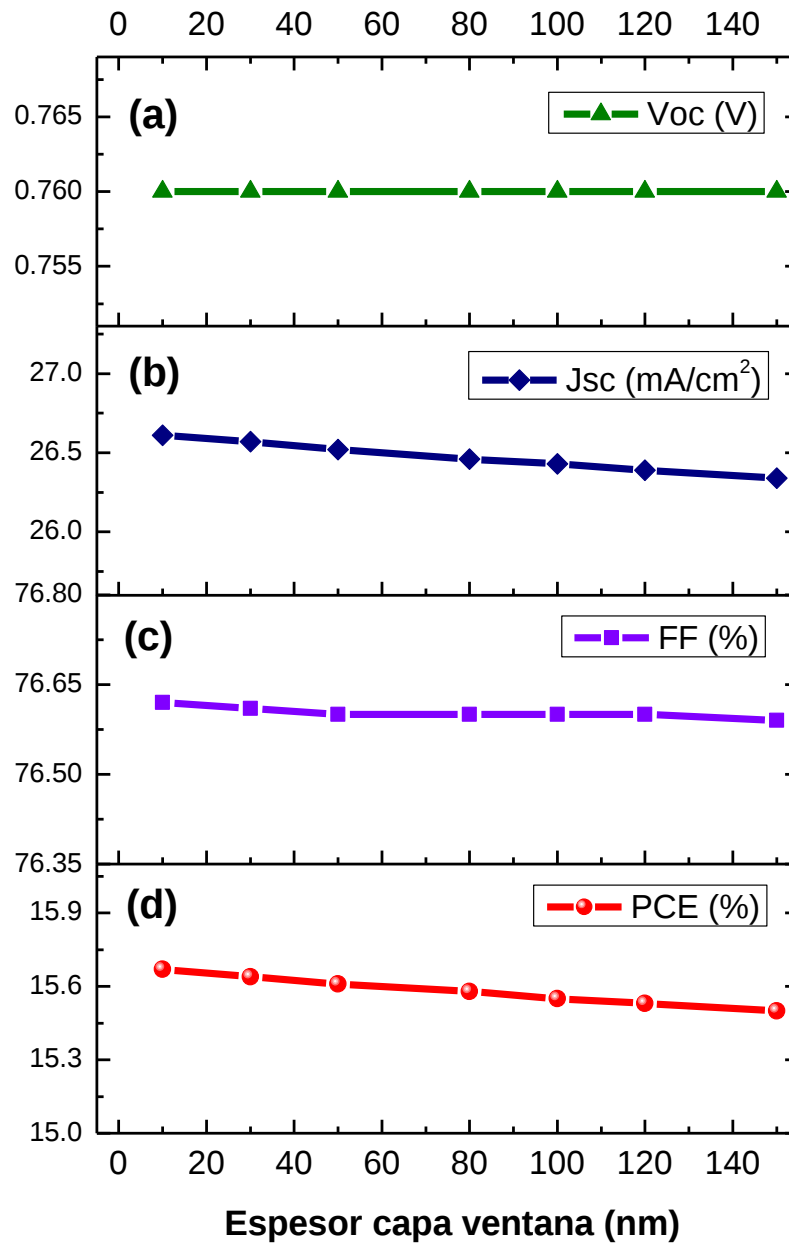


Figura 5.7. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa ventana WO_3 en la heterounión WO_3/CdTe .

En la figura 5.7b se puede observar que J_{sc} disminuye de 26.61 a 26.34 mA/cm^2 cuando el espesor de la capa de ventana aumenta de 10 a 150 nm, ya que al tener un mayor espesor en esta capa se favorece una mayor absorción de los fotones incidentes, por lo que habrá una absorción parasitaria en esta capa, transmitiendo

una menor cantidad fotones a la capa absorbente de CdTe, por lo que se tiene una menor generación de pares e-h, disminuyendo así J_{sc} . El FF tiene una pequeña disminución como se puede observar en la figura 5.7c, cuando aumenta el espesor de la capa de la ventana, pasando de 76.62 a 76.59 %. Dado que J_{sc} y FF disminuyen, el PCE tiene un pequeño decremento al aumentar el espesor de la capa de la ventana, disminuyendo de 15.67 a 15.5% (Fig. 5.7d).

5.2.4 Efecto de la concentración de portadores N_D en la capa ventana WO_3

El comportamiento de la celda solar simulada al variar la concentración de portadores N_D de 10^{13} a 10^{19} cm^{-3} en la capa n (WO_3) se muestra en la figura 5.8. De igual manera, los demás parámetros se mantuvieron constantes durante la simulación.

En la figura 5.8a se muestra el comportamiento de V_{oc} que aumenta de 0.59 a 0.76 V al aumentar N_D de 10^{15} a 10^{19} cm^{-3} ya que al tener una mayor concentración N_D , la región de carga espacial incrementa su espesor en la capa absorbente, lo que favorece una mayor separación de portadores foto generados. J_{sc} aumenta de 25.6 a 27.01 mA/cm^2 , cuando N_D aumenta de 10^{13} a 10^{16} cm^{-3} (Fig. 5.8b), esto también se debe al aumento de la región de carga espacial en la capa absorbente a medida que N_D aumenta, favoreciendo un aumento en el número de portadores fotogenerados recolectados por los contactos, sin embargo, al aumentar N_D a 10^{19} cm^{-3} , J_{sc} disminuye a 26.61 mA/cm^2 , ya que el nivel de Fermi en la capa ventana aumenta, provocando que la barrera de potencial (V_{bi}) aumente, lo que dificulta el flujo de portadores.

El FF aumenta de 72.7 a 76.62% (Fig. 5.8c) cuando N_D aumenta de 10^{13} a 10^{19} cm^{-3} , esto se debe (Ec. 2.20) a que aumenta el voltaje máximo de la celda (V_{max}) de 0.6 a 0.66 V generando que la potencia máxima (P_{max}) del dispositivo simulado aumente con el aumento de N_D . En la figura 5.8d se puede observar que PCE aumenta a medida que aumenta N_D , pasando de 11.11 a 15.67 %, ya que los electrones fotogenerados en la capa absorbente tendrán mayor probabilidad de atravesar la unión y ser recolectados por el contacto frontal.

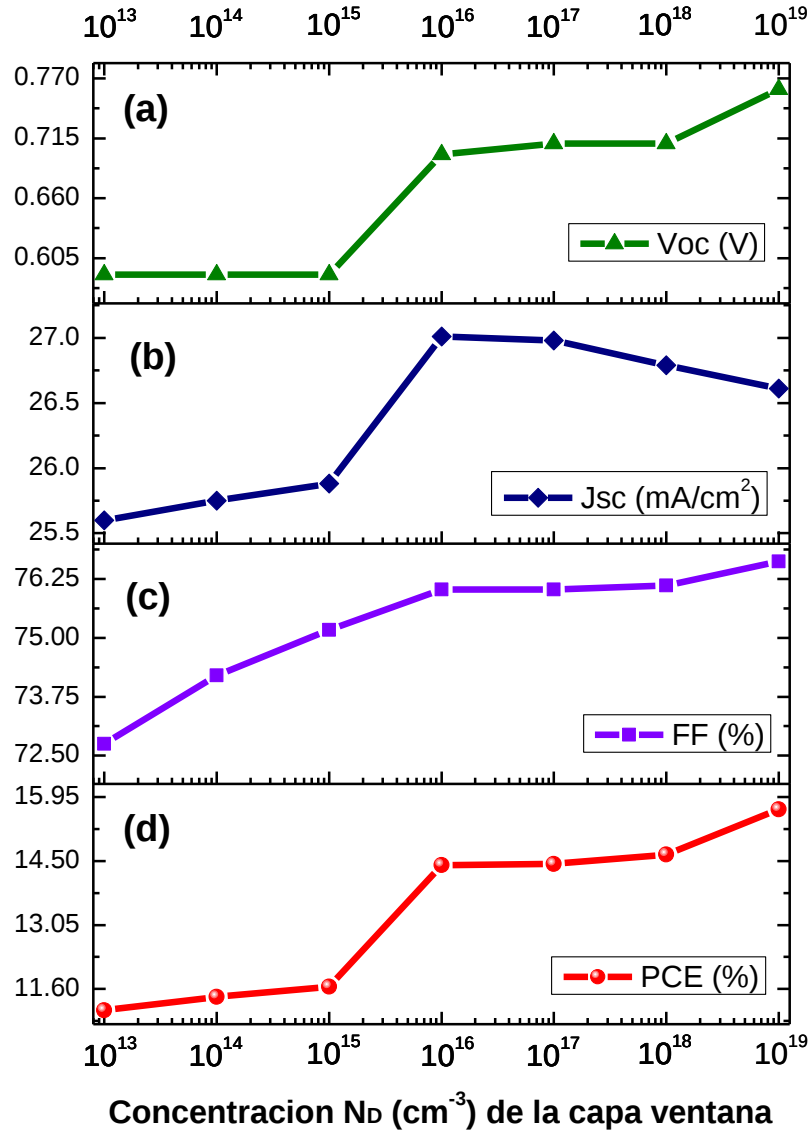


Figura 5.8. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores donadores (N_D) en la capa ventana WO_3 en la heterounión WO_3/CdTe .

5.2.5 Efecto de la densidad de defectos (N_t) en la interface WO_3/CdTe

Para comprender el efecto de la densidad de defectos en la interfaz WO_3/CdTe , N_t se varió de 10^{10} a 10^{17} cm^{-2} , los demás parámetros se mantuvieron constantes durante la simulación.

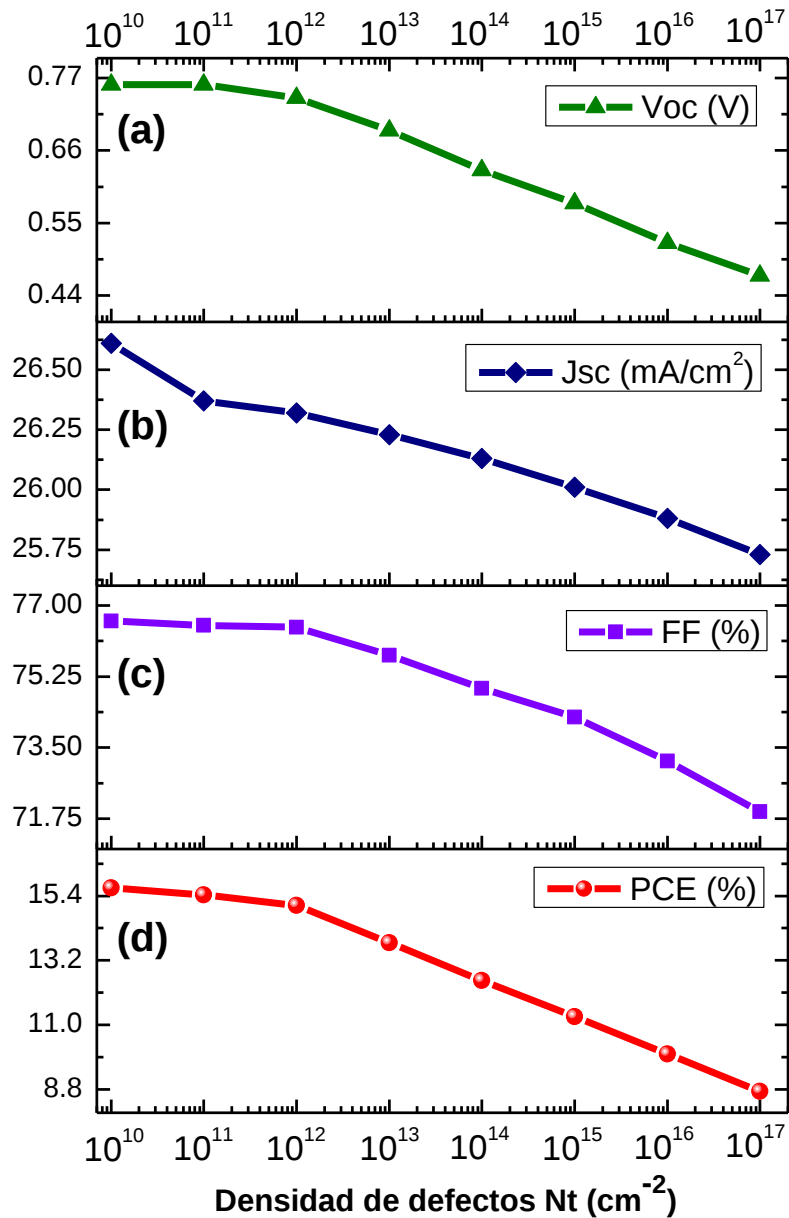


Figura 5.9. Efecto de la densidad de defectos (N_t) de la interface WO_3/CdTe en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE.

En la figura 5.9 se puede observar que, al tener una mayor densidad de defectos en la interfaz, el rendimiento de la celda solar se ve afectado negativamente. El V_{oc} es el que tiene una mayor disminución al aumentar la densidad de defectos en la interfaz (Fig. 5.9a), disminuyendo de 0.76 a 0.47 V, ya que al tener un mayor N_t , existe una mayor probabilidad de recombinación, por lo que la longitud de difusión

de los portadores será menor, incrementando J_0 , por lo que el V_{oc} se ve afectado negativamente y considerando también que (Ec. 2.22) J_{sc} tiene una disminución de 0.88 mA/cm^2 al aumentar la densidad de defectos de 10^{10} a 10^{17} cm^{-2} . El comportamiento de J_{sc} es debido a un mayor incremento en los centros de recombinación, lo cual, reduce la probabilidad de que los portadores fotogenerados sean recolectados por los contactos.

Al aumentar N_t se tiene una menor probabilidad de que los portadores fotogenerados sean recolectados debido a una mayor tasa de recombinación en la interfaz de la unión, provocando que V_{max} disminuya de 0.66 a 0.39 V, por lo tanto, la P_{max} de la celda disminuye afectando negativamente al FF, el cual disminuye de 76.62 a 71.92% (Fig. 5.9c) incluso si J_{sc} y V_{oc} disminuyen. El PCE disminuye del 15.67 al 8.73 % al aumentar N_t debido principalmente a la disminución de V_{oc} .

5.2.6 Efecto de la temperatura de operación en η , V_{oc} , J_{sc} y FF

Para estudiar el comportamiento de la celda solar en función de su temperatura de operación, esta se varió de 270 a 320 K, ya que las celdas solares en sus aplicaciones pueden estar expuestas en este rango de temperatura al aire libre. Los demás parámetros analizados se mantuvieron constantes en sus valores optimizados.

El valor del V_{oc} disminuye en 0.09 V cuando la temperatura de funcionamiento aumenta en 50 K, como se puede observar en la figura 5.10a. Esta ligera reducción puede deberse a que a medida que aumenta la temperatura, aumenta la densidad de portadores, lo que reduce su movilidad, aumentando así J_0 (Ec. 4.2) y en consecuencia disminuyendo V_{oc} según lo descrito por la ecuación 2.22.

La J_{sc} tiene un comportamiento prácticamente constante al aumentar la temperatura de 270 a 320 K (Fig. 5.10b), debido al comportamiento de V_{max} y J_0 . La Figura 5.10c muestra que FF tiene una pequeña disminución de 0.55 % cuando la temperatura de operación aumenta en 50 K, dado que V_{max} disminuye de 0.71 a 0.63 V al aumentar la temperatura. En la figura 5.10d se puede observar que el PCE disminuye de 16.7 a 14.88% cuando la temperatura aumenta en 50 K, dado que cuando se aumenta la temperatura de un material se afecta su conductividad y se

generan fonones [72], lo que puede causar dispersión en los portadores de carga afectando así al PCE.

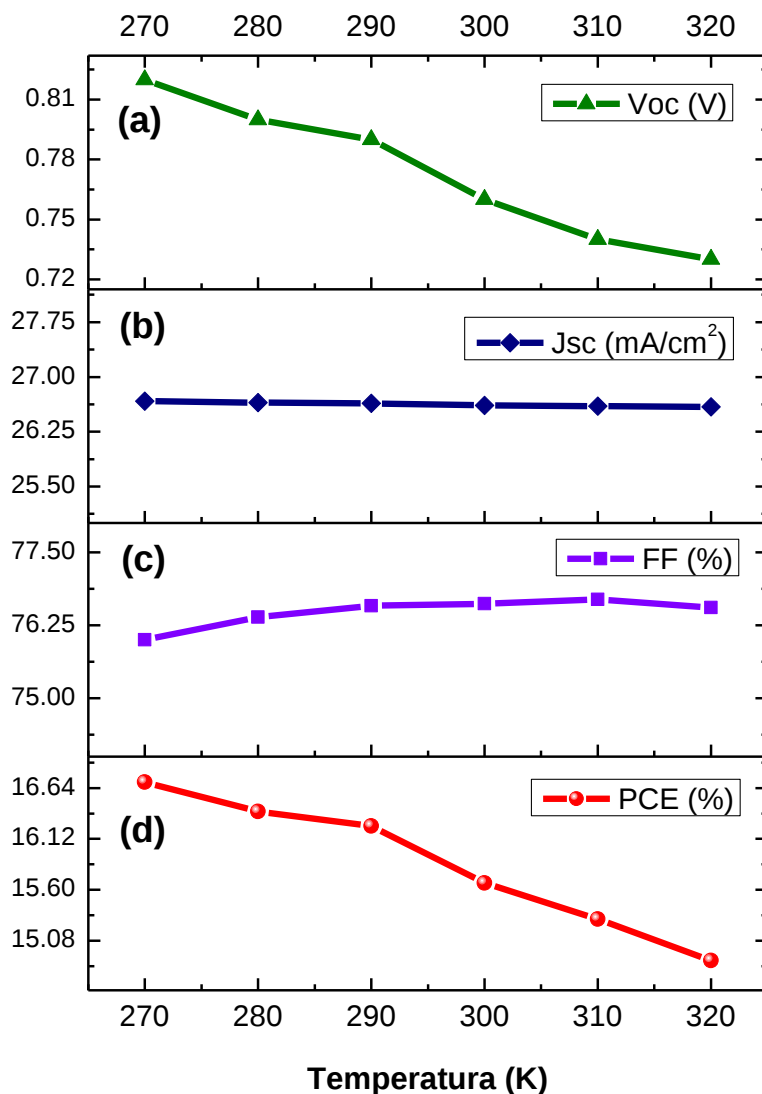


Figura 5.10. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes temperaturas de operación de la celda solar en la heterounión WO₃/CdTe.

5.2.7 Efecto de la resistencia en serie (R_s) y paralelo (R_{sh}) en el funcionamiento del dispositivo

La R_s y R_{sh} se variaron en el rango de 0-10 Ωcm^2 y 100-2200 Ωcm^2 respectivamente, los demás parámetros se mantuvieron constantes en su valor óptimo con $T=300\text{K}$.

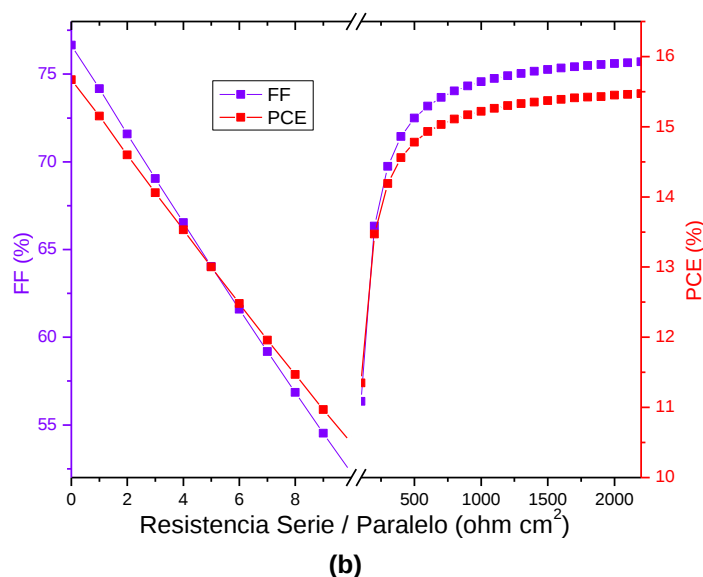
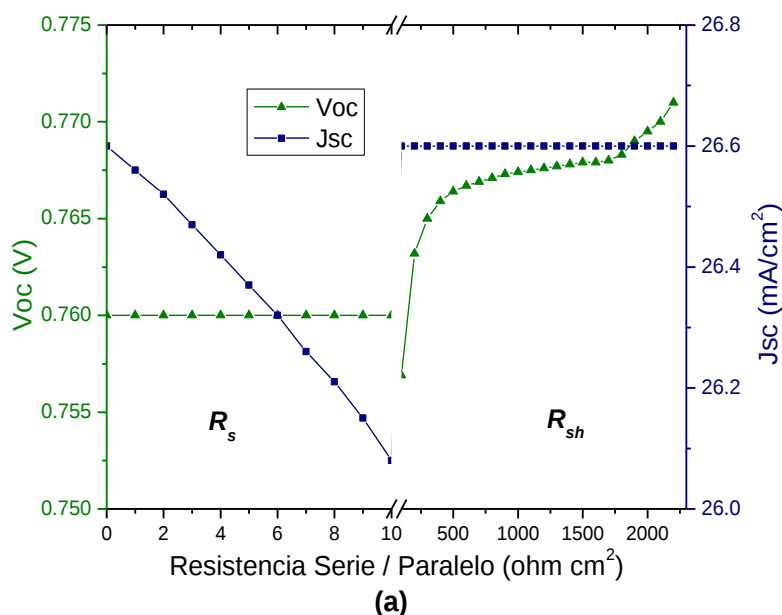


Figura 5.11. Comportamiento de (a) Voc, Jsc y (b) PCE, FF con diferentes resistencias en serie y paralelo en la celda solar en la heterounión WO_3/CdTe

La influencia de R_s y R_{sh} se muestran en la figura 5.11. En la figura 5.11a se observa que el V_{oc} permanece constante a medida que R_s incrementa, sin embargo, el J_{sc} si disminuye 0.52 mA/cm^2 cuando R_s incrementa de 0 a $10 \text{ } \Omega\text{cm}^2$; en la misma figura también se puede observar que J_{sc} permanece constante cuando se varia R_{sh} , pero V_{oc} incrementa 14 mV al incrementar R_{sh} de 100 a $2200 \text{ } \Omega\text{cm}^2$.

En la figura 5.11b se observa que R_s afecta negativamente al FF, el cual disminuye de 76.65 % a 52.25 % al incrementar R_s de 0 a $10 \Omega\text{cm}^2$, ya que J_{max} desciende de 23.40 a 21.81 mA/cm² dado el comportamiento de J_{sc} , disminuyendo así la P_{max} (Ec. 2.20). Dado que el PCE depende proporcionalmente de FF, PCE disminuyó 5.18 % al incrementarse R_s . Por otro lado, la disminución de R_{sh} también afecta negativamente al FF y el PCE, disminuyendo de 75.7% a 56.34% y de 15.47% a 11.35% respectivamente cuando R_{sh} disminuyo de 2200 a $100 \Omega\text{cm}^2$.

5.3 Efecto de la activación de la capa CdTe en el funcionamiento en la celda solar en la heterounión WO_3/CdTe

Los espectros de absorbancia que fueron introducidos al software SCAPS 1-D a través del modelo óptico del coeficiente de absorción descritos en la sección 4.3, también se usaron en esta sección para poder simular la película de CdTe con un proceso de activación. Esto nos permite simular y analizar el efecto de la activación de la película de CdTe en el rendimiento de la celda solar basada en la heterounión WO_3/CdTe propuesta en este capítulo.

Los procesos de simulación de esta sección se hicieron con la misma metodología que se usó en la sección 5.2, permitiendo llevar a cabo una comparación del rendimiento del dispositivo simulado, al usar el modelo teórico de coeficiente de absorción de SCAPS 1-D y usar un espectro experimental de absorbancia.

5.3.1 Resultados de la simulación con película CdTe activada

En la figura 5.12 se muestran las gráficas de eficiencia cuántica (QE) de la celda solar simulada en este capítulo, usando el coeficiente de absorción de la película CdTe sin activar (teórico) usado en la sección 5.2 y con activación (experimental).

Se puede observar que al tener la película activada de CdTe se tiene una mayor QE (~95%) en longitudes de onda de 300 a 600 nm, esto debido a un mayor coeficiente de absorción en la película CdTe, debido a una mayor absorbancia como resultado del proceso de activación en la película de CdTe (Fig. A2.1). En longitudes mayores a 830 nm también se tienen un mayor QE en la película activada, ya que como se

explicó en el capítulo 3, el modelo teórico del coeficiente de absorción de SCAPS 1-D, considera un coeficiente de absorción nulo en fotones incidentes con energía menores al band gap; siendo este un comportamiento muy similar a lo reportado en la sección 4.3.3.

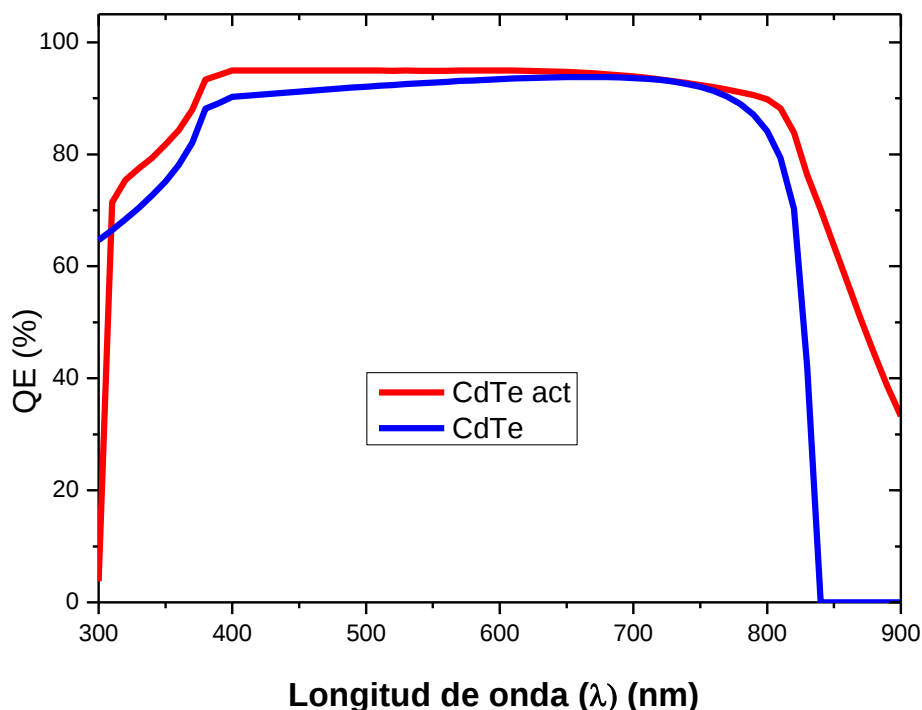


Figura 5.12. Gráficas de eficiencia cuántica (QE) de la celda solar simulada usando coeficiente de absorción teórico y experimental para la capa CdTe en la celda WO_3/CdTe .

Se observa que debido al efecto de la activación en la capa CdTe, se tiene un mejor rendimiento en la celda solar simulada (Fig. 5.13), alcanzando una eficiencia de 17.14%, con un V_{oc} de 0.755 V, un J_{sc} de 30.28 mA/cm^2 y un FF de 74.98%, comparado a lo obtenido en la sección 5.2 donde se obtuvo una eficiencia de 15.67%, un V_{oc} de 0.76 V, un J_{sc} de 26.60 mA/cm^2 y un FF de 71.11%. El incremento en la eficiencia comparado a la obtenida en la sección 5.2, se debe al aumento de J_{sc} al considerar el proceso de activación en la película de CdTe. Cabe mencionar que, el valor obtenido de J_{sc} en esta sección, se encuentra por debajo al máximo teórico para celdas solares basadas en CdTe [96]. En el apéndice 4 se muestra el comportamiento de la celda solar al ser simulada con la capa CdTe activada.

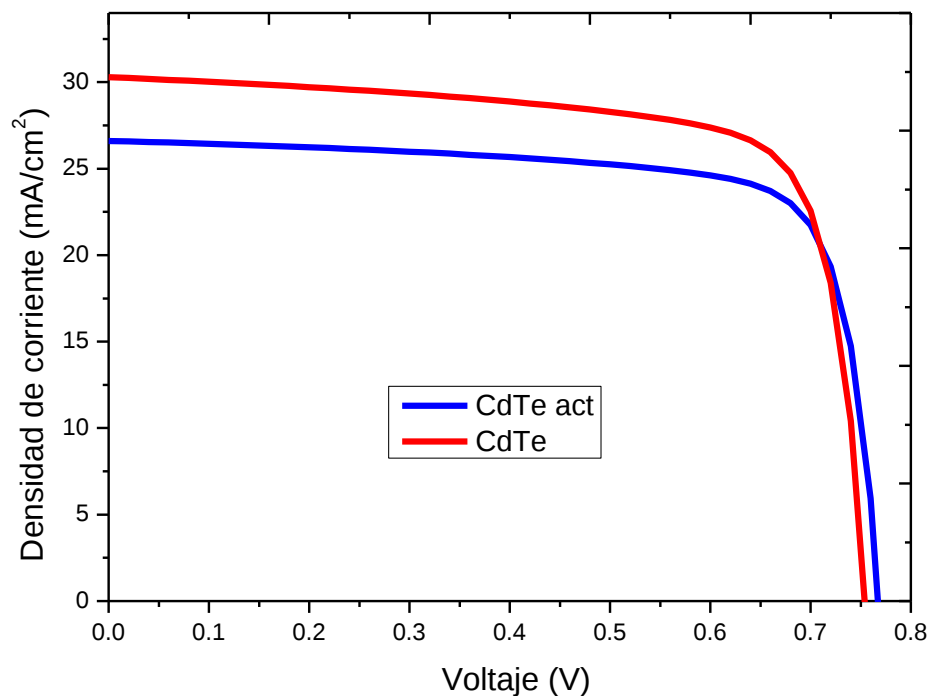


Figura 5.13. Curvas J-V de la celda solar simulada usando coeficiente de absorción teórico y experimental para la capa CdTe en la celda WO_3/CdTe .

5.4 Efecto del uso de una segunda capa absorbente de FeSi_2 en la heterounión WO_3/CdTe

Se propone usar al disiliciuro de hierro (FeSi_2) como una segunda capa absorbente sumada a la capa absorbente CdTe, en una configuración de doble capa absorbente en la celda solar de manera análoga que lo propuesto en la sección 4.4, siendo la estructura del dispositivo la siguiente $\text{Al}/\text{AZO}/\text{WO}_3/\text{CdTe}/\text{FeSi}_2/\text{Ni}$.

En la figura 5.14 se puede observar la estructura esquemática de la celda solar simulada en esta sección, en la parte superior de la estructura se encuentra el contacto frontal de aluminio, seguido de la capa AZO (TCO), como capa n o capa ventana la capa de WO_3 , la primera capa absorbente de CdTe, la segunda capa absorbente FeSi_2 y por último el contacto trasero de Níquel.

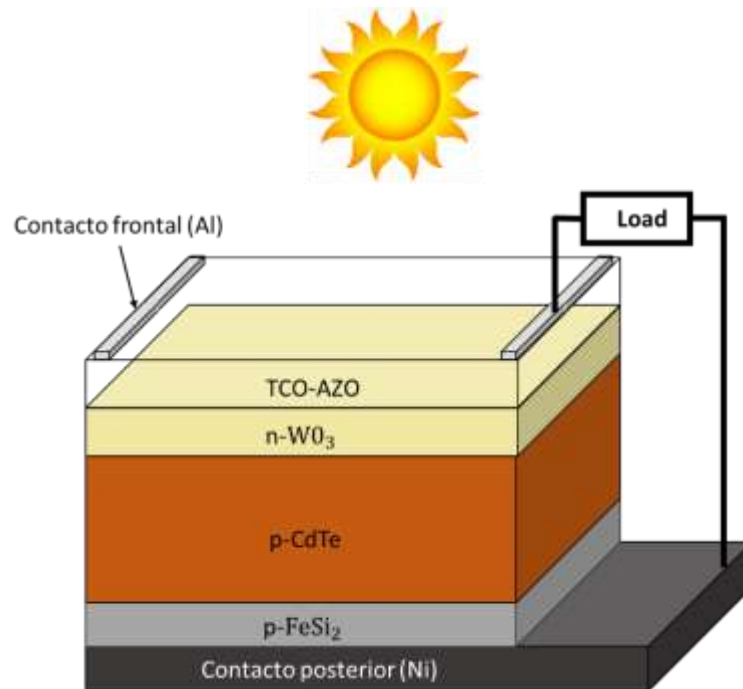


Figura 5.14. Representación de la celda solar simulada (Al/AZO/WO₃/CdTe/FeSi₂/Ni).

El propósito de esta configuración de doble capa absorbente es el de mejorar la eficiencia de la celda solar, debido a que el CdTe tiene band gap mayor de 1.49 eV mientras que el FeSi₂ tiene un band gap menor de 0.87eV por lo cual, los fotones incidentes con una energía menor a 1.49 eV y mayor o igual a 0.87 eV podrán ser absorbidos por la capa de FeSi₂, aprovechando así longitudes de onda menos energéticas.

En la figura 5.15a se muestra la eficiencia cuántica simulada para las estructuras (Al/AZO/WO₃/CdTe/NiO/Ni) y (Al/AZO/WO₃/CdTe/FeSi₂/Ni) donde se observa que al introducir una capa absorbente de FeSi₂ después de la capa CdTe, se tiene una QE del 100% en longitudes de onda de 370 a 1100 nm y por arriba de 70% en una longitud de onda de hasta 1400 nm. Sin embargo, cuando se tiene solo una capa absorbente de CdTe, se tiene una QE de entre 93-80% en longitudes de onda con una energía mayor a 1.49 eV (menores a ~800 nm) y para longitudes de onda con una energía menor a 1.49 eV se tiene una QE prácticamente de 0%. Los fotones incidentes absorbidos por la capa FeSi₂ incrementan la generación de pares e-h generando una mayor J_{sc}, mejorando considerablemente la eficiencia del dispositivo simulado, como se observa a continuación.

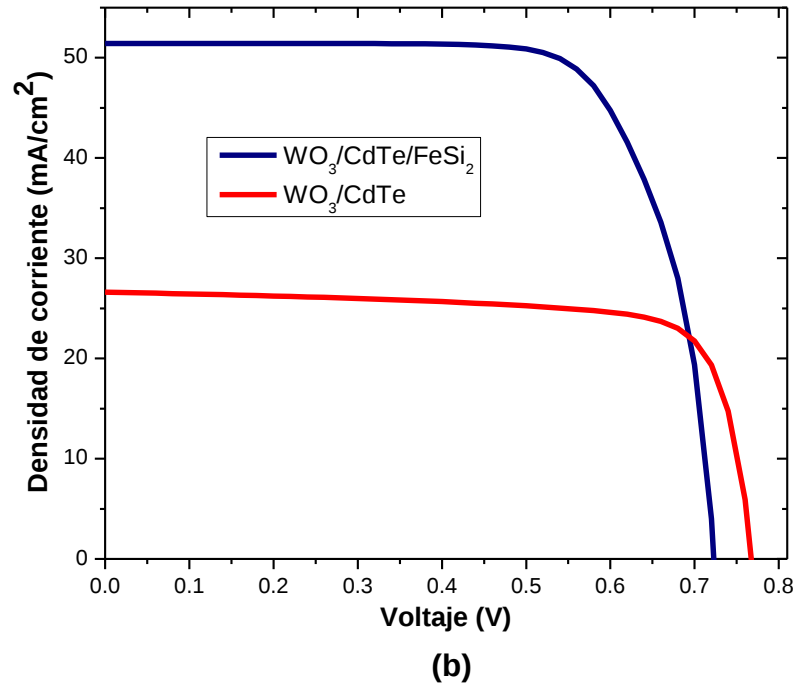
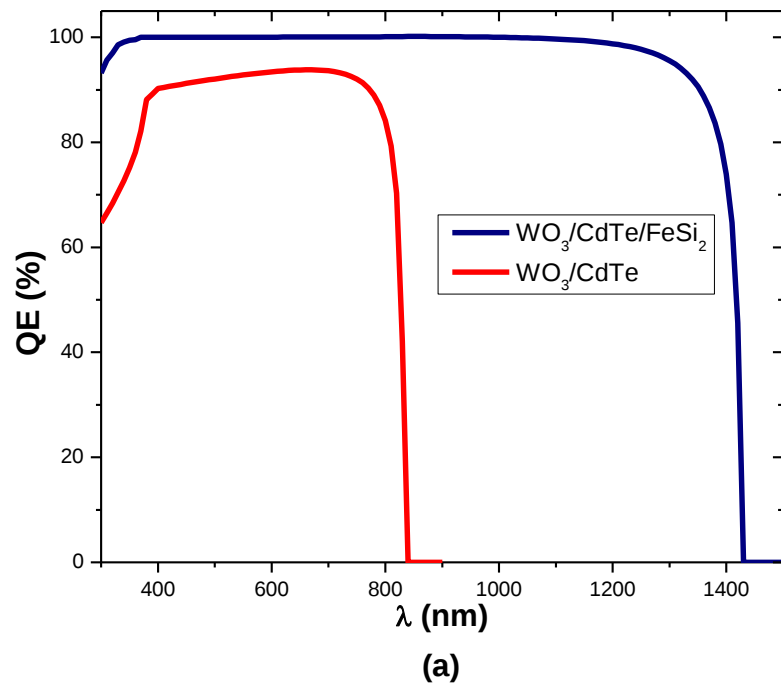


Figura 5.15. (a) QE simulada y (b) curva J-V para las estructuras $\text{WO}_3/\text{CdTe}/\text{FeSi}_2$ y WO_3/CdTe .

En la figura 5.15b, se observa el incremento en la densidad de corriente, debido a una mayor absorción de fotones al colocar la capa FeSi_2 , se obtiene una eficiencia máxima de 27.45%, con un V_{oc} de 0.72 V, una J_{sc} de 51.43 mA/cm^2 y un factor de llenado de 73.77%, lo que representa una mejora considerable en el rendimiento fotovoltaico de la celda solar comparado a solo tener una capa absorbente.

5.4.1 Diagrama de bandas de la heterounión WO_3/CdTe al incorporar FeSi_2 como segunda capa absorbente

La figura 5.16 muestra el diagrama de bandas de la estructura simulada, la diferencia entre la banda de conducción y valencia entre WO_3 y CdTe es de $\Delta E_c = 0.27$ eV y $\Delta E_v = 1.93$ eV respectivamente, mientras que ΔE_c y ΔE_v en la interfaz $\text{FeSi}_2/\text{CdTe}$ es de 0.12 eV y 0.74 eV respectivamente. Los niveles de Fermi para las capas WO_3 , CdTe y FeSi_2 con respecto a la banda de valencia es de 3.10 eV, 0.15 eV y 0.09 eV respectivamente, lo que implica que no se están simulando materiales degenerados.

El espesor de la región de carga espacial (W) es de 320 nm, mismo que fue calculado a partir de las ecuaciones 2.11 a la 2.13, con los valores obtenidos por el software, se obtuvo un x_n de 0.15 nm y un x_p de 319.85 nm, esta reducción de W con respecto a lo obtenido en la sección 5.1.1 (731 nm) se debe a que hubo una reducción en el espesor de la capa CdTe por lo que a espesores menores de 730 nm en la capa CdTe , W estará en función del espesor de esta capa. Esta reducción en W modifica la barrera de potencial V_{bi} , por lo que se recalculó usando las ecuaciones 2.7, 2.10a y b, obteniendo un valor de 0.97 V.

La función de trabajo del FeSi_2 (4.93 eV), permite usar un metal como contacto posterior con una función de trabajo mayor a 4.93 eV para generar un contacto óhmico, permitiendo usar metales como Au o Ni como contacto posterior en celdas solares basadas en CdTe , tal como se explicó en la sección 4.4.1.

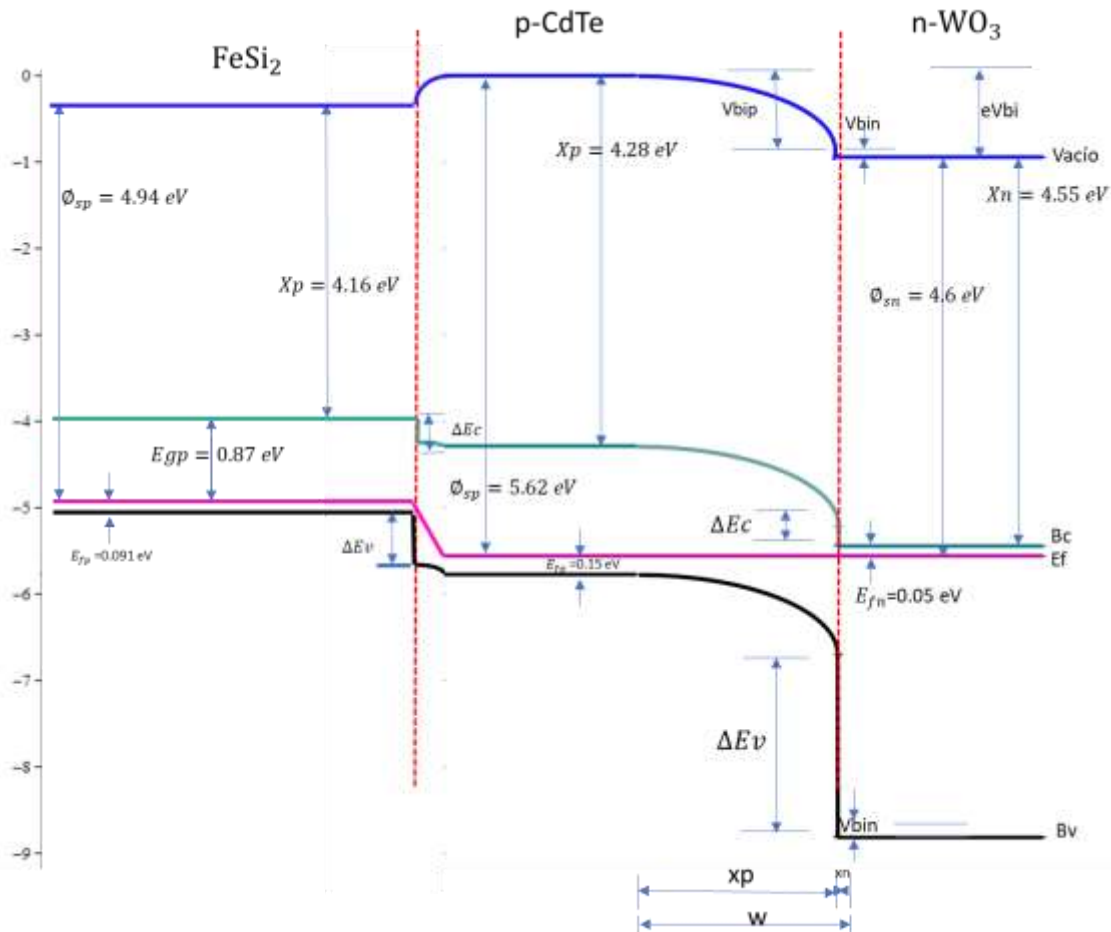


Figura 5.16. Diagrama de bandas de la heteroestructura FeSi₂/CdTe/WO₃.

5.4.2 Parámetros de simulación de la estructura WO₃/CdTe/FeSi₂

Los parámetros físicos de las capas que componen el dispositivo simulado se describen en la tabla 5.3, mientras que en la tabla 5.4 se presentan las densidades de estados (N_t) de las interfaces WO₃/CdTe y CdTe/FeSi₂ generados por el desajuste de red entre ambas capas de cada interfaz; las propiedades eléctricas del contacto frontal y posterior se describen en la tabla 4.2.

En la figura 5.17 se observa la interfaz de definición de la estructura simulada, se puede apreciar en rojo a la izquierda la capa FeSi₂, en rojo a la derecha la capa P (CdTe), la capa n (WO₃) en azul izquierda, la capa TCO (AZO) en azul derecha, contactos trasero y frontal, así como el punto de iluminación

Tabla 5.3. Parámetros usados en la simulación de la celda solar Al/AZO//WO₃/CdTe/FeSi₂/Ni

Parámetros	CdTe [3,22,67-69]	WO ₃ [71, 84, 85]	AZO [83, 86]	FeSi ₂ [46,82,94,95]
Espesor (μm)	0.3-1	0.01-0.15	0.05	0.2-1
Bandgap, E_g (eV)	1.49	3.15	3.3	0.87
Afinidad electrónica, χ (eV)	4.28	4.55	4.55	4.16
Permitividad relativa, ϵ_r	9.4	10	8.12	22.5
Densidad efectiva de estados BC, N_c (cm ⁻³)	8x10 ¹⁷	4.2x10 ¹⁸	4.1x10 ¹⁸	5.6x10 ¹⁹
Densidad efectiva de estados BV, N_v (cm ⁻³)	1.8x10 ¹⁹	9x10 ¹⁸	8.2x10 ¹⁸	2.08x10 ¹⁹
Movilidad de electrones, μ_n (cm ² /Vs)	500	20	100	100
Movilidad de huecos, μ_p (cm ² /Vs)	60	10	20	20
Velocidad térmica de electrones (cm/s)	10 ⁷	10 ⁷	2.2x10 ⁷	10 ⁷
Velocidad térmica de huecos (cm/s)	10 ⁷	10 ⁷	1.5x10 ⁷	10 ⁷
Concentración de donadores, N_D (cm ⁻³)	0	10 ¹³ – 10 ¹⁹	10 ²¹	0
Concentración de aceptores, N_A (cm ⁻³)	10 ¹³ – 10 ¹⁷	0	0	10 ¹⁴ – 10 ¹⁸
Densidad de defectos, N_t (1/cm ³)	10 ¹⁵	10 ¹²	5x10 ¹⁴	10 ¹⁴
Tipo de defectos	aceptor	donador	aceptor	aceptor

Tabla 5.4. Parámetros de simulación para contactos y defectos en interfaces.

<i>Densidad de defectos en la interfaz</i>	
WO ₃ /CdTe [84, 85]	10 ¹⁰ cm ⁻²
Tipo de defecto	Aceptor
Sección transversal de captura de electrones/huecos	10 ⁻¹⁰ cm ²
CdTe/ FeSi ₂ [82]	10 ¹⁰ – 10 ¹⁷ cm ⁻²
Tipo de defecto	Aceptor
Sección transversal de captura de electrones/huecos	10 ⁻¹⁵ cm ²



Figura 5.17. Panel de definición de celdas solares de SCAPS-1D para la estructura $\text{Al}/\text{AZO}/\text{WO}_3/\text{CdTe}/\text{FeSi}_2/\text{Ni}$

5.4.3 Efecto del espesor de la capa absorbente de CdTe en la heterounión WO_3/CdTe

Para estudiar el efecto que tiene el espesor de la primera capa absorbente CdTe sobre el rendimiento de la celda solar, se varió el espesor de 0.3 a 1 μm , mientras que los demás parámetros se mantuvieron constantes.

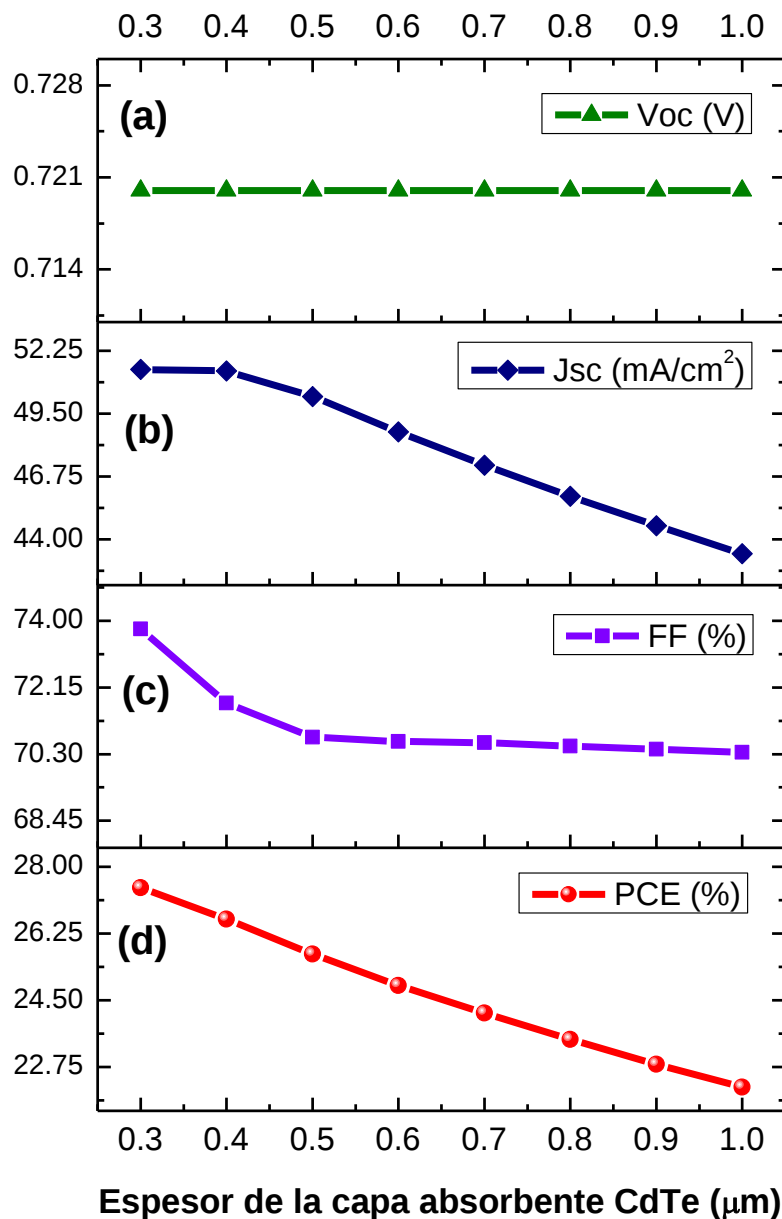


Figura 5.18. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa absorbente CdTe en la estructura $\text{Al}/\text{AZO}/\text{WO}_3/\text{CdTe}/\text{FeSi}_2/\text{Ni}$.

El V_{oc} tiene un comportamiento prácticamente constante al variar el espesor de la capa CdTe como se aprecia en la figura 5.18a, ya que al tener un espesor de 0.3 μm se tiene un J_0 de $4.43 \times 10^{-11} \text{ mA/cm}^2$, sin embargo, al incrementar el espesor de la capa CdTe, se tiene una menor generación de pares e-h, por lo que J_0 disminuye debido a una mayor movilidad en los portadores, tal que al tener un espesor de 1 μm en la capa CdTe, se tiene un J_0 de $3.66 \times 10^{-11} \text{ mA/cm}^2$. Por lo que V_{oc} se mantiene prácticamente constante a pesar del comportamiento de J_{sc} (Ec. 2.22). En la figura 5.18b se observa que J_{sc} disminuye 8.06 mA/cm^2 al incrementar el espesor de 0.3 a 1 μm , debido a la longitud de difusión del portador ($\sim 390 \text{ nm}$) en la capa CdTe, además de que al incrementar el espesor de esta capa se genera una menor absorción en la capa FeSi_2 .

El FF disminuye de 73.77 a 70.35 % debido a una reducción de P_{max} ya que la densidad de corriente máxima de la celda solar disminuye de 48.12 mA/cm^2 a 38.88 mA/cm^2 al incrementar el espesor de la capa CdTe de 0.3 a 1 μm . Debido al comportamiento de J_{sc} , V_{oc} y FF; el PCE disminuye de 27.45 a 22.22% (Fig. 5.18d).

5.4.4 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la capa absorbente de CdTe en la heterounión WO_3/CdTe

Para analizar el efecto de la concentración de portadores aceptores (N_A) de la primera capa absorbente CdTe sobre el rendimiento de la celda solar simulada, N_A se varió de 10^{13} a 10^{17} cm^{-3} . Al igual que en las secciones anteriores, los demás parámetros se mantuvieron constantes.

En la figura 5.19 a y b se observa el comportamiento de V_{oc} y J_{sc} al variar N_A en la capa absorbente CdTe, el V_{oc} no sufre variación considerable al incrementar N_A , sin embargo, el J_{sc} disminuye de 51.43 a 49.98 mA/cm^2 al pasar de un N_A de 10^{16} a 10^{17} cm^{-3} , esto se explica a que debido al incremento de N_A , el nivel de Fermi de los huecos en la capa CdTe disminuye con respecto a la banda de valencia, incrementando V_{bi} lo que dificultaría el flujo de los portadores a través de la unión.

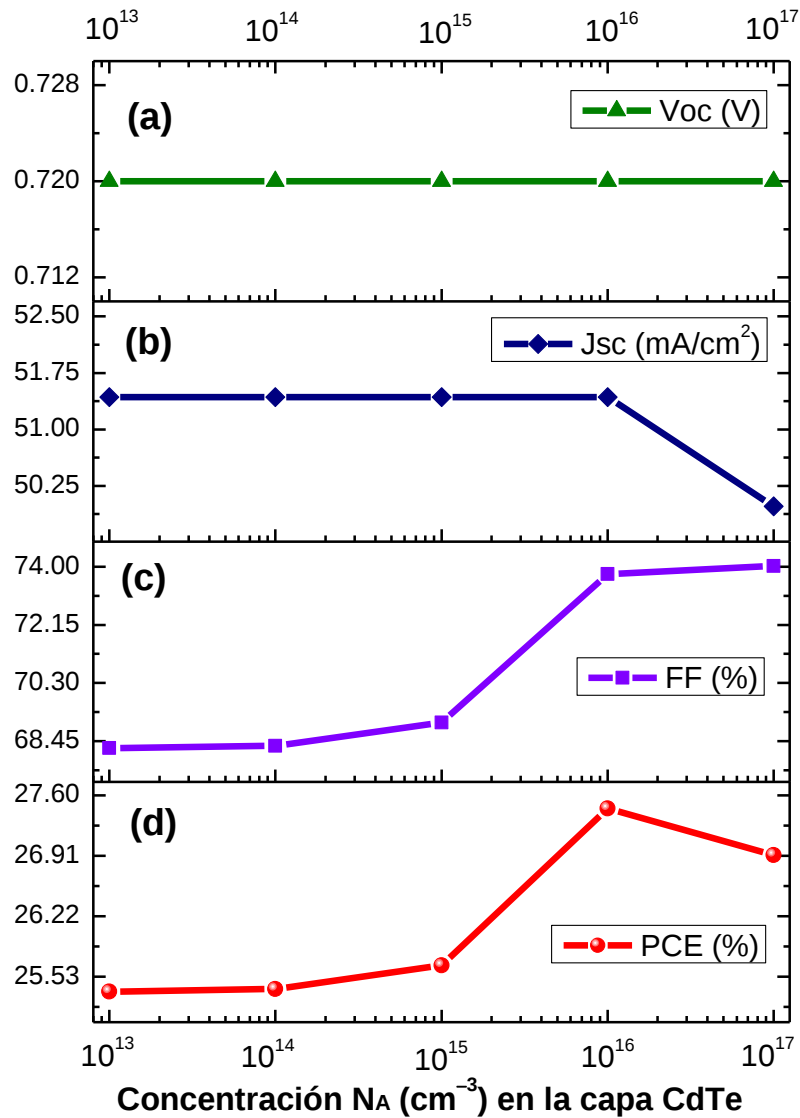


Figura 5.19. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores (N_A) en la capa absorbente CdTe en la estructura Al/AZO/ WO_3 /CdTe/FeSi₂/Ni.

El FF por su parte, tiene un incremento (Fig. 5.19c) del 5.79% debido al aumento de P_{max} , ya que el V_{max} de la celda aumenta de 0.54 a 0.60 V al incrementar N_A de 10^{13} a 10^{17} cm^{-3} . PCE aumenta de 25.36 a 27.45% cuando N_A incrementa de 10^{13} a 10^{16} cm^{-3} debido al aumento del FF, sin embargo, al superar una concentración de 10^{16} cm^{-3} , el PCE disminuye debido a la disminución de J_{sc} (Ec. 2.30).

5.4.5 Efecto del espesor de la capa ventana WO_3 al tener la capa absorbente de FeSi_2

En este apartado se analizó el efecto de variar el espesor de 10 a 100 nm de la capa ventana WO_3 sobre el rendimiento fotovoltaico de la celda solar propuesta al tener una segunda capa absorbente en la estructura. Los parámetros de las otras capas se mantuvieron constantes en esta sección.

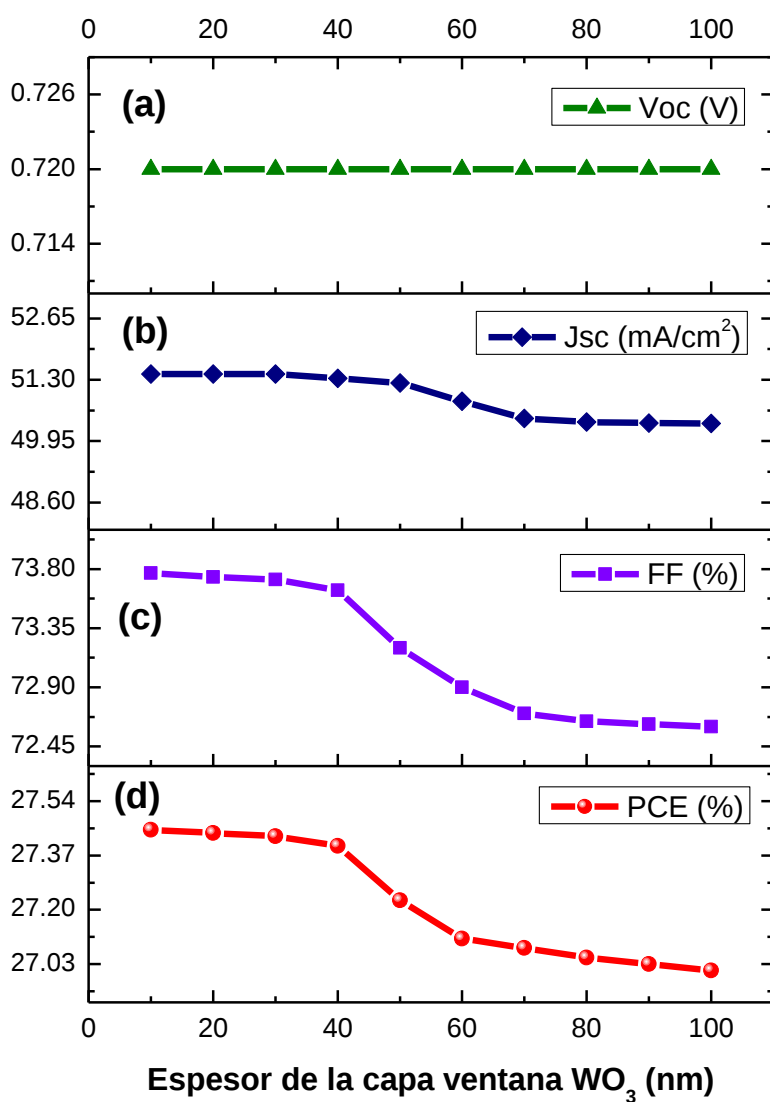


Figura 5.20. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores de la capa ventana AZO en la estructura $\text{Al}/\text{AZO}/\text{WO}_3/\text{CdTe}/\text{FeSi}_2/\text{Ni}$.

En la figura 5.20a se observa que el comportamiento del V_{oc} no se ve afectado por el cambio de espesor de la capa WO_3 , ya que la separación de cargas se mantiene debido a la longitud de difusión del portador ($7.2 \mu m$). J_{sc} tiene una ligera disminución de 1.09 mA/cm^2 al incrementar el espesor de la capa WO_3 de 10 a 100 nm (Fig. 5.20b). La disminución del J_{sc} se explica debido a que al haber un mayor espesor de la capa ventana se favorece una mayor absorción en esta capa, transmitiendo menos fotones a las capas absorbentes.

El FF tiene una disminución de 1.17 % al aumentar el espesor de la capa ventana de 10 a 100 nm (Fig. 5.20c). Dado que el comportamiento de PCE es directamente proporcional a FF, J_{sc} y V_{oc} como se describe en la ecuación 2.30, PCE disminuye de 27.45 a 27.00% al incrementar el espesor de la capa ventana.

5.4.6 Efecto de la concentración de portadores N_D en la capa ventana WO_3 al tener la capa absorbente $FeSi_2$

El comportamiento de la celda solar cuándo se varía la concentración de portadores N_D de 10^{13} a 10^{19} cm^{-3} en la capa n (WO_3) se muestra en la figura 5.21. En la figura 5.21a y b se puede ver que el comportamiento de V_{oc} y J_{sc} se mantiene prácticamente constante al variar la concentración de portadores N_D en la capa ventana WO_3 , ya que al tener la capa de $FeSi_2$ con un band gap de 0.87 eV, se absorben los fotones que pasan a través de las capas WO_3 y CdTe generando pares e-h que son separados por el campo eléctrico, sumado a que en este caso la zona de agotamiento determinada por N_D y N_A también está en función del espesor de la capa CdTe la cual se mantuvo constante en 300 nm en esta sección.

El FF tiene un ligero incremento al pasar de 72.67 a 73.77% al incrementar N_D de 10^{13} a 10^{19} cm^{-3} tal como se observa en la figura 5.21c, determinado por un pequeño aumento en la densidad de corriente máxima de celda (J_{max}) de 47.66 a 48.12 mA/cm^2 generando que la potencia máxima (P_{max}) del dispositivo simulado aumente ligeramente con el aumento de N_D . El PCE tiene un pequeño incremento de 0.43% (Fig. 5.21d).

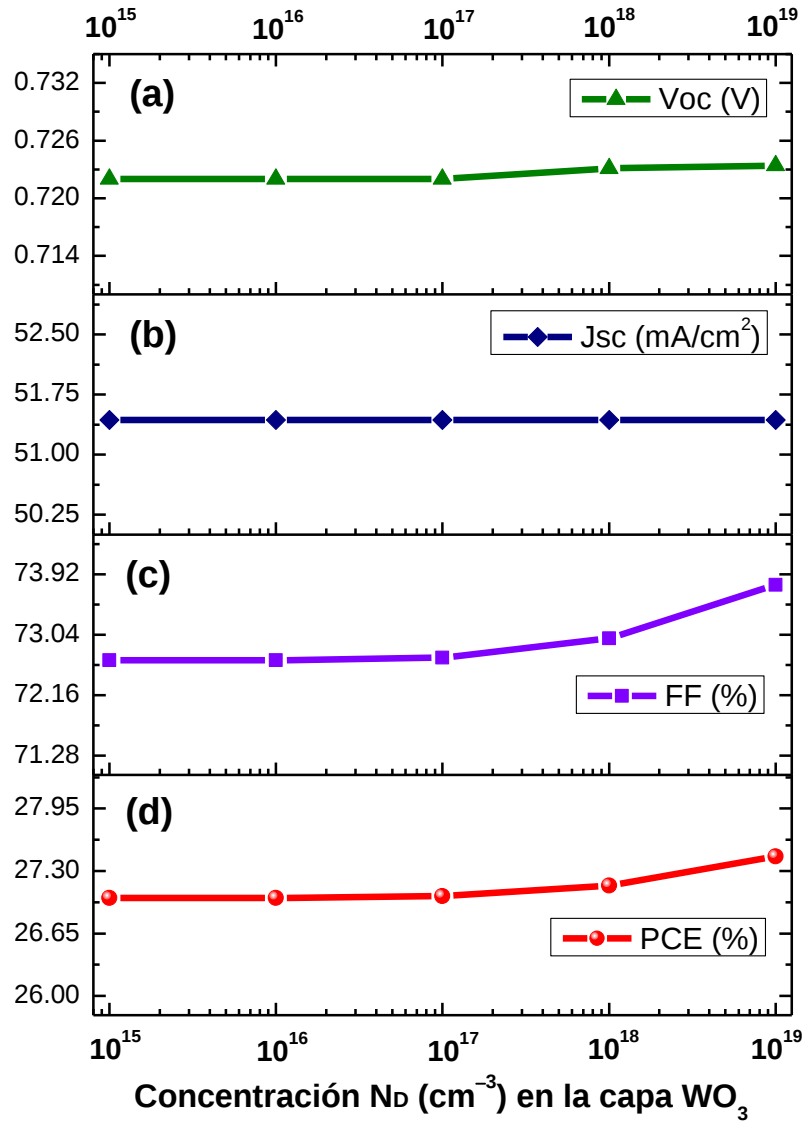


Figura 5.21. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores (N_D) en la capa ventana AZO en la estructura Al/AZO/ WO_3 /CdTe/FeSi₂/Ni.

5.4.7 Efecto del espesor de la segunda capa absorbente FeSi₂ en la heterounión WO_3 /CdTe/FeSi₂

Para estudiar la influencia del espesor de la segunda capa absorbente FeSi₂ sobre el rendimiento fotovoltaico de la celda solar basada en la heterounión WO_3 /CdTe, el espesor de la capa FeSi₂ se varió de 0.2 a 1 μm . Los demás parámetros se mantuvieron constantes.

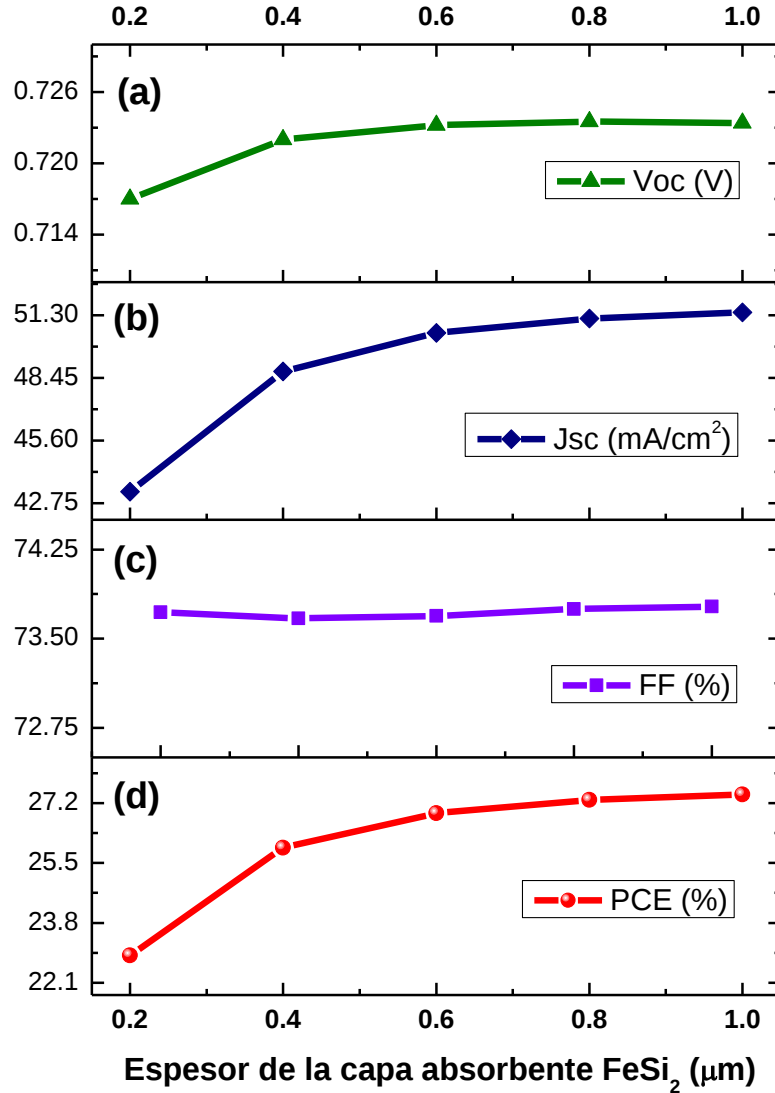


Figura 5.22. Cambio en (a) Voc, (b) Jsc, (c) FF y (d) PCE para diferentes espesores en la capa absorbente FeSi₂ en la heterounión WO₃/CdTe.

En la figura 5.22a se observa que el incrementar el espesor de la película FeSi₂ no afecta considerablemente al V_{oc} el cual tienen un comportamiento prácticamente contante, teniendo un incremento de 6.4 mV al incrementar el espesor de FeSi₂. Se observa en la figura 5.22b que J_{sc} incrementa de 43.27 a 51.43 mA/cm² al variar el espesor de la capa FeSi₂ de 0.2 a 1μm, debido a que, al aumentar el grosor de esta película el camino óptico es mayor, por lo cual, la probabilidad de que los fotones

incidentes sean absorbidos es mayor y dado que L_n es de $1.6 \mu\text{m}$, los portadores fotogenerados tienen mayor probabilidad de alcanzar la región de carga espacial, y ser desplazados hacia los contactos antes de ser recombinados.

El FF tiene un ligero incremento al pasar de 73.69 a 73.77%. PCE incrementa de 22.88 a 27.45% al incrementar el espesor de la capa FeSi_2 de 0.2 a $1 \mu\text{m}$ (Fig. 5.22a), determinado principalmente por el comportamiento de J_{sc} , como se describe en la ecuación 2.30.

5.4.8 Efecto de la concentración de portadores (N_A) en la segunda capa absorbente FeSi_2 en la heterounión WO_3/CdTe

Para estudiar el efecto que la concentración de portadores aceptores (N_A) de la segunda capa absorbente FeSi_2 sobre el rendimiento de la celda solar simulada, N_A se varió de 10^{14} a 10^{18} cm^{-3} . Los demás parámetros se mantuvieron constantes durante las simulaciones.

El V_{oc} y J_{sc} tienen un comportamiento invariable al incrementar la concentración de portadores en la capa FeSi_2 (Fig. 5.23a y b) dado que una mayor o menor absorción de los fotones incidentes está determinado por el espesor de la capa de FeSi_2 . El FF incrementa de 66.18 a 73.77% al variar N_A de 10^{14} a 10^{18} cm^{-3} cómo se observa en la figura 5.23c, ya que la potencia máxima de la celda simulada incrementa debido a que V_{max} y J_{max} incrementan de 0.53 a 0.57 V y 45.87 a 48.12 mA/cm^2 respectivamente.

El PCE aumenta de 24.61 a 27.45 % debido a que una mayor concentración de huecos entre la capa de CdTe y el contacto trasero favorece el flujo de los electrones desde el contacto trasero hacia los estados vacíos de la capa FeSi_2 (incrementa la función de trabajo del FeSi_2) mejorando así la extracción de los portadores del contacto trasero.

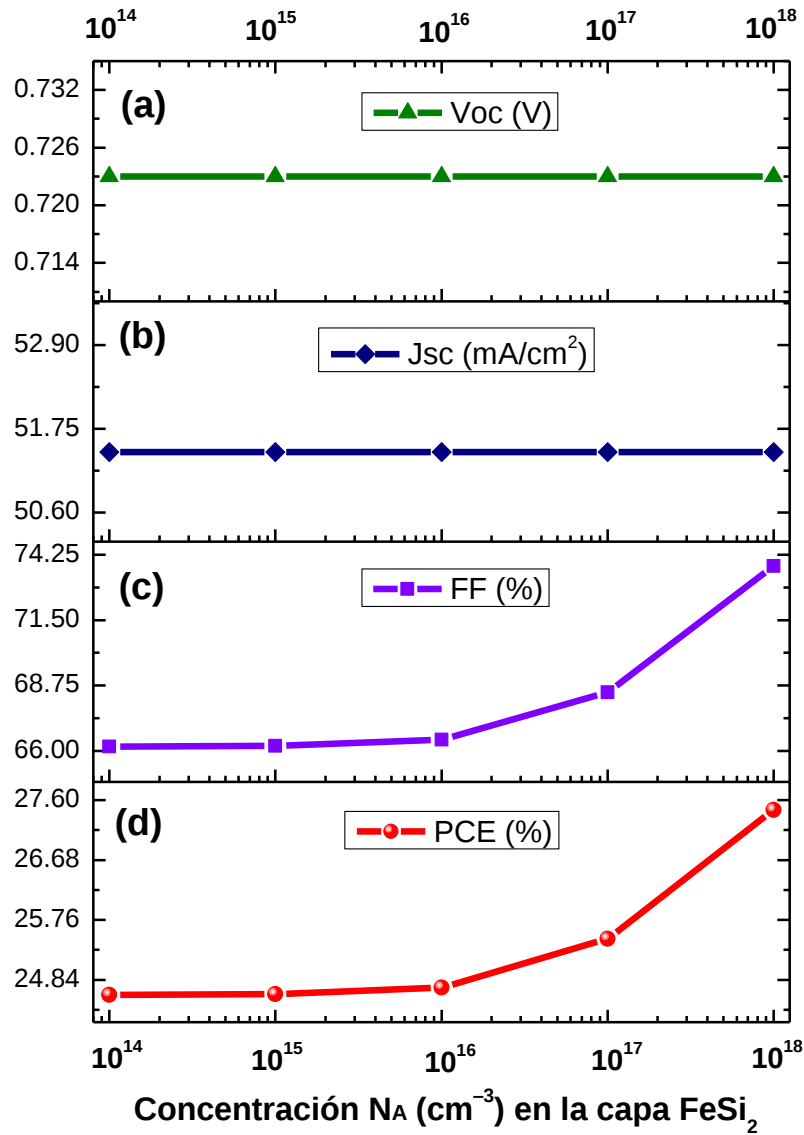


Figura 5.23. Cambio en (a) V_{oc} , (b) J_{sc} , (c) FF y (d) PCE para diferentes concentraciones de portadores aceptores (N_A) en la capa absorbente FeSi_2 en la heterounión WO_3/CdTe .

5.4.9 Efecto de la densidad de defectos (N_t) en la interfaz $\text{CdTe}/\text{FeSi}_2$ en la heterounión WO_3/CdTe .

El efecto de la densidad de estados (N_t) de la interfaz $\text{FeSi}_2/\text{CdTe}$ se analizó variando N_t de 10^{10} a 10^{17} cm^{-2} , al mismo tiempo que los demás parámetros se mantuvieron constantes durante la simulación.

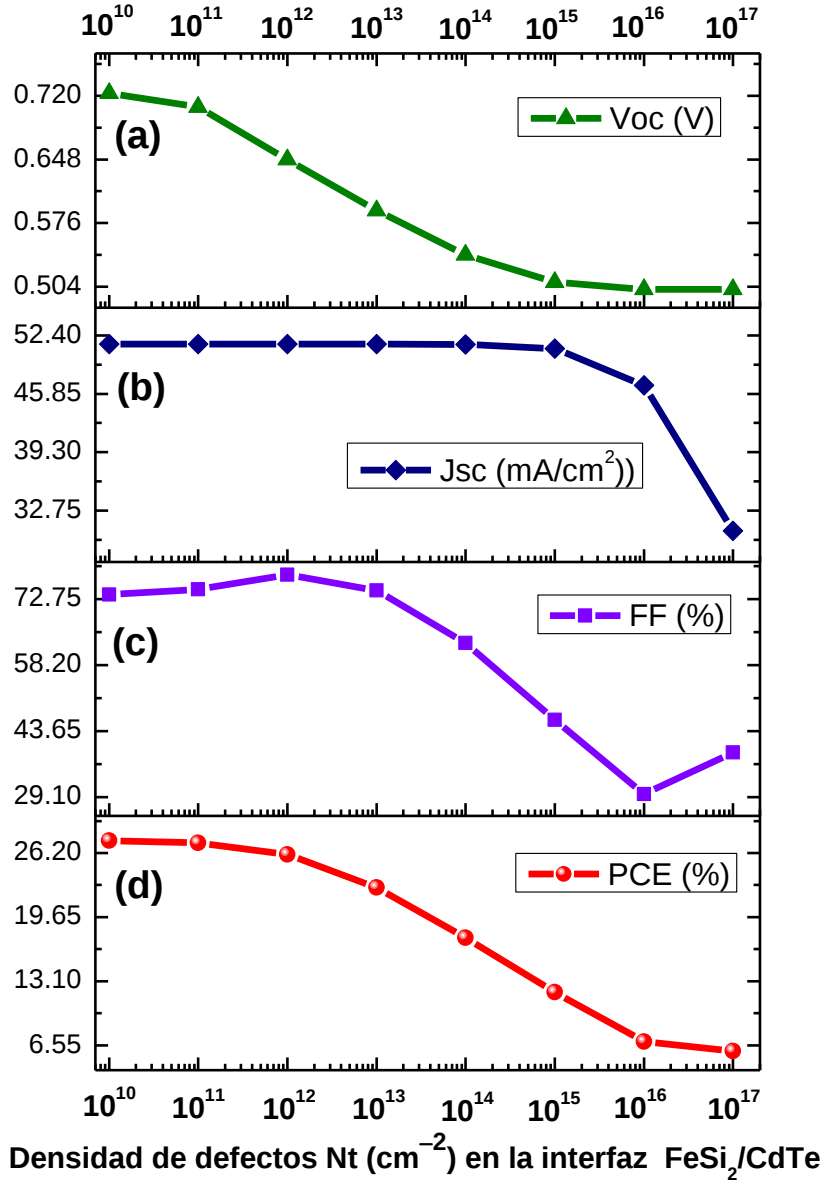


Figura 5.24. Cambio en (a) PCE, (b) FF, (c) Jsc y (d) Voc para diferentes concentraciones de defectos (N_t) en la interfaz CdTe/FeSi₂ en la heterounión WO₃/CdTe.

La Figura 5.24 muestra que el rendimiento de la celda solar se ve afectado negativamente por una mayor densidad de defectos en la interfaz, tal como en las secciones anteriores. El V_{oc} disminuye al aumentar la densidad de defectos en la interfaz como se observa en la figura 5.24a, disminuyendo de 0.72 a 0.50 V, debido al incremento de J_0 y la reducción de J_{sc} . El J_{sc} tiene también una disminución considerable, hasta 20.93 mA/cm² al aumentar la densidad de defectos de 10^{10} a

10^{17} cm^2 , observándose el inicio de un descenso abrupto en N_t de 10^{16} cm^2 (Fig.5.24b), ya que probablemente al llegar a esta concentración de defectos en la interfaz supera a la tasa de generación de pares e-h, por lo cual se tiene este descenso en J_{sc} , donde la probabilidad de que los portadores fotogenerados sean separados es menor por el aumento de los centros de recombinación. Al aumentar N_t existe mayor probabilidad de que las portadoras fotogeneradas se recombinen en la interfaz de la unión, provocando que V_{max} disminuya de 0.57 a 0.38 V y J_{max} disminuya de 48.12 a 15.36 mA/cm^2 , por lo tanto, la potencia máxima de la celda disminuye y, en consecuencia, FF disminuye (Ec. 2.20) de 73.77 a 38.94% incluso si J_{sc} y V_{oc} presentan una reducción en sus valores. El PCE disminuye de 27.45 a 5.95% a medida que aumenta N_t (Fig.5.24a), debido a la disminución de V_{oc} , J_{sc} y el FF.

5.5 Resumen de resultados de la simulación de la celda solar optimizada de heterounión WO_3/CdTe

En la tabla 5.5 se muestran las eficiencias teóricas optimizadas de las celdas solares basadas en la heterounión WO_3/CdTe analizadas en este capítulo, donde se observan los máximos valores de V_{oc} , J_{sc} , FF y PCE alcanzados junto con el espesor y concentración de portadores de las capas WO_3 , CdTe , NiO y FeSi_2 necesarios para optimizar dichas celdas. Para este capítulo se usó AZO como TCO, cuyos parámetros se describieron en la tabla 5.1.

Tabla 5.5 Concentrado de resultados optimizados de la celda solar WO_3/CdTe .

Estructura	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm^2)	FF (%)	PCE (%)	CdTe		WO_3		NiO		FeSi_2	
					Espesor (μm)	N_A (cm^{-3})	Espesor (μm)	N_D (cm^{-3})	Espesor (μm)	N_A (cm^{-3})	Espesor (μm)	N_A (cm^{-3})
Al/AZO/ WO_3 /CdTe/NiO/Ni	0.76	26.61	76.65	15.67	2	10^{15}	0.01	10^{19}	0.02	10^{19}	N/A	N/A
Al/AZO/ WO_3 /CdTe-ACT/NiO/Ni	0.755	30.28	74.98	17.14	2	10^{15}	0.01	10^{19}	0.02	10^{19}	N/A	N/A
Al/AZO/ WO_3 /CdTe/ FeSi_2 /Ni	0.72	51.43	73.77	27.45	0.3	10^{16}	0.01	10^{19}	N/A	N/A	1	10^{18}
					Interfaz				Contactos			
					AZO/CdTe		10^{12} cm^{-2}		Frontal		Al (4.2 eV)	
					CdTe/ FeSi_2		10^{10} cm^{-2}		Posterior		Ni (5.15 eV)	

CONCLUSIONES

El presente trabajo se enfocó primero en desarrollar el modelo teórico de dos celdas solares a partir de las heterouniones CdTe/AZO y CdTe/WO₃, y segundo, en realizar la simulación para encontrar los parámetros óptimos a través del software SCAPS-1D. Dicha optimización se llevó a cabo analizando principalmente 4 parámetros: eficiencia (PCE), voltaje de circuito abierto (V_{oc}), densidad de corriente de corto circuito (J_{sc}) y factor de llenado (FF). Esto permitió tener una mejor visión para desarrollar dispositivos fotovoltaicos funcionales. Por lo antes mencionado, se llegó a las siguientes conclusiones:

De la heterounión AZO/CdTe

Se encontró que la eficiencia (PCE) disminuye al aumentar el espesor de la capa ventana (AZO) y aumenta al incrementar la concentración de portadores de la misma. También se determinó que los parámetros fotovoltaicos de la celda no cambian a partir de 1.5 μm de espesor de la capa absorbente (CdTe) y que la concentración de portadores en esta capa es un factor determinante para el desempeño del dispositivo, obteniendo la eficiencia más alta (14.2%) cuando $N_A = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

Al colocar una capa de HTL (NiO) entre la capa absorbente de CdTe y el contacto posterior (Ni) el rendimiento del dispositivo mejora, aumentando la eficiencia del 11.07% al 14.2% cuando se incorpora una capa de NiO con una concentración de portadores de 10^{19} cm^{-3} . El grosor de la capa de NiO no es un factor determinante para el rendimiento del dispositivo

La presencia de una resistencia en serie (R_s) afecta negativamente a la eficiencia, ya que disminuye del 14.2 al 9.37 % a medida que R_s aumenta de 0 a $10 \Omega \text{ cm}^2$. Por otro lado, la eficiencia mejora al tener una resistencia en paralelo (R_{sh}) más alta, aumentando 3.58 % cuando R_{sh} aumenta de 100 a $2200 \Omega \text{ cm}^2$.

Se observó que el aumento de la temperatura de trabajo no fue favorable en el rendimiento de la celda solar, teniendo un mejor rendimiento a temperaturas más bajas, de tal manera que a 270 K se obtuvo un PCE de 14.5%.

El mayor rendimiento de la celda de heterounión Al/AZO/CdTe/NiO/Ni obtenido en las simulaciones fue de 14.2 %, con un $V_{oc} = 0.74$ V y un $J_{sc} = 26.15$ mA/cm² cuyo factor de llenado fue de 72.83 %, usando un espesor de 10 nm para AZO, 2 μm para CdTe y 20 nm para NiO, una concentración de $N_D = 1 \times 10^{18}$ cm⁻³ en la capa AZO, $N_A = 1 \times 10^{15}$ cm⁻³ en la capa CdTe y $N_A = 1 \times 10^{19}$ cm⁻³ en la capa NiO. Sin embargo, al introducir el espectro de absorbancia de la película de CdTe depositada y activada, en el modelo de coeficiente de absorción óptica de SCAPS 1-D, se obtiene un rendimiento de la celda simulada Al/AZO/CdTe/NiO/Ni de 16.49%, con un $V_{oc} = 0.74$ V y un $J_{sc} = 30.73$ mA/cm² cuyo factor de llenado fue de 72.62 %. Es decir, se observó una mejor eficiencia al introducir el efecto de la activación de la película de CdTe.

Al introducir una segunda capa absorbente de FeSi₂ entre el contacto trasero de Ni y la capa CdTe, se tiene que el espesor y concentración de portadores de las capas CdTe y AZO, ya no son un factor tan determinante en la eficiencia final del dispositivo, sin embargo, el espesor de la capa FeSi₂ si lo es, teniendo el mejor rendimiento de la celda solar a 1 μm de espesor de esta capa. Por lo que, el mejor rendimiento obtenido de la celda de heterounión Al/AZO/CdTe/FeSi₂/Ni fue de 27.19%, con un $V_{oc} = 0.63$ V y un $J_{sc} = 51.43$ mA/cm² y un factor de llenado de 82.99 %, esto se logró con un espesor de 10 nm para AZO, 0.3 μm para CdTe y 1 μm para FeSi₂ con una concentración de $N_D = 1 \times 10^{18}$ cm⁻³ para la capa AZO, $N_A = 1 \times 10^{15}$ cm⁻³ para la capa CdTe y $N_A = 1 \times 10^{18}$ cm⁻³ para la capa FeSi₂. Por lo que se logra mejorar la eficiencia de la celda solar de heterounión AZO/CdTe en 13% cuando se incluye una segunda capa absorbente de FeSi₂.

De la heterounión WO₃/CdTe

Al simular la celda solar con estructura Al/AZO/WO₃/CdTe/NiO/Ni se observa que la eficiencia aumenta al tener un espesor menor y una mayor concentración de portadores en la capa ventana (WO₃). También se observa que la eficiencia de la celda solar no varía a partir de 1.5 μm de espesor de la capa absorbente (CdTe), sin embargo, la concentración de portadores en esta capa influye determinantemente en el rendimiento del dispositivo, obteniéndose la máxima eficiencia con $N_A = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

El aumento de la resistencia R_s disminuye la eficiencia del dispositivo, tal que, esta disminuye un 5.18 % a medida que R_s aumenta de 0 a $10 \Omega\text{cm}^2$. Se observó que la eficiencia mejora al tener una resistencia R_{sh} más grande, incrementando un 4.12 % cuando R_{sh} aumenta de 100 a $2200 \Omega\text{cm}^2$.

Se observó que, al aumentar la temperatura de trabajo, el rendimiento de la celda solar es mejor temperaturas bajas, de tal forma que a una temperatura de 270 K se obtiene una eficiencia del 16.7 %.

El mejor rendimiento obtenido fue de 15.67 %, con un $V_{oc} = 0.76 \text{ V}$, un $J_{sc} = 26.60 \text{ mA/cm}^2$ y un factor de llenado de 76.65%, obtenido con un espesor de 10 nm para WO₃, 2 μm para CdTe y 20 nm para NiO, una concentración de $N_D = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ en la capa WO₃, $N_A = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ en la capa CdTe y $N_A = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ en la capa de NiO. Sin embargo, la eficiencia mejora al introducir el espectro de absorbancia de la película de CdTe depositada y activada, obteniéndose un rendimiento de 17.14 %, con un $V_{oc} = 0.755 \text{ V}$, un $J_{sc} = 30.28 \text{ mA/cm}^2$ y un FF= 74.98%.

Al incorporar la segunda capa absorbente de FeSi₂ en la estructura de la celda solar, se observa que la concentración de portadores de las capas CdTe y WO₃, tienen una menor influencia en el rendimiento del dispositivo que la concentración de portadores del FeSi₂, sin embargo, el espesor de la capa FeSi₂ y CdTe si son parámetros determinantes, dado que se logra un mejor rendimiento a mayor espesor del FeSi₂ y menor espesor del CdTe.

El rendimiento optimizado fue de 27.45 %, con un $V_{oc} = 0.72$ V, un $J_{sc} = 51.43$ mA/cm² y un FF= 73.77%, obtenido con un espesor de 10 nm para WO₃, 0.3 μm para CdTe y 1 μm para FeSi₂ con una concentración de $N_D=1 \times 10^{19}$ cm⁻³ para la capa AZO, $N_A=1 \times 10^{16}$ cm⁻³ para la capa CdTe y un $N_A=1 \times 10^{18}$ cm⁻³ para la capa FeSi₂. Por lo cual, incluir una capa de FeSi₂ como segunda capa absorbente, es una opción viable para mejorar la eficiencia de la celda solar en la celda solar de heterounión WO₃/CdTe.

De lo anterior, se puede concluir que las celdas solares de heterounión AZO/CdTe y WO₃/CdTe muestran un potencial fotovoltaico interesante, alcanzando eficiencias mayores al 14 y 15 % respectivamente al usar NiO como una capa HTL, por lo que se puede considerar que, tanto el AZO como el WO₃ son una alternativa viable para sustituir al CdS como capa ventana en celdas solares basadas en CdTe. Por otro lado, el uso de FeSi₂ como una segunda capa absorbente, implica una considerable mejora en la eficiencia de ambas celdas solares, obteniendo eficiencias mayores al 27% en ambos casos, demostrando ser un material de mucho interés para el desarrollo de celdas solares de alta eficiencia basadas en CdTe.

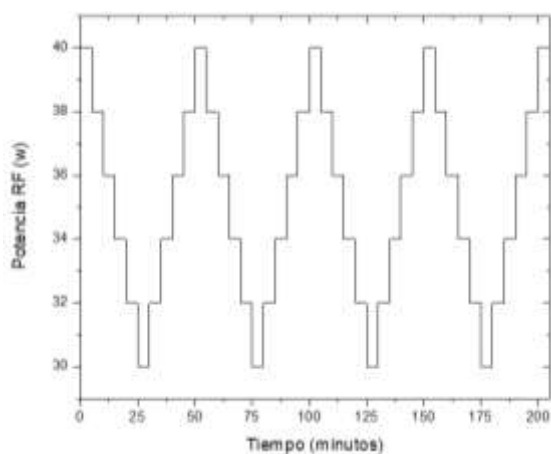
Apéndice 1

Depósito y activación de la película de CdTe

El método que se utilizó para el depósito fue erosión catódica de radio frecuencia, se usó un sustrato de vidrio Corning, los cuales se lavaron de la siguiente manera:

1. El sustrato es lavado con jabón, después se enjuaga con agua desionizada para remover cualquier residuo de jabón,
2. Baño ultrasónico por 15 minutos en acetona y metanol
3. Finalmente, el sustrato se deja secar a temperatura ambiente

Se depositó una película de CdTe usando una rampa de potencia WW, variando la potencia de 30 a 40 W. La variación de la potencia de plasma se llevó a cabo en forma ascendente y descendente como se observa en la figura A1.1a, disminuyendo o incrementando la potencia del plasma 2 w cada 5 minutos, a una presión de trabajo de 10 mili torr con un tiempo total de depósito de 3 horas 25 min. Se obtuvo una película uniforme con un color ámbar oscuro (Fig. A1.1b), con un espesor de **1122.95 nm**, medido a través de un perfilómetro Dektak 150 de superficie.



(a)



(b)

Figura A1.1. (a) Depósito de CdTe usando rampa WW con $\Delta=2\text{w}/5\text{min}$ y (b) película de CdTe obtenida.

El proceso de activación o clorado se llevó a cabo sometiendo la película depositada de CdTe a un tratamiento en una atmosfera de gases N-O-FREON (CHClF_2). La

película de CdTe se colocó en un soporte de grafito dentro de un horno, el cual es calentado con lámparas de halógeno (Fig. A1.2).



Figura A1.2. Película de CdTe colocada en el horno para el proceso de activación.

El proceso se inició con la generación de vacío en la cámara donde se llevó a cabo el proceso de activación, llegando a un vacío de 10^{-5} torr. Alcanzado el vacío se introdujo 37.5 torr (50 mbar) de freón, seguido de 112.5 torr (150 mbar) de oxígeno, y posteriormente se introdujo 450 torr (600 mbar) de nitrógeno, alcanzando una presión de 600 torr (800 mbar) en la cámara. Una vez alcanzada esta presión se inicia el tratamiento térmico, calentando el horno con rampa de 5 min cada 100°C hasta llegar a 400°C donde se mantiene 3 minutos, durando el tratamiento térmico 38 minutos. Terminado este tiempo se retira la mezcla de gases, restaurando el vacío. La temperatura permanece 10 minutos más y posteriormente, la muestra se deja enfriar lentamente hasta llegar a temperatura ambiente.

Apéndice 2

Caracterización óptica de la película de CdTe

Para la caracterización óptica se hicieron mediciones de transmitancia, logrando determinar el valor de la banda prohibida del material, además de que fue posible calcular el coeficiente de absorción a partir del espectro de transmitancia. Las mediciones de espectrofotometría se realizaron con un espectrofotómetro UV-VIS-NIR modelo Cary 5000 en el cual se fijó un rango de longitudes de 300 nm a 1100 nm, con un intervalo de 1 nm entre cada punto de muestreo. En la Figura A2.1 se presentan las curvas de transmitancia para la película de CdTe depositada y la película CdTe con activación.

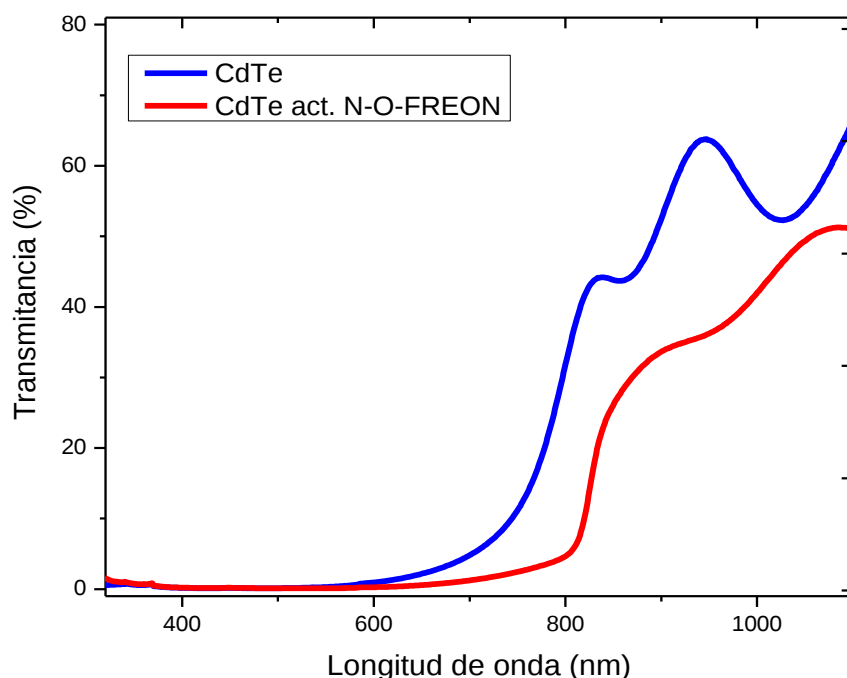


Figura A2.1. Transmitancia para la película depositada de CdTe.

En la Figura A2.1 se observa que la muestra activada es más absorbente en una longitud de onda 600 a 800 nm, mientras que la muestra CdTe sin activar muestra una mayor transmitancia en la misma longitud de onda. Por otro lado, para una

longitud de onda mayor a 800 nm la muestra de CdTe sin activar tiene una transmisión máxima de aproximadamente 60% mientras que la muestra activada tiene una transmisión máxima de aproximadamente 50%.

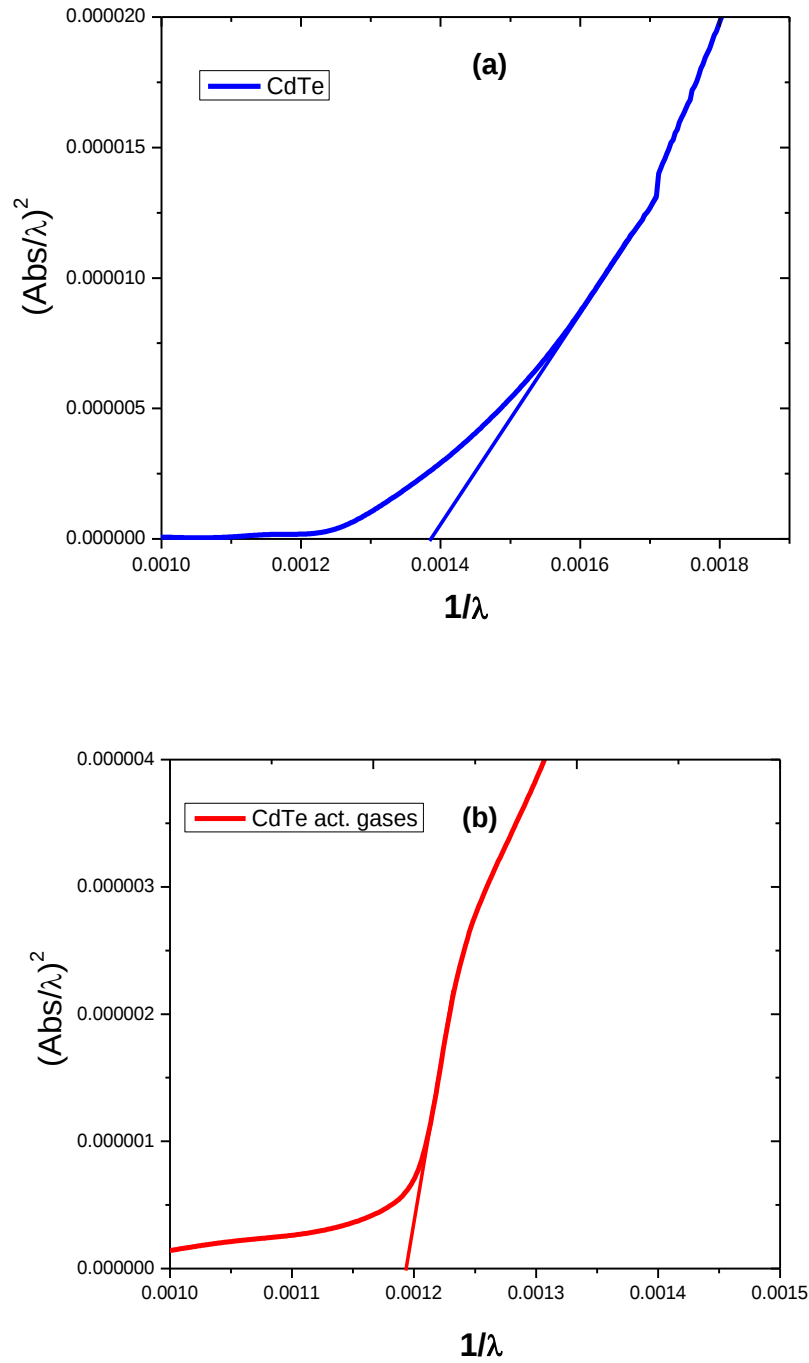


Figura A2.2. Cálculo de band gap con el método ASF para las muestras CdTe depositada (a) sin activar y (b) activada.

En la figura A2.2 se muestra el band gap calculado a través del método Absorption Spectrum Fitting (ASF) [80] para la muestra CdTe sin activar (Fig. A2.2a) y la muestra CdTe activada con gases (Fig. A2.2b), se observa que el band gap de la muestra activada es de 1.48 eV, mientras que la muestra sin activar tiene un band gap de 1.7 eV.

En el método ASF para encontrar el valor del band gap (E_g) se debe extrapolar una línea recta desde la pendiente hasta la intersección con el eje x, en dicha intersección se encuentra un valor que al multiplicarse por el factor 1240 ($E = \frac{1240}{\lambda(nm)} eV$) genera el valor de E_g .

Apéndice 3

Comportamiento de la celda solar de heterounión AZO/CdTe al introducir el espectro de absorbancia experimental de la capa CdTe.

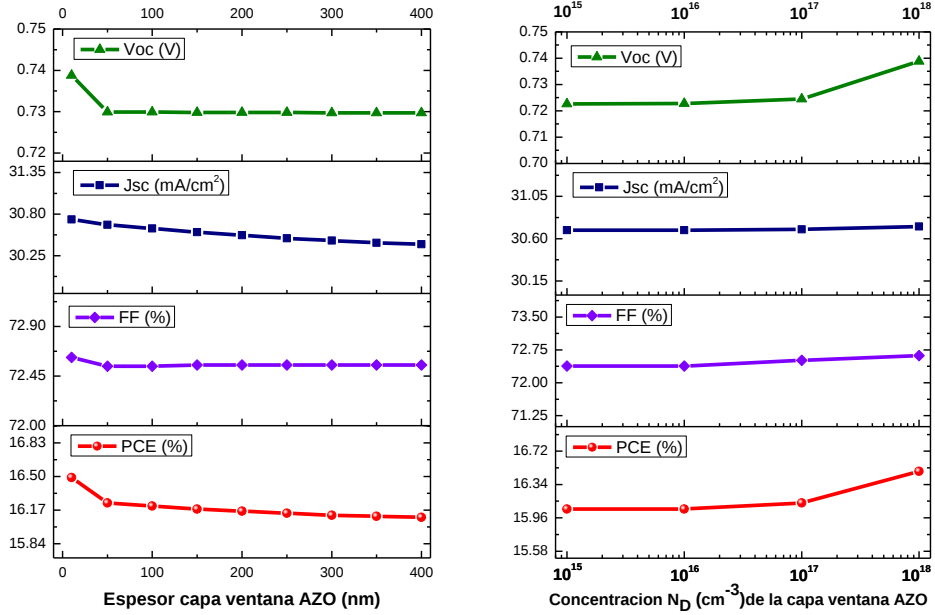


Figura A3.1. Cambio en Voc, Jsc, FF y PCE para diferentes espesores y concentración de portadores en la capa AZO en la heterounión AZO/CdTe.

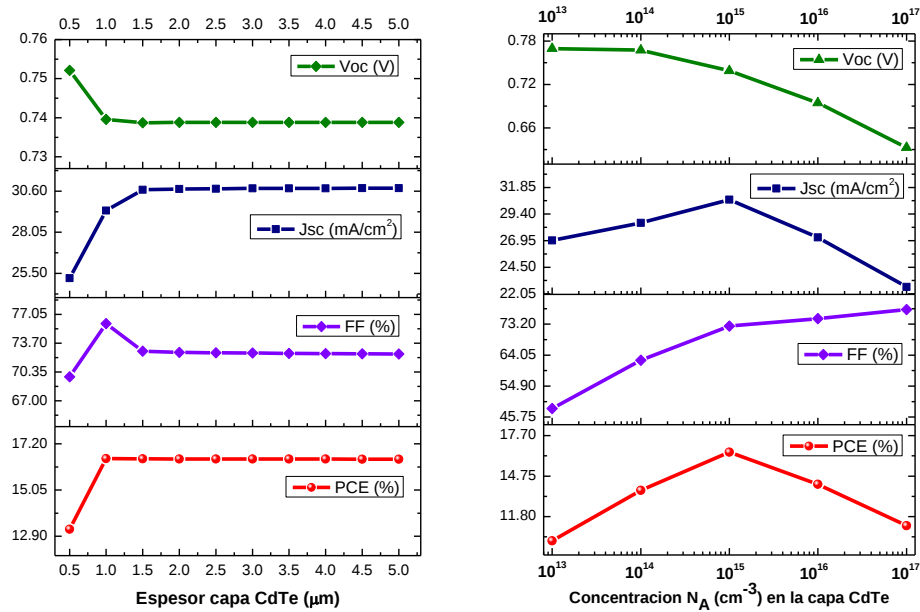


Figura A3.2. Cambio en Voc, Jsc, FF y PCE para diferentes espesores y concentración de portadores en la capa CdTe en la heterounión AZO/CdTe.

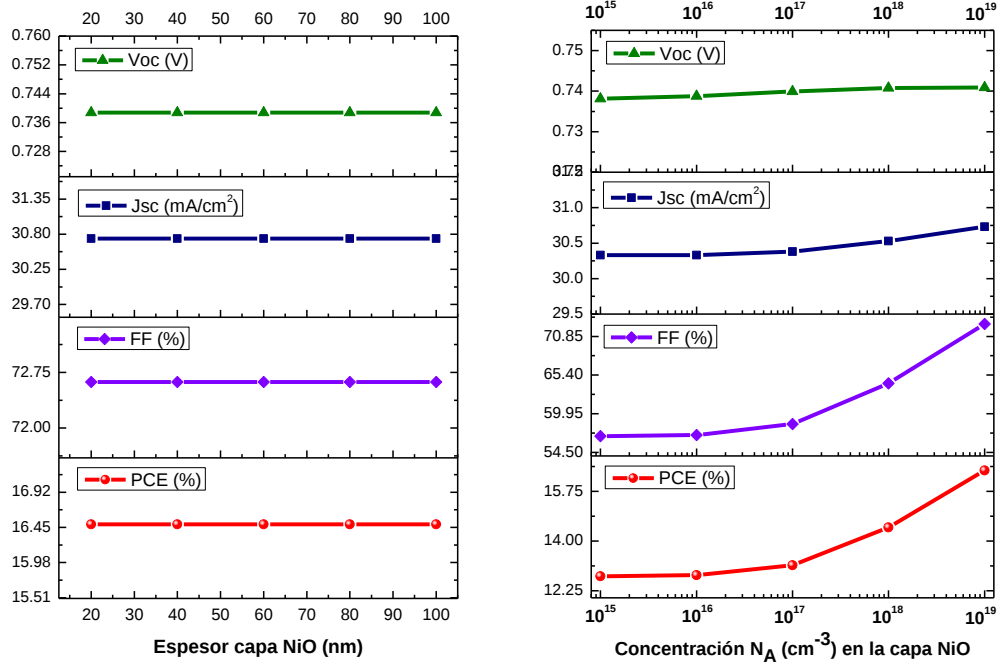


Figura A3.3. Cambio en Voc, Jsc, FF y PCE para diferentes espesores y concentración de portadores en la capa NiO en la heterounión AZO/CdTe.

Apéndice 4

Comportamiento de la celda solar de heterounión $WO_3/CdTe$ al introducir el espectro de absorbancia experimental de la capa $CdTe$.

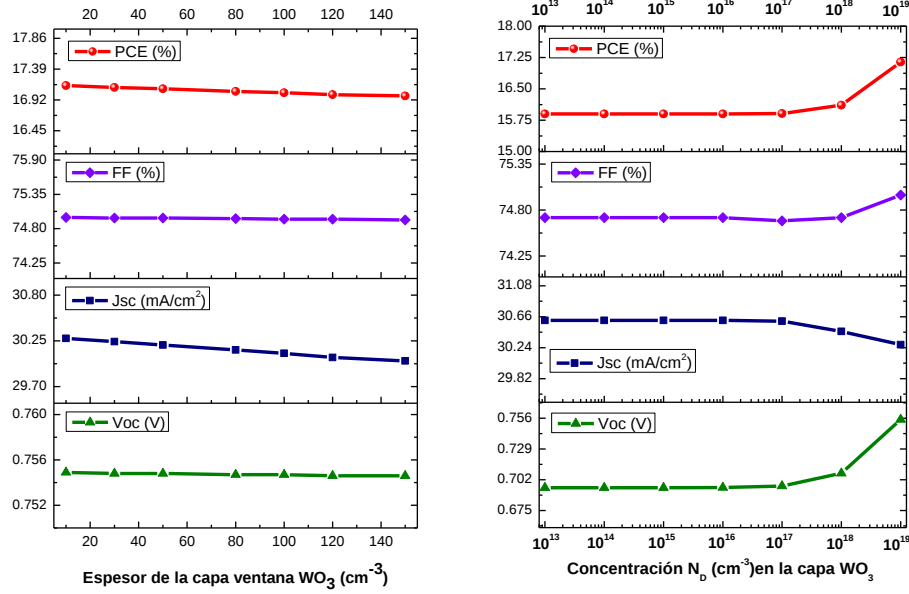


Figura A4.1. Cambio en Voc, Jsc, FF y PCE para diferentes espesores y concentración de portadores en la capa WO_3 en la heterounión $WO_3/CdTe$.

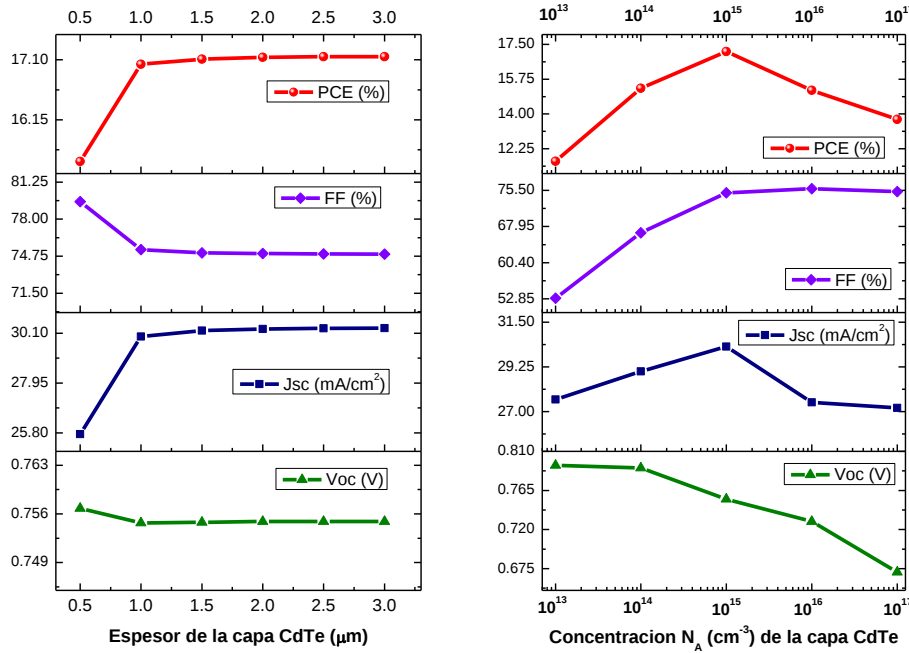


Figura A4.2. Cambio en Voc, Jsc, FF y PCE para diferentes espesores y concentración de portadores en la capa WO_3 en la heterounión $WO_3/CdTe$.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] P. Capper. Narrow gap cadmium-based compounds, Emis data reviews series nº 10, Inspec Pub., 1ª Ed., England (1994).
- [2] O. Madelung, Semiconductors: Data Handbook, O.Madelung Springer; 3ª ed. Alemania (2004).
- [3] E. Camacho, Caracterización de películas policristalinas de CdTe, obtenidas por erosión catódica para su aplicación en celdas solares. Tesis de Doctorado, (2014), Posgrado en Dispositivos Semiconductores, BUAP.
- [4] A.D. Compaan, J.R. Sites, R.W. Birkmire, C.S. Ferekides and A.L. Fahrenbruch, Critical Issues and Research Needs for CdTe-Based Solar Cells, Proc. 195th Mtg. of the Electrochemical Soc., PV99-11, (1999) 241
- [5] A. W. Brinkman, "Properties of Narrow Gap Cadmium-based Compounds". IEE London, 590 (1994).
- [6] Rams, J., Sochinskii, N., Muñoz, V. *et al.* CdTe epilayers for uses in optical waveguides. *Appl.Phys.A* **71**,277–279(2000).
<https://doi.org/10.1007/s003390000510>
- [7] K. L. Chopra, P. D. Paulson, V. Dutta, Thin-film solar cells: an overview Progress in photovoltaics: Research and Applications 12, 92 (2004). <https://doi.org/10.1002/pip.541>
- [8] I. Brosner, Physics of II-VI and I-III Compounds, Semimagnetic Semiconductors, Landolt-Bornstein Ser. Vol. 17, editorial O. Madelung (Berlin: Springer) p10.
- [9] J. D. H. Donnay, H. M. Ondick, Crystal data, National Bureau Standards, 3d ed. 2, 1976
- [10] H. L. Hwang, Y. K. Y. J. Hsu, H.Y. Feng, Journal of Crystal Growth 161, 81 (1996)
- [11] Su-Huai Wei and S. B. Zhang, First-Principles Study of Doping Limits of CdTe, *phys. stat. sol. B*, **229**, (2002), 305. [https://doi.org/10.1002/1521-3951\(200201\)229:1<305::AID-PSSB305>3.0.CO;2-3](https://doi.org/10.1002/1521-3951(200201)229:1<305::AID-PSSB305>3.0.CO;2-3)
- [12] N. Kramanovic et al, Electrical compensation in CdTe and Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te by intrinsic defects, *Phys.Rev.B*, 62, (2000), 16279. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.R16279>
- [13] P. Emanuelsson, P. Omling, B. K. Meyer, M. Wienecke, and M. Schenk, Identification of the cadmium vacancy in CdTe by electron paramagnetic resonance, *Phys. Rev. B*, 47, (1993), 15578. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.15578>

- [14] Cs. Szeles, Y. Y. Shan, K. G. Lynn, A. R. Moodenbaugh, and E. E. Eissler, Trapping properties of cadmium vacancies in $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, *Phys. Rev. B*, 55, (1997), 6945. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.55.6945>
- [15] M. A. Berding, Native defects in CdTe, *Phys. Rev. B*, 60, (1999), 894. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.8943>
- [16] M. Wienecke, H. Berger and M. Schenk, Native point defects in CdTe and its stability region. *Mat. Sci. and Eng. B*, 16, (1993), 219. [https://doi.org/10.1016/0921-5107\(93\)90048-R](https://doi.org/10.1016/0921-5107(93)90048-R)
- [17] M. Fiederle, C. Eiche, M. Salk, R. Schwarz, K.W. Benz, W. Stadler, D.M. Hofmann, B.K. Meyer, Modified compensation model of CdTe. *J. Appl. Phys.* 84 (1998) 6689–6692. <https://doi.org/10.1063/1.368874>
- [18] M. Zha, E. Gombia, F. Bissoli, A. Zappettini, L. Zanotti, Growth and Deep Level Characterisation of Undoped High Resistivity CdTe Crystals. *phys. stat. sol. B*, 229, (2002), 15. [https://doi.org/10.1002/1521-3951\(200201\)229:1<15::AID-PSSB15>3.0.CO;2-6](https://doi.org/10.1002/1521-3951(200201)229:1<15::AID-PSSB15>3.0.CO;2-6)
- [19] E. Gombia, F. Bissoli, M. Zha, A. Zappettini, T. Görög, L. Zanotti, Deep level characterization of undoped CdTe crystals. *phys. stat. sol. C*, 3,(2003), 881. <https://doi.org/10.1002/pssc.200306234>
- [20] S.-H. Wei, S.B. Zhang, Chemical trends of defect formation and doping limit in II-VI semiconductors: The case of CdTe. *Phys. Rev. B*, 66, (2002), 155211. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.155211>
- [21] R. Castro-Rodríguez, M. Zapata-Torres, A. Zapata-Navarro, A. I. Oliva, J. L. Peña, Heavily doped CdTe films grown by close-spaced vapor transport technique combined with free evaporation. *J. Appl. Phys.* 79, (1996) 184–187. <https://doi.org/10.1063/1.360929>
- [22] J.C. Zepeda, E. Rosendo, C. Morales, E. Camacho. Performance simulation of solar cell based on AZO/CdTe heterostructure by SCAPS 1D software. *Heliyon* 9 (2023), e14547. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e14547>
- [23] R. Castro-Rodríguez, M. Zapata-Torres, A. Zapata-Navarro, A. I. Oliva, J. L. Peña, Heavily doped CdTe films grown by close-spaced vapor transport technique combined with free evaporation. *J. Appl. Phys.* 79, (1996) 184–187. <https://doi.org/10.1063/1.360929>
- [24] B. K. Meyer, D. M. Hofmann, Anion and cation vacancies in CdTe. *Appl. Phys. A* 61, (1995) 213-215. <https://doi.org/10.1007/BF01538392>
- [25] D. Nobel, Phase Equilibria and Semiconducting Properties of Cadmium Telluride. *Philips Research Reports* 14 (1959) 399.
- [26] F. Fischer, A. Waag, G. Bilger, Th. Litz, S. Ccholl, M. Schmitt, G. Landwehr, Molecular beam epitaxy of iodine-doped CdTe and (CdMg) Te. *J. Crystal Growth* 141, (1994) 93. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(94\)90097-3](https://doi.org/10.1016/0022-0248(94)90097-3)

- [27] M. Fiederle, D. Ebling, C. Eiche, D. M. Hofmann, M. Salk, W. Stadler, K. W. Benz, B. K. Meyer, Comparison of CdTe, Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te and CdTe_{0.9}Se_{0.1} crystals: application for γ - and X-ray detectors. *J. Crystal Growth*. 138 1-4, 533 (1994). [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(94\)90863-X](https://doi.org/10.1016/0022-0248(94)90863-X)
- [28] T. Hayashi, T. Suzuki, Y. Ema, A very-high-conductivity of in-doped CdTe film. *Japanese Journal of Applied Physics* 27, (1988) 1626.
- [29] J. Tousekova, J. Tousek, E. Elier, R. Kuzel, *Physics State Solid* 56, 315 (1979)
- [30] S. Hwang, R. L. Harper, K. S. Harris, N. C. Giles, R. N. Bicknell, J. W. Cook Jr., J. F. Schetzina, *Journal of Vacuum Science and Technology A* 6, 2821 (1988).
- [31] W. Martienssen, H. Warlimont, "Handbook of Condensed Matter and Materials Data" Springer, Germany, (2005).
- [32] G. H. Su, A critical literature review of focused electron beam induced deposition. *J. Appl. Phys.* 103 (2008) 084903. <https://doi.org/10.1063/1.2977587>
- [33] D. T. F. Marple, Optical Absorption Edge in CdTe: Experimental. *Physics Review* 150, 734 (1966).
- [34] J. Poortmans, V. Arkhipov, *Thin Film Solar Cells Fabrication, Characterization and Applications*, John Wiley & Sons, England, (2006)
- [35] A. López. Activación de celda solar de películas delgadas de CdS/CdTe, con mezcla de gases que contiene cloro. *Red de Energía Solar*.
- [36] I. M. Dharmadasa, Review of the CdCl₂ Treatment Used in CdS/CdTe Thin Film Solar Cell Development and New Evidence towards Improved Understanding. *Coatings* 4, 307 (2014) 282-307; <https://doi.org/10.3390/coatings4020282>
- [37] U. Ozgür, Y. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov, S. Dogan, V. Avrutin, S. J. Cho, H. Morkoç, A comprehensive review of ZnO materials and devices *J. Appl. Phys.* 98 (2005) 41301. <https://doi.org/10.1063/1.1992666>
- [38] H. Hartnagel, *Semiconducting Transparent Thin Films*. IOP Publishing Ltd: 1995, pp.1-358
- [39] V. A. Coleman and C. Jagadish, *Zinc Oxide Bulk, Thin Films and Nanostructures, Processing, Properties and Applications*, edited by C. Jagadish and S. Pearton, Elsevier Ltd., 14 (2006).
- [40] Chien-Yie Tsay, Wei-Tse Hsu, Comparative Studies on Ultraviolet-Light-Derived Photoresponse Properties of ZnO, AZO, and GZO Transparent Semiconductor Thin Films. *Materials*, 10, (2017), 1379. doi:10.3390/ma10121379
- [41] J. Cui. Zinc oxide nanowires. *Materials Characterization*, 64, (2012), 43-52. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2011.11.017>

- [42] I. Cosmea, S. Vázquez y Parraguirrea, *Surface & Coatings Technology*, 372 (2019) 442–450.
- [43] A. Faudoa, Películas delgadas de WO₃ para sensado del gas CO₂. Tesis de Doctorado, (2017), CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S. C.
- [44] C. A. Huerta. Síntesis y caracterización de nanoestructuras de NiW. Tesis de maestría (2018), División de estudio de posgrado de la faculta de química UMSNH
- [45] J.C. Zepeda, E. Rosendo, C. Morales, E. Camacho. Numerical Simulation and Performance Optimization of a Solar Cell Based on WO₃/CdTe Heterostructure Using NiO as HTL Layer by SCAPS 1D. *Coatings*, 13 (2023) 1436. <https://doi.org/10.3390/coatings13081436>
- [46] T. Kato. Electrical Characteristics of β – FeSi₂. Tesis de Licenciatura (2014). Instituto Tecnológico de Tokio
- [47] R. H. Bube Photovoltaic Materials, Series on Properties of Semiconductor Materials, Vol1, Edited by: Ron. C. Newman, Imperial College Press (1998) 17.
- [48] Alonso Rodríguez, M. (2014), Desarrollo de películas de óxido de zinc para celdas fotovoltaicas. Tesis de Maestría, Centro de Investigación en Micro y Nanotecnología, Universidad Veracruzana.
- [49] D. A. Neamen, *Semiconductor Physics and Devices* 4th Ed. University of New Mexico, USA. Mc Graw Hill (2012).
- [50] S. M. Sze, John Wiley and Sons. *Semiconductor Devices: Physics and Technology*, 2. Ed. USA (2001).
- [51] K. Seeger. *Physics, an introduction*, Springer; 9 Ed. Alemania (2004).
- [52] A.G. Milnes, D.L. Feucht. *Heterojunctions and Metal-Semiconductor Junctions*. Academic Press, USA (1972)
- [53] C. S. Ferekides, U. Balasubramanian, R. Mamazza, V. Viswanathan. CdTe thin film solar cells: device and technology issues. *Solar Energy*, 77 (6) (2004) 823- 830. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2004.05.023>
- [54] Ruiz Herrero, C.M. (2007), Modificación de las propiedades optoelectrónicas por medio del dopado con Bi en células fotovoltaicas basadas en CdTe. Tesis de Doctorado, Departamento de Física de Materiales, Universidad Autónoma de Madrid.
- [55] A. Goetzberger, J. Knobloch, B. Vo, *Crystalline Silicon Solar Cells*, John Wiley & Sons, 1998, pág. 9
- [56] R. Neville, *Solar Energy Conversion, The solar cell* 2^o Edición, ELSEVIER, pág. 71-72

- [57] J. Poortmans, V. Arkhipov, Thin Film Solar Cells Fabrication, Characterization and Applications, John Wiley & Sons Ltd preface, pag. ixi
- [58] I. Konovalov, Material requirements for CIS solar cells, Thin Solid Films 451 – 452 (2004) 413–419
- [59] J.C. Zepeda, E. Rosendo, C. Morales, E. Camacho. Performance simulation of solar cell based on AZO/CdTe heterostructure by SCAPS 1D software. Heliyon 9 (2023), e14547. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e14547>
- [60] A. Luque, S. Hegedus, Handbook of photovoltaic Science and engineering, Wiley, pág. 4
- [61] PV education 4. Solar Cells operation- light generated current. <http://pveducation.org/>
- [62] M.A. Green, Solar Cells Operating principles technology, and system applications. University of New South Wales, Australia. Prentice- Hall (1982).
- [63] Hu. Chenming, R. M. White, Solar Cells from basic to advanced systems. University of California, USA. Mc Graw Hill (1983).
- [64] K. Soteris, Solar energy engineering process and systems, Elsevier pag 483
- [65] M. Burgelman, P. Nollet and S. Degrave, Modelling polycrystalline semiconductor solar cells, Thin Solid Films 361-362 (2000), pp. 527-532. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(99\)00825-1](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(99)00825-1)
- [66] Burgelman, M., Decock, K. SCAPS manual. University of Gent, Belgium (2020).
- [67] X. He, Y. Song, L. Chunxiu, Z. Jingquan, F. Lianghuan Simulation of high-efficiency CdTe solar cells with Zn_{1-x}Mg_xO window layer by SCAPS software, Mater. Res. Exp, 5 (2018). <https://doi.org/10.1088/2053-1591/aacae2>
- [68] S. Ahmmed, A. Aktar, F. Rahman, J. Hossain, A. Ismail, A numerical simulation of high efficiency CdS/CdTe based solar cell using NiO HTL and ZnO TCO, Optik 223 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.165625>
- [69] Z.R. Zapukhlyak, L.I. Nykyruy, V.M. Rubish, G. Wisz, V.V. Prokopiv, L.O. Katanova, SCAPS Simulation of ZnO/CdS/CdTe/CuO Heterostructure for Photovoltaic Application, Phys and chem. Of Solid State 21 (2020) 660-668. DOI: 10.15330/pcss.21.4.660-668
- [70] A.C. Carranza, Caracterización de películas delgadas de óxido de zinc con aluminio (AZO) depositadas mediante erosión catódica modulando la potencia de plasma durante el crecimiento, Tesis de maestría, BUAP, 2020.
- [71] D.B. Li, Z. Song, R. Awni, S. Sandip, S. Niraj, R. Corey, Eliminating S-Kink to Maximize the Performance of MgZnO/CdTe Solar Cells, ACS Appl. Energy Mater 2 (2019). DOI: 10.1021/acsaem.9b00233
- [72] M.A. Rahman, Design and simulation of high-performance Cd-free Cu₂SnSe₃ solar cells with SnS electron-blocking hole transport layer and TiO₂ electron

transport layer by SCAPS-1D, SN Appl. Sciences 3 (2021). <https://doi.org/10.1007/s42452-021-04267-3>

[73] H. Abdy, A. Aletayeb, M. Kolahdouz, E.A. Soleimani, Investigation of metal-nickel oxide contacts used for perovskite solar cell, AIP Advances 9 (2019). <https://doi.org/10.1063/1.5063475>

[74] J. A. Aranovich, D. Golmayo, A. L. Fahrenbruch, R. H. Bube. Photovoltaic properties of ZnO/CdTe heterojunctions prepared by spray pyrolysis. J. Appl. Phys 1980, 51. Doi: 10.1063/1.328243

[75] A. Basak, U.P. Singh. Numerical modelling and analysis of earth abundant Sb₂S₃ and Sb₂Se₃ based solar cells using SCAPS-1D. Sol. Energy Mat. and Sol. Cells. 2021; 230. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2021.111184>

[76] Colinge, J.P. Physics of Semiconductor Devices; Kluwer Academic Publisher: Amsterdam, The Netherlands; University of California: Los Angeles, CA, USA, 2002; p. 54.

[77] H. Elfarri, M. Bouachri, A. Frimane, M. Fahoume, O. Daoudi, M, Battas. Optimization of simulations of thickness layers, temperature and defect density of CIS based solar cells, with SCAPS-1D software, for photovoltaic application. Chalcogenide Lett. 2021; 18(4): 201-213

[78] I. M. Samiul, K. Sobayel, A. Al-Kahtani, M.A. Islam, G. Muhammad, N. Amin, M. Shahiduzzaman, M. Akhtaruzzaman. Defect Study and Modelling of SnX₃-Based Perovskite Solar Cells with SCAPS-1D. Nanomaterials 2021; 11(5). <https://doi.org/10.3390/nano11051218>

[79] N.R. Paudel, K.A. Wieland, A.D. Compaan. Ultrathin CdS/CdTe solar cells by sputtering. Sol Ener Mat. & Sol Cells 2012; 105: 109-112. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2012.05.035>

[80] N. Ghobadi. Band gap determination using absorption spectrum fitting procedure. Int Nano Lett 3, 2 (2013). <https://doi.org/10.1186/2228-5326-3-2>

[81] J. Yin, S. Wu, Z. Song, C. Xu, and Q. Cui, Numerical investigations on the working mechanisms of solar cells with a CdTe-based composite-absorber layer. Chalcogenide Lett. **111**, (2020) 439-455

[82] Md. F. Rahman, M. J. A. Habib. Design and numerical investigation of cadmium telluride (CdTe) and iron silicide (FeSi₂) based double absorber solar cells to enhance power conversion efficiency. AIP Advances 12, (2022) 105317. <https://doi.org/10.1063/5.0108459>

[83] A.A. Abdelkadir, E. Oublal, M. Sahal, A. Gibaud. Numerical simulation and optimization of n-Al-ZnO/n-CdS/p-CZTSe/p-NiO (HTL)/Mo solar cell system using SCAPS-1D. Results Opt. **2022**, 8, 100257.

[84] E. Karimi, G.R. Dabbagh, S.M Ghorashi, F. Nekuee. Electrical Simulation of the Function of Tungsten Oxide in Polymeric Solar Cells, Mater. Res. Express 2019, 6, 126335. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab5e9d>

- [85] M-K. Otoufi, M. Ranjbar, A. Kermanpur, N. Taghavinia. Enhanced performance of planar perovskite solar cells using TiO₂/SnO₂ and TiO₂/WO₃ bilayer structures: Roles of the interfacial layers. *Sol. Ener.* 2020, 20, 697–707. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.08.035>
- [86] D. Mora, M. Pal, J. Santos. Theoretical modelling and device structure engineering of kesterite solar cells to boost the conversion efficiency over 20%. *Sol. Ener.* 2021, 220, 316–330. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.03.056>
- [87] D. M. Chapin, C. S. Fuller. *A new silicon p-n junction photocell for converting solar radiation into electrical power*. Journal of applied physics. (1954); doi:10.1063/1.1721711
- [88] NREL. Best research-cell efficiencies. National Renewable Energy Laboratory. <https://www.nrel.gov/pv/assets/pdfs/cell-pv-eff-thinfilm-rev210726.pdf>
- [89] D. M. Bagnall and M. Boreland, Photovoltaic technologies. *Energy Policy*, volumen 36 (2008), 4390-4396. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2008.09.070>
- [90] X. Wang, K. Q. Peng, X. J. Pan, X. Chen, Y. Yang, L. Li, X. M. Meng, W. J. Zhang and S. T. Lee. High Performance Silicon Nanowire Array Photoelectrochemical Solar Cells through Surface Passivation and Modification. *Angew. Chem., Int. Ed.*, volumen 50, 2011, pages. 9861-9865.
- [91] Y. Liu, A. Das, S. Xu, Z. Lin, C. Xu, Z. L. Wang, A. Rohatgi and C. P. Wong, Hybridizing ZnO Nanowires with Micropyramid Silicon Wafers as Superhydrophobic High-Efficiency Solar Cells. *Adv. Energy Mater.*, 2, (2012). 47-51. DOI: 10.1002/aenm.201100287
- [92] A. G. Aberle, Overview on SiN surface passivation of crystalline silicon solar cells. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* 65, (2001). 239-248. [https://doi.org/10.1016/S0927-0248\(00\)00099-4](https://doi.org/10.1016/S0927-0248(00)00099-4)
- [93] Streetman, B.G. *Solid State Electronic Devices*; Prentice Hall: University of Texas: Austin, Texas, USA, 2006; p. 68.
- [94] N. G. Galkin, A. M. Maslov, A.O. Talanov. Electronic Structure and Simulation of the Dielectric Function of β -FeSi₂ Epitaxial Films on Si (111). *Phys. of the Sol. State.* 44 (2001). 714-719. DOI: 10.1134/1.1470564
- [95] S. L. Liew, Y. Chai, H. R. Tan, J. P. Y. Tan, D. H. L. Seng, D. M. Y. Lai, C. T. Chua, D. Z. Chi. Thin Film Polycrystalline β -FeSi₂/Si Heterojunction Solar Cells via Al Incorporation and Rapid Thermal Processing. *Ener. Procedia* 15 (2012), 305-311. Doi: 10.1016/j.egypro.2012.02.036
- [96] Sites, J. R.. Quantification of losses in thin-film polycrystalline solar cells. *Solar energy materials and solar cells*, 75 (2003), 243-251
- [97] R. Triboulet, P. Siffert, *CdTe and related compounds; Physics, Defects, Hetero and nano-structures, Crystal growth, surfaces and applications*, Elsevier, Amsterdam, (2010).

- [98] S. Almosni, L. Cojocar, D. Li, S. Uchida. Tunneling-Assisted Trapping as one of the Possible Mechanisms for the Origin of Hysteresis in Perovskite Solar Cells. *Ener. Technology*, 5 (2017), 1767-1774. <https://doi.org/10.1002/ente.201700246>
- [99] M.K. Abduvohidov, R. Aliev, J.A. Gulomov. Study of the influence of the base thickness on photoelectric parameter of silicon solar cells with the new TCAD algorithms. *Sci. Tech. J. Inf. Technol. Mech. Opt.* 21 (2021), 774–784. doi: 10.17586/2226-1494-2021-21-5-774-784
- [100] A. Elrashidi, K. Elleithy. High-efficiency crystalline silicon-based solar cells using textured TiO₂ layer and plasmonic nanoparticles. *Nanomaterials*, 12 (2022), 1589. <https://doi.org/10.3390/nano12091589>
- [101] Roshi, B. Singh, V. Gupta. Modelling and simulation of silicon solar cells using PC1D. *Mater. Today: proceedings*, 54 (2022), 810-813. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.11.092>
- [102] L.A. Hernández, Simulación y evaluación experimental de una celda solar de CdTe/CdS. Tesis de Maestría, (2012), Facultad de ingeniería, UNICACH.
- [103] A. Froitzheim, R. Arnold, M. Kriegel. AFORS-HET: A computer-program for the simulation of hetero-junction solar cells to be distributed for public use, *IEEE Xplore*, 1 (2003). DOI:10.1109/WCPEC.2003.1305276
- [104] G. Womack, P. M. Kaminski, A. Abbas, K. Isbilir, R. Gottschalg, and J. M. Walls, Performance and durability of broadband antireflection coatings for thin film CdTe solar cells, *J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film.* 35 (2017), 021201. doi: 10.1116/1.4973909.
- [105] L. Ye *et al.*, Sol-gel preparation of SiO₂/TiO₂/SiO₂-TiO₂ broadband antireflective coating for solar cell cover glass. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 111(2013), 160–164. doi: 10.1016/j.solmat.2012.12.037.
- [106] Qiang-Ma, W. J. Zhang, D. H. Ma, Z. Q. Fan, X. B. Ma, and Z. Jiang, Optimal design of quadruple-layer antireflection coating structure for conversion efficiency enhancement in crystalline silicon solar cells, *Optik (Stuttg)*, 177 (2019), 123–130, 2019, doi: 10.1016/j.ijleo.2017.12.024.
- [107] H. Hernández. Estudio de capas antirreflejantes de metaestructuras para celdas solares. Tesis de Maestría, (2021), Instituto de Física, BUAP.
- [108] S. Lugo. Diseño de celdas solares en película delgada usando CuInS₂, CuInSe₂ y AgInS₂ como capas absorbedoras. Tesis de Doctorado, (2014), Facultad de Ciencias Químicas, UANL