



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA “LUIS RIVERA TERRAZAS”

**“ESTUDIO DE CAPAS ANTIRREFLEJANTES DE
METAESTRUCTURAS PARA CELDAS SOLARES”**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**MAESTRO EN CIENCIAS
(EN LA ESPECIALIDAD DE CIENCIA DE MATERIALES)**

PRESENTA
HEBER HERNÁNDEZ FLORES

DIRECTOR DE TESIS
DR. FELIPE PÉREZ RODRÍGUEZ

No. de CVU: 1007794

NOVIEMBRE DE 2021

Agradecimientos

Al Dr. Felipe Pérez Rodríguez y a la Dra. Carolina Janani Diliegros Godines por la dirección, asesoramiento, apoyo y grandes consejos al realizar el presente trabajo.

A mi familia y a mi novia Selma Kuri por el gran apoyo y la motivación incondicional que siempre me hacen dar lo mejor.

A mis amigos, principalmente Paco y Juan por los consejos y risas que nunca faltan.

Al Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas” de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla y a CONACYT por la beca otorgada para realizar mis estudios de maestría.

Índice

Resumen	5
Abstract	6
Introducción.....	7
Objetivo general	9
Objetivos particulares.....	9
Capítulo 1	11
Formalismo teórico.....	11
1.1 Propiedades ópticas de materiales	11
1.2 Reflectancia y transmitancia en una interfaz plana	14
1.3 Onda electromagnéticas en un medio periódico (Teorema de Bloch).....	18
1.4 Método de matriz de transferencia (MMT)	19
1.5 Método de expansión en modos de bulto (MEMB)	22
1.6 Método de matrices para evaluar la reflectancia total de un sistema multicapas que incluye capas absorbentes	25
1.7 Aproximación de homogeneización no local para el cálculo de parámetros efectivos	27
1.8 Determinación teórica de la eficiencia de conversión de una celda solar	30
Capítulo 2	35
Metodología.....	35
2.1 Obtención de parámetros efectivos y espectros ópticos (R y T) de metamateriales laminados	35
2.2 Incorporación de la CAR basada en HMMs laminados	36
Capítulo 3	38
Transmitancia y reflectancia para sistemas metal – dieléctrico	38
3.1 Análisis y comparación de programas de cómputo empleados en la obtención de espectros ópticos de transmisión y reflexión	38
3.2 Estudio y análisis de los diferentes parámetros que influyen en el diseño de metamateriales laminares como CAR.....	39
3.2.1 Análisis de diferentes bases de datos para Ag.....	39

3.2.2 Variación de número de bicapas.....	40
3.2.3 Variación del factor de llenado.....	41
3.2.4 Comparación con diferentes componentes dieléctricos.....	44
3.2.5 Comparación con diferentes componentes metálicos.....	45
3.3 Análisis y comparación de programas de cómputo empleados en la obtención de los componentes del tensor de permitividad efectiva.	47
Capítulo 4	49
Propuesta de metamateriales como CAR en celdas solares	49
4. 1 Metamateriales más eficientes para funcionar como CAR	49
Capítulo 5	53
Sistema dieléctrico – dieléctrico de espesores no periódicos	53
5.1 Reflectancia total de la celda solar con y sin CAR.....	53
5.2 Propuesta de sistemas completamente dieléctricos y con arreglos aleatorios	54
5.2.1 Sistemas AR optimizados en sustrato de vidrio	54
5.2.2 Sistemas AR optimizados en sustrato de vidrio y considerando la celda solar ...	55
5.2.3 Sistema AR basado en arreglo completamente dieléctrico y periódico	56
5.2 Análisis de metasuperficie basada en nanorejillas para una celda solar (CdS/CdTe)	57
Capítulo 6	59
Análisis de la eficiencia de conversión de una celda solar (CdS /CdTe) con y sin CAR.....	59
Conclusiones	61
Bibliografía.....	64

Resumen

En este trabajo se llevó a cabo el estudio de capas antirreflejantes (CAR) para celdas solares basadas en metaestructuras, como son los metamateriales hiperbólicos basados en estructuras laminares y las metasuperficies basadas en nanorejillas. Se comenzó con el análisis y obtención de espectros ópticos de reflectancia (R) y transmitancia (T) mediante el desarrollo de programas de cómputo basados en las teorías del método de matriz de transferencia (MMT) y el método de expansión en modos de bulto (MEMB) utilizando lenguaje Fortran. Dentro de este análisis se observó la generación de bandas de longitudes de onda de paso en los espectros ópticos y se entendió la forma en la que influyen diferentes parámetros en la manipulación de esta banda, lo cual fue relevante en el diseño de metamateriales (MM) laminares que pueden funcionar como CAR en el rango del espectro visible. Esta parte se complementó con la obtención de las componentes de tensor de permitividad efectiva empleando de manera eficiente la aproximación de homogeneización no local (NHA).

A pesar de obtener resultados interesantes con MM basados en 10 bicapas con capas de TiO_2 y Ag/Au , las capas metálicas generaban pérdidas en absorción y sólo se obtuvo como máximo el 71.5 % de T. Debido a esto, se optó por analizar sistemas completamente dieléctricos e incluso no periódicos. Por consiguiente, se utilizó el software de uso abierto OpenFilters y se optimizaron capas AR basadas en SiN/SiO_2 y $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$, las cuales lograron reducir la reflectancia total de una celda solar basada en CdS/CdTe en varias regiones del espectro visible.

Partiendo de la aproximación del medio efectivo (EMA, por sus siglas en inglés) se caracterizó un MM homogéneo compuesto de Cd_2SnO_4 y Ag para simular una metasuperficie (MS) basada en nanorejillas. Con la incorporación de este sistema como una capa en la interfaz TCO/CdS de una celda solar (CdS/CdTe), se obtuvieron espectros de R muy cercanos a la celda sin MS, sin embargo, en este caso también influyen las pérdidas por el compuesto metálico.

Finalmente, mediante la aproximación desarrollada por S. Sze, se pudo evaluar el desempeño de una celda solar con y sin CAR, analizando cómo se afectan parámetros característicos de la celda: V_{oc} , I_{sc} , P_m , FF y η . Como se esperaba con las capas AR de SiN/SiO_2 y $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ se mejoró la eficiencia de conversión de la celda sin CAR en un 0.049 % y 0.147%, respectivamente, respecto al 0.654% que es posible alcanzar. Aunado a esto, los parámetros que incrementaron al disminuir la R de la celda fueron la potencia máxima (P_m) y las densidades de corriente (J_{MP} y J_{SC}).

Abstract

In this work, the study of antireflection layers (ARC) for solar cells based on metastructures, such as hyperbolic metamaterials based on laminar structures and metasurfaces (MS) based on nanogrids, was carried out. It began with the analysis and obtaining of reflectance (R) and transmittance (T) optical spectra through the development of computer programs based on the theories of the transfer matrix method (TMM) and the expansion in bulk modes method (EBMM) using Fortran language. Within this analysis, the generation of passbands in the optical spectra was observed and the way in which different parameters influence the manipulation of this passband was understood, which was relevant in the design of laminar metamaterials (MM) that can function as ARC in the visible spectrum range. This part was complemented with obtaining the effective permittivity tensor by efficiently using the non-local homogenization approach (NHA).

Despite obtaining interesting results with MM based on 10 bilayers with layers of TiO_2 and Ag/Au, the metallic layers generated absorption losses and only 71.5% of T was obtained. Due to this, it was decided to analyze completely dielectric and even non-periodic systems, whereby the open-source software OpenFilters was used and AR layers based on SiN/SiO_2 and $\text{TiO}_2 / \text{SiO}_2$ were optimized, which they achieved to reduce the total reflectance of a solar cell based on CdS / CdTe in various regions of the visible spectrum.

Starting from the effective medium approximation (EMA), a homogeneous MM composed of Cd_2SnO_4 and Ag was characterized to simulate a metasurface (MS) based on nanogrids. With the incorporation of this system as a layer in the TCO/CdS interface of a solar cell (CdS / CdTe), R spectra were obtained very close to the cell without MS, however, in this case the losses due to the metallic compound also have an influence on them.

Finally, through the approach developed by S. Sze, it was possible to evaluate the performance of a solar cell with and without ARC, analyzing how characteristic parameters of the cell are affected: V_{OC} , I_{SC} , P_m , FF y η . As expected, with the AR layers of SiN/SiO_2 and $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$, the conversion efficiency of the cell without ARC was improved by 0.049 % and 0.147 %, respectively. In addition to this, the parameters that increased when the R of the cell decreased were the maximum power (P_m) and the current densities (J_{MP} and J_{SC}).

Introducción

El uso de dispositivos fotovoltaicos para aprovechar la energía solar ha tomado cada vez más importancia como tecnología renovable debido al creciente agotamiento de combustibles fósiles y a la necesidad de implementar sistemas energéticos sostenibles (ver Figura 1). Con el fin de continuar el desarrollo tecnológico y generar una viabilidad económica de los dispositivos fotovoltaicos, o celdas solares, es importante el continuo desarrollo de nuevos métodos que mejoren la eficiencia de conversión de energía y que minimicen los diferentes mecanismos de pérdida de energía en estos dispositivos.

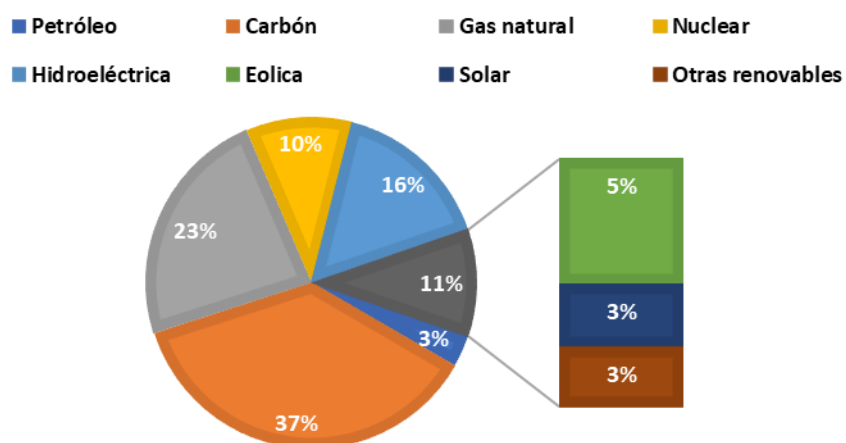


Figura 1. Producción de energía eléctrica por fuente a nivel mundial en 2019. Datos basados en BP Statistical Review of world energy (2020) (<https://ourworldindata.org/electricity-mix>).

El uso de capas antirreflejantes (CAR) en dispositivos fotovoltaicos para reducir la reflexión de la luz generada en la interfaz vidrio-aire, es un área de estudio que ha tomado fuerza en los últimos años para incrementar la eficiencia de los dispositivos [1–5].

En particular, las pérdidas (de más del 4% de luz incidente) por reflexión de la luz en celdas solares basadas en CdTe se deben principalmente a la diferencia entre el índice de refracción del sustrato de vidrio y el del aire [1]. Estas pérdidas se pueden reducir aplicando una capa antirreflejante.

Womack et al., [1] reportaron la implementación de una CAR formada por multicapas de ZrO_2 y SnO_2 en celdas solares basadas en CdS/CdTe. Ellos observaron una disminución de la reflexión media ponderada del vidrio en un 2.9% en términos absolutos, lo cual corresponde a una reducción relativa en la reflexión de 69%, y como consecuencia un aumento en la eficiencia de 3.6% respecto al dispositivo sin CAR, además de incrementar las propiedades mecánicas del sustrato de vidrio, la capa expuesta del dispositivo, lo cual favorece la larga duración de estos con un menor

costo de fabricación. También, Wang et al., [2] estudiaron dispositivos basados en perovskitas híbridas con un recubrimiento AR de silicio con nanopartículas de poliestireno con lo cual pudieron sintonizar el índice de refracción del silicio y obtener un aumento en la eficiencia de las celdas de 19.2% a 20.3%.

Otro tipo de estructuras que se han utilizado para el incremento de la eficiencia de celdas solares son los metamateriales (MM) y las metasuperficies (MS) [6]. Ambas estructuras periódicas tienen alto contraste dieléctrico (i.e. son estructuras de metal y dieléctrico) y poseen propiedades ópticas sintonizables para el control de la propagación de las ondas electromagnéticas. La frecuencia de operación de estas metaestructuras (ME) depende del tamaño de su periodo. Para su aplicación en el rango de frecuencias de la radiación solar, el periodo de las ME es típicamente de decenas de nanómetros.

El concepto de metamateriales surge con las ideas y predicciones de Veselago a finales de 1960 [7], las cuales establecen la idea de materiales que presentan un índice de refracción negativo. Actualmente este tipo de materiales son una realidad, los metamateriales son materiales diseñados artificialmente que obtienen sus propiedades en bulto no solo de sus materiales constituyentes sino también de sus arreglos estructurales periódicos, además, estas propiedades físicas no se pueden observar u obtener en materiales naturales, como es el caso del índice de refracción negativo [8–10].

Dentro de los diferentes tipos de metamateriales que se han desarrollado y fabricado, los metamateriales hiperbólicos (HMMs, por sus siglas en inglés) han surgido como uno de los más importantes en aplicaciones en el rango de frecuencias ópticas [11, 12]. Los HMMs reciben su nombre debido a la forma única que presenta su curva de isofrecuencias, la cual es hiperbólica en vez de circular como en los medios convencionales. Por otra parte, en comparación con otros MM, los HMMs presentan otra ventaja debido a que son relativamente de fácil fabricación, ya que de forma general hay dos enfoques para diseñar estos medios hiperbólicos, uno es mediante nanohilos metálicos incrustados en un medio dieléctrico y el segundo mediante una estructura laminar compuesta de capas alternas de metal y dieléctrico. Este último enfoque además de ser de fácil fabricación, se puede simplificar su integración a dispositivos fotovoltaicos que presentan una fabricación compatible [13]. Es importante mencionar que el desarrollo paralelo de la nanotecnología en los últimos años ha sido clave para facilitar los procesos de fabricación de MM a escala nanométrica, permitiendo también frecuencias de operación en el rango visible.

Recientemente [14], se ha propuesto el uso de metasuperficies con arreglo periódico unidimensional para ser utilizadas como CAR y mejorar la eficiencia de celdas solares. Estas metaestructuras son, de hecho, nanorejillas con componentes de dieléctrico y metamaterial. Este último es considerado un metamaterial con permitividad dieléctrica

cercana a cero. Aunque la propuesta de metasuperficie dada en dicho trabajo es novedosa, el estudio realizado ahí no considera estructuras metamateriales realistas como podrían ser las estructuras laminadas. Además, los espectros ópticos de difracción podrían depender fuertemente de la microestructura y orientación de los metamateriales, así como de la fracción de llenado de sus componentes. Por esta razón, para el presente trabajo resulta de gran interés el estudio de nanorejillas con metamateriales basados en estructuras laminadas que son de fabricación factible. El diseño de la CAR de metaestructura adecuada para el tipo de dispositivo es de gran relevancia ya que este permitirá buscar la metodología adecuada para su exitoso uso en dispositivos fotovoltaicos.

Por lo tanto, el presente estudio se basará en la hipótesis de que el uso de capas antirreflejantes, basadas en metaestructuras como los metamateriales laminados y las metasuperficies con arreglo periódico unidimensional, podrían mejorar la eficiencia de celdas solares, particularmente es de interés el caso de celdas solares que absorben principalmente en el rango visible, como las ya mencionadas basadas en CdS/CdTe. Para llevar a cabo el estudio también se plantearon los siguientes objetivos:

Objetivo general

Diseñar metaestructuras con componentes de metal y dieléctrico que puedan servir como capas antirreflejantes para el incremento de la eficiencia de celdas solares.

Objetivos particulares

1. Calcular y analizar los espectros ópticos (reflexión y transmisión) de metamateriales laminados para ser utilizados como capas antirreflejantes en celdas solares.
2. Calcular y analizar los espectros ópticos de metasuperficies con arreglo periódico unidimensional para ser utilizadas como capas antirreflejantes en celdas solares.

La estructura de esta tesis es de la forma: en el primer capítulo se describe el formalismo teórico de las diferentes aproximaciones y métodos que nos permiten caracterizar y describir los MM que se pretenden proponer como CAR. El segundo capítulo menciona la metodología empleada para aplicar las diferentes aproximaciones teóricas mediante diferentes programas de cómputo.

En el tercer capítulo se lleva a cabo la presentación y discusión de los diferentes resultados obtenidos a partir del análisis de espectros ópticos (R y T) además de espectros de las componentes

del tensor de permitividad efectiva y de la incorporación de la CAR propuesta en dispositivos fotovoltaicos. Por último, se presentan las conclusiones obtenidas a partir del estudio propuesto.

Capítulo 1

Formalismo teórico

1.1 Propiedades ópticas de materiales

Para poder obtener las propiedades ópticas de un material, es relevante entender la interacción entre ondas electromagnéticas y un medio, la cual se rige por las ecuaciones de Maxwell. Las ecuaciones de Maxwell son un conjunto de ecuaciones que establecen la relación entre las cantidades electromagnéticas fundamentales, las cuales son: el vector de desplazamiento eléctrico \vec{D} (C/m²), el campo de inducción magnética \vec{B} (T), el campo eléctrico \vec{E} (V/m), el campo magnético \vec{H} (A/m), la densidad de corriente eléctrica libre \vec{J}_l (A/m²) y la densidad de carga eléctrica libre ρ_l (C/m³). En el Sistema Internacional de Unidades (SI), las ecuaciones de Maxwell en forma diferencial pueden ser escritas como:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_l, \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (1.3)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J}_l + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}. \quad (1.4)$$

Las ecuaciones 1.1 y 1.2 también se conocen como la forma eléctrica y magnética de la ley de Gauss, respectivamente. La ecuación 1.3 también se refiere a la ley de inducción de Faraday y la 1.4 a la ley de Ampere – Maxwell.

Para definir completamente los campos \vec{D} , \vec{B} , \vec{E} y \vec{H} es necesario conocer las ecuaciones que relacionan a los 4 campos, estas se conocen como ecuaciones constitutivas o materiales, ya que su forma depende de las características del medio material. De forma general estas ecuaciones son:

$$\vec{D} = \vec{\epsilon} \cdot \vec{E} + \vec{\gamma} \cdot \vec{H}, \quad (1.5)$$

$$\vec{B} = \vec{\delta} \cdot \vec{E} + \vec{\mu} \cdot \vec{H}, \quad (1.6)$$

donde $\vec{\epsilon}$ y $\vec{\mu}$ son los tensores de permitividad y permeabilidad, respectivamente, por otro lado $\vec{\gamma}$ y $\vec{\delta}$ son los tensores magnetoeléctricos cruzados, que aparecen debido a la anisotropía en los materiales y a la posible quiralidad que presentan.

En cuanto al caso de los materiales isótropos lineales, las respuestas dieléctricas son directamente proporcionales a los campos aplicados y las ecuaciones constitutivas toman la forma:

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}, \quad (1.7)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H}. \quad (1.8)$$

donde ϵ y μ son la permitividad eléctrica y la permeabilidad magnética, respectivamente, ambas propiedades son características de cada material.

Particularmente, en condiciones de vacío $\epsilon = \epsilon_0$ y $\mu = \mu_0$ y las ecuaciones de Maxwell toman la siguiente forma:

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0, \quad (1.9)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (1.10)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (1.11)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (1.12)$$

El campo eléctrico \vec{E} y la inducción magnética \vec{B} satisfacen la denominada *ecuación de onda*:

$$\nabla^2 f = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}, \quad (1.13)$$

donde f es una función que describe a una onda que se propaga en el vacío a una velocidad de propagación v . Para comprobarlo, aplicamos el rotacional a la ley de Faraday y mediante el uso de la identidad vectorial del rotacional tenemos:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E}, \quad (1.14)$$

posteriormente mediante la ley de Gauss (1.9) y la ley de Ampere – Maxwell (1.12) podemos llegar a la ecuación de onda para \vec{E} :

$$\nabla^2 \vec{E} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \quad (1.15)$$

De forma semejante, para obtener la ecuación de onda para \vec{B} aplicamos el rotacional de la ley de Ampere – Maxwell y se hace uso de la ley de Gauss de la no existencia de monopolos magnéticos (1.10):

$$\nabla^2 \vec{B} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}. \quad (1.16)$$

Comparando ambas ecuaciones previas con la ecuación de onda (1.13), podemos obtener la velocidad de propagación para el campo eléctrico y la inducción magnética:

$$v = c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \approx 3 \times 10^8 \frac{m}{s}, \quad (1.17)$$

donde c es la velocidad de propagación de la luz en el vacío.

Particularmente, para solucionar la ecuación de onda, los campos \vec{E} y \vec{B} pueden escribirse como ondas planas:

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = E e^{i(k\hat{n}\cdot\vec{x} - \omega t)}, \quad (1.18)$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = B e^{i(k\hat{n}\cdot\vec{x} - \omega t)}, \quad (1.19)$$

donde \vec{E} y \vec{B} son los vectores que representan a los campos eléctrico y magnético respectivamente, \vec{x} es el vector de posición espacial, $k\hat{n}$ es el vector de propagación y ω es la frecuencia.

Al sustituir 1.18 y 1.19 en las respectivas leyes de Gauss, podemos llegar a:

$$\vec{k} \cdot \vec{E} = 0,$$

$$\vec{k} \cdot \vec{B} = 0,$$

En otros términos, tanto \vec{E} como \vec{B} son perpendiculares al vector de propagación de onda, por lo que las ondas electromagnéticas son transversales.

Por otra parte, mediante la aplicación de la ley de Faraday podemos obtener:

$$\vec{B} = \frac{\vec{k} \times \vec{E}}{\omega},$$

a partir de esta expresión podemos concluir que \vec{E} y \vec{B} son perpendiculares entre sí.

En el caso de los materiales dieléctricos, los cuales presentan una permitividad ε y una permeabilidad μ característica, las ondas electromagnéticas se propagan con una velocidad:

$$v = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}} = \frac{c}{n}, \quad (1.20)$$

donde c es la velocidad de propagación de la luz en el vacío y n es el índice de refracción del medio, el cual a partir de 1.20 y 1.17 podemos definir como:

$$n = \sqrt{\frac{\epsilon\mu}{\epsilon_0\mu_0}}. \quad (1.21)$$

Debido a que la mayoría de los materiales dieléctricos no son magnéticos, presentan una permeabilidad igual a la del vacío μ_0 , por lo tanto $n = \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}}$, las propiedades ópticas solo serán distinguibles por la permitividad. Además, para materiales con $\mu \approx \mu_0$, tanto ϵ como n son funciones de la frecuencia (ω). Estas propiedades ópticas se pueden expresar de forma compleja como $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$, con la parte real ϵ' e imaginaria ϵ'' de la permitividad y como $N = n + iK$, donde N es el índice de refracción complejo y K representa la parte imaginaria del índice de refracción, la cual se conoce como coeficiente de extinción ya que representa una absorción (o atenuación) de la onda electromagnética.

Aunque es más adecuada para usar en las ecuaciones de Maxwell, la permitividad no es directamente accesible experimentalmente a partir de mediciones ópticas, por otro lado, las funciones directamente accesibles son la reflectancia R , el índice de refracción n y el coeficiente de extinción K . Debido a esto es importante tener en cuenta que por definición n y K están relacionados a la permitividad mediante:

$$\sqrt{\epsilon} = N = n + iK. \quad (1.22)$$

Partiendo de esta ecuación podemos relacionar la parte real e imaginaria de la permitividad y del índice de refracción complejo con las siguientes expresiones [15]:

$$\epsilon' = n^2 - K^2, \quad (1.23)$$

$$\epsilon'' = 2nK, \quad (1.24)$$

$$n = \sqrt{\frac{\epsilon' + \sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2}}{2}}, \quad (1.25)$$

$$K = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} - \epsilon'}{2}}. \quad (1.26)$$

1.2 Reflectancia y transmitancia en una interfaz plana

Cuando una onda electromagnética plana se propaga a través de un medio a hacia un medio b con diferentes propiedades (n , ϵ y μ), podemos emplear las ecuaciones de Maxwell para obtener

cuatro condiciones que se cumplen en la interfaz entre ambos medios. En esta interfaz pueden existir tanto una densidad superficial de carga eléctrica (σ) como una densidad superficial de corriente eléctrica (\vec{J}), esto debido a que los campos \vec{D} , \vec{B} , \vec{H} y \vec{E} son discontinuos entre medios con diferentes permitividades y permeabilidades separados por una interfaz.

En el medio a , podemos encontrar a los campos \vec{D}_a y \vec{H}_a , por otra parte, en el medio b están los campos \vec{D}_b y \vec{H}_b . Si existe una densidad superficial de carga eléctrica libre σ , la componente del campo \vec{D} perpendicular a la interfaz, no será continua, por lo tanto:

$$D_a^\perp - D_b^\perp = \sigma, \quad (1.27)$$

donde D_a^\perp y D_b^\perp son componentes del campo \vec{D} (a y b) normales a la interfaz.

Por otra parte, en cuanto al campo de inducción magnética \vec{B} , la componente normal a la interfaz se conserva, por lo tanto:

$$B_a^\perp = B_b^\perp, \quad (1.28)$$

donde B_a^\perp y B_b^\perp son componentes del campo \vec{B} (a y b) normales a la interfaz.

De manera similar al caso anterior, en el caso del campo eléctrico \vec{E} también se puede obtener que la componente paralela a la interfaz se conserva, entonces:

$$E_a^\parallel = E_b^\parallel, \quad (1.29)$$

donde E_a^\parallel y E_b^\parallel son componentes del campo \vec{E} (a y b) paralelas a la interfaz.

Finalmente, considerando que existe una densidad de corriente superficial \vec{J} en la interfaz de los medios a y b, la componente del campo magnético \vec{H} paralela a la interfaz, no será continua:

$$H_a^\parallel - H_b^\parallel = \vec{j}^\parallel, \quad (1.30)$$

donde H_a^\parallel y H_b^\parallel son componentes del campo \vec{H} (a y b) paralelas a la interfaz y \vec{j}^\parallel es componente paralela a la interfaz de la densidad de corriente eléctrica.

Particularmente, si en la interfaz no existe densidad de carga ni de corriente superficial, las condiciones 1.27 y 1.30 correspondientes a las componentes de los campos \vec{D} y \vec{H} (a y b), serán iguales a cero y por lo tanto serán continuas al cruzar la interfaz.

Otro fenómeno estudiado cuando una onda electromagnética se propaga de un medio con índice de refracción n_a hacia otro medio con índice de refracción n_b , es el caso de la refracción y la

reflexión. Como se observa en el esquema de la Figura 2, se considera la propagación de una onda con un vector de onda \vec{k} que se propaga de un medio a (ϵ_a y μ_a) a un medio b (ϵ_b y μ_b).

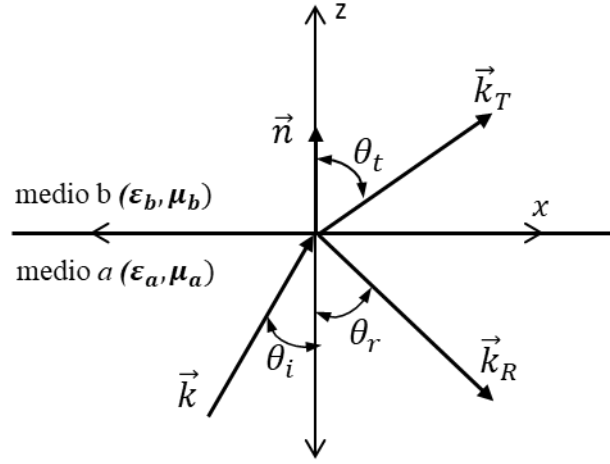


Figura 2. Propagación del vector de una onda electromagnética a través de dos medios (a y b). \vec{k} es el vector de onda incidente, \vec{k}_R el vector de onda reflejada, \vec{k}_T el vector de onda transmitida y \vec{n} es el vector normal a la interfaz.

En el esquema anterior θ_i es el ángulo de incidencia de la onda, medido respecto a \vec{n} , θ_t es el ángulo de transmisión de la onda y θ_r el ángulo de reflexión de la onda. Las ecuaciones para describir a las ondas del fenómeno descrito en la Figura 1, se pueden observar en la siguiente tabla:

Tabla 1. Ecuaciones que definen a los campos (\vec{B} y \vec{E}) de las ondas en la Figura 1.

Campo	Onda incidente	Onda transmitida	Onda reflejada
\vec{E}	$\vec{E}_I = \vec{E}_{0I} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}$,	$\vec{E}_T = \vec{E}_{0T} e^{i(\vec{k}_T \cdot \vec{x} - \omega t)}$,	$\vec{E}_R = \vec{E}_{0R} e^{i(\vec{k}_R \cdot \vec{x} - \omega t)}$,
\vec{B}	$\vec{B}_I = \sqrt{\epsilon_a \mu_a} \frac{\vec{k} \times \vec{E}_I}{k}$	$\vec{B}_T = \sqrt{\epsilon_b \mu_b} \frac{\vec{k}_T \times \vec{E}_T}{k_T}$	$\vec{B}_R = \sqrt{\epsilon_a \mu_a} \frac{\vec{k}_R \times \vec{E}_R}{k_R}$

También, los campos en la interfaz de los medios a y b , se comportan de acuerdo con las condiciones de frontera (1.27 – 1.30). Entonces, al sustituir las ecuaciones de la Tabla 1 en términos del campo \vec{E} y del vector normal a la interfaz \vec{n} , se obtienen las ecuaciones:

$$[\epsilon_a(\vec{E}_{0I} + \vec{E}_{0R}) - \epsilon_b \vec{E}_{0T}] \cdot \vec{n} = 0, \quad (1.31)$$

$$[\vec{k} \times \vec{E}_{0I} + \vec{k}_R \times \vec{E}_{0R} + \vec{k}_T \times \vec{E}_{0T}] \cdot \vec{n} = 0, \quad (1.32)$$

$$[\vec{E}_{0I} + \vec{E}_{0R} - \vec{E}_{0T}] \times \vec{n} = 0, \quad (1.33)$$

$$\left[\frac{1}{\mu_a} (\vec{k} \times \vec{E}_{0I} + \vec{k}_R \times \vec{E}_{0R}) - \frac{1}{\mu_b} (\vec{k}_T \times \vec{E}_{0T}) \right] \times \vec{n} = 0, \quad (1.34)$$

donde E_{0I} , E_{0T} y E_{0R} son las amplitudes de la onda incidente, transmitida y reflejada, respectivamente.

Es importante definir los dos casos que se deben analizar, uno es con polarización S, que ocurre cuando el campo eléctrico \vec{E} es perpendicular al plano de incidencia (definido por el vector de onda incidente \vec{k} y el vector normal a la interfaz \vec{n}), por otra parte, otro caso es con polarización P, este ocurre cuando el campo \vec{E} es paralelo al plano de incidencia.

En el caso de polarización S, al aplicar las condiciones de frontera (1.31-1.34), estas se reducen a las siguientes expresiones:

$$E_{0I} + E_{0R} - E_{0T} = 0, \quad (1.35)$$

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_a}{\mu_a}} (E_{0I} - E_{0R}) \cos \theta_i - \sqrt{\frac{\varepsilon_b}{\mu_b}} E_{0T} \cos \theta_t = 0, \quad (1.36)$$

A partir de estas ecuaciones podemos obtener el cociente de E_{0R} respecto a E_{0I} , el cual resulta de la siguiente forma:

$$\frac{E_{0R}}{E_{0I}} = \frac{n_a \cos \theta_i - \frac{\mu_a}{\mu_b} \sqrt{n_b^2 - n_a^2 \sin^2 \theta_i}}{n_a \cos \theta_i + \frac{\mu_a}{\mu_b} \sqrt{n_b^2 - n_a^2 \sin^2 \theta_i}}. \quad (1.37)$$

La norma al cuadrado de $\frac{E_{0R}}{E_{0I}}$, se define como coeficiente de reflexión.

Análogamente, de las ecuaciones 1.35 y 1.36 se puede obtener el cociente de E_{0T} respecto a E_{0I} para obtener:

$$\frac{E_{0T}}{E_{0I}} = \frac{2n_a \cos \theta_i}{n_a \cos \theta_i + \frac{\mu_a}{\mu_b} \sqrt{n_b^2 - n_a^2 \sin^2 \theta_i}}. \quad (1.38)$$

En este caso, la norma al cuadrado de $\frac{E_{0T}}{E_{0I}}$ se define como coeficiente de transmisión.

A su vez, en el caso de polarización P las condiciones de frontera (1.31-1.34) se reducen a:

$$\cos \theta_i (E_{0I} - E_{0R}) - \cos \theta_t E_{0T} = 0, \quad (1.39)$$

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_a}{\mu_a}} (E_{0I} + E_{0R}) - \sqrt{\frac{\varepsilon_b}{\mu_b}} E_{0T} = 0. \quad (1.40)$$

Con estas ecuaciones podemos obtener los cocientes $\frac{E_{0R}}{E_{0I}}$ y $\frac{E_{0T}}{E_{0I}}$, de forma similar al caso anterior:

$$\frac{E_{0R}}{E_{0I}} = \frac{\frac{\mu_a}{\mu_b} n_b^2 \cos \theta_i - n_a \sqrt{n_b^2 - n_a^2 \sin^2 \theta_i}}{\frac{\mu_a}{\mu_b} n_b^2 \cos \theta_i + n_a \sqrt{n_b^2 - n_a^2 \sin^2 \theta_i}}, \quad (1.41)$$

$$\frac{E_{0T}}{E_{0I}} = \frac{2n_a n_b \cos \theta_i}{\frac{\mu_a}{\mu_b} n_b^2 \cos \theta_i + n_a \sqrt{n_b^2 - n_a^2 \sin^2 \theta_i}}. \quad (1.42)$$

Un caso particular es el de incidencia normal, el cual ocurre cuando $\theta_i = 0$, cuando esto ocurre, las relaciones para ambos tipos de polarización (1.37, 1.38, 1.41 y 1.42) se reducen a:

$$\frac{E_{0R}}{E_{0I}} = \frac{\sqrt{\frac{\mu_a \varepsilon_b}{\mu_b \varepsilon_a}} - 1}{\sqrt{\frac{\mu_a \varepsilon_b}{\mu_b \varepsilon_a}} + 1} = \frac{n_b - n_a}{n_b + n_a}, \quad (1.43)$$

$$\frac{E_{0T}}{E_{0I}} = \frac{2}{\sqrt{\frac{\mu_a \varepsilon_b}{\mu_b \varepsilon_a}} + 1} = \frac{2n_a}{n_b + n_a}, \quad (1.44)$$

1.3 Onda electromagnéticas en un medio periódico (Teorema de Bloch)

La propagación de radiación electromagnética en un medio periódico es muy similar a la propagación de electrones dentro de un arreglo cristalino. El teorema de Bloch nos permite describir el movimiento de los electrones a través de un arreglo cristalino (red de Bravais), expresa que *las funciones propias de la ecuación de onda para un potencial periódico son el producto de una onda plana $e^{i\vec{k}_B \cdot \vec{r}}$ por una función $u_{k_B}(\vec{r})$ que posee la periodicidad de la red cristalina*, es decir:

$$\psi_{\vec{k}_B}(\vec{r}) = u_{k_B}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_B \cdot \vec{r}},$$

donde $\psi_{\vec{k}_B}$ es la función de onda de Bloch y es solución a la ecuación de Schrödinger, \vec{k}_B es el vector de onda de Bloch.

Dentro de un cristal podemos considerar que los electrones se encuentran bajo la acción de un potencial $U(\vec{r})$ que presenta la periodicidad de la red, es decir:

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}),$$

en donde \vec{r} es el vector de posición de un electrón y \vec{R} es el vector de traslación de la red cristalina.

Ahora, en un medio periódico compuesto por multicapas de ciertos materiales, la permitividad es una función periódica de las coordenadas. Este sistema puede analizarse como una red unidimensional invariante bajo traslaciones, y debido a esto podemos describir al campo eléctrico de la onda electromagnética que se propaga en este medio como una onda de Bloch:

$$E(z + a) = E(z)e^{ik_B a},$$

donde a es el periodo del medio periódico.

Esta última ecuación, conocida como el teorema de Bloch, nos permite relacionar el valor del campo eléctrico de una onda en la posición z con su valor luego de haberse propagado a lo largo de un periodo a , o sea en la posición $z+a$.

1.4 Método de matriz de transferencia (MMT)

Cuando se pretende analizar un sistema multicapas donde el número de capas se hace grande, realizar un análisis similar al de la sección 1.2 para obtener la reflectancia (R) y transmitancia (T) del sistema, se vuelve bastante complicado debido a la cantidad de ecuaciones que se deben manejar. Uno de los métodos más comunes para realizar el análisis mencionado es el caso del método de matriz de transferencia (MMT), este método nos permite calcular la reflectancia (R), transmitancia (T) y absorbancia (A) de ondas planas incidentes sobre una secuencia arbitraria de capas infinitamente extendidas, también es muy útil para casos donde el sistema multicapa es periódico [16]. En MMT cada interfaz del sistema multicapa se puede describir por una matriz de transferencia y cada capa por una matriz de propagación. A partir de estas matrices se puede definir una matriz que describe todo el sistema para poder determinar R , T y A .

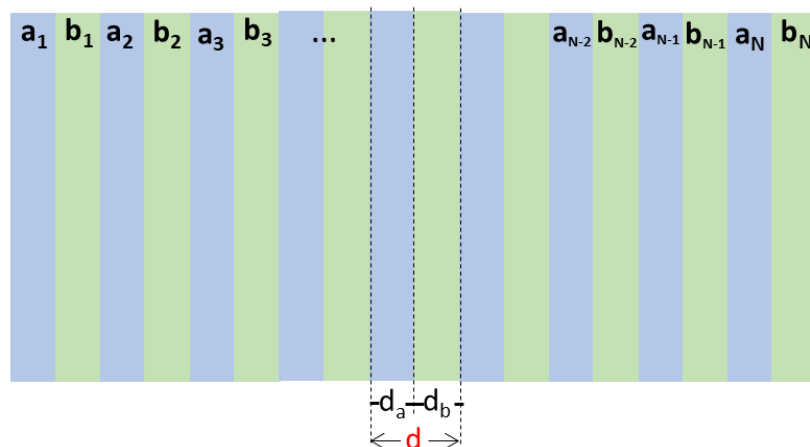


Figura 3. Esquema de un sistema periódico multicapa basado en bicapas de diferentes medios dieléctricos, a y b .

Si consideramos el caso de un sistema periódico basado en multicapas de diferentes medios, por ejemplo, bicapas de diferentes dieléctricos (a y b) repetidas N veces como en la Figura 3, la matriz

de transferencia \widehat{M} para una celda unitaria o bicapa es el producto de cuatro matrices como en la siguiente relación [17, 18]:

$$\widehat{M} = \widehat{M}^{(ba)}\widehat{M}^{(b)}\widehat{M}^{(ab)}\widehat{M}^{(a)}. \quad (1.45)$$

La matriz de transferencia $\widehat{M}^{(a)}$ representa la propagación libre de una onda dentro de la capa del medio a y se define por:

$$\widehat{M}^{(a)} = \begin{pmatrix} e^{ik_a d_a} & 0 \\ 0 & e^{-ik_a d_a} \end{pmatrix}, \quad (1.46)$$

donde los elementos diagonales son exponenciales que contienen el desplazamiento de fase $k_a d_a$ producido por la onda dentro del espesor d_a de la capa del medio a . También, de la expresión anterior podemos observar que la matriz es diagonal y unimodular ($\det \widehat{M}^{(a)} = 1$).

De forma análoga, la propagación libre de una onda dentro de la capa del medio b se puede definir por una matriz de transferencia $\widehat{M}^{(b)}$ definida igual que la expresión 1.46, pero con el subíndice b .

En cuanto a la matriz de transferencia $\widehat{M}^{(ab)}$, ésta describe las propiedades de transmisión y reflexión de la interfaz entre las capas a_n y b_n (ver Figura 2), esta matriz tiene la forma:

$$\widehat{M}^{(ab)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + Z_b/Z_a & 1 - Z_b/Z_a \\ 1 - Z_b/Z_a & 1 + Z_b/Z_a \end{pmatrix}, \quad (1.47)$$

donde Z_b y Z_a son las impedancias de los diferentes medios ($Z = \frac{\mu}{n}$).

Por otro lado, la matriz de transferencia $\widehat{M}^{(ba)}$, se define por:

$$\widehat{M}^{(ba)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + Z_a/Z_b & 1 - Z_a/Z_b \\ 1 - Z_a/Z_b & 1 + Z_a/Z_b \end{pmatrix}, \quad (1.48)$$

En este caso, la matriz de transferencia $\widehat{M}^{(ba)}$ describe la transferencia de las ondas que van de la capa b_n a la capa a_{n+1} . Se puede notar que las matrices de transferencia $\widehat{M}^{(ba)}$ y $\widehat{M}^{(ab)}$ presentan la misma estructura y, además, son inversas una respecto a la otra ($\widehat{M}^{(ba)} = \widehat{M}^{(ab)^{-1}}$). Otro punto para resaltar es que estas matrices en las interfaces no son unimodulares y sus respectivos determinantes presentan los siguientes valores:

$$\det \widehat{M}^{(ab)} = Z_b/Z_a, \quad \det \widehat{M}^{(ba)} = \det \widehat{M}^{(ab)^{-1}} = Z_a/Z_b.$$

Entonces, al realizar el producto de matrices como en la ecuación 1.45, podemos encontrar los elementos de la matriz de transferencia \widehat{M} para una celda unitaria del sistema mencionado:

$$M_{11} = [\cos(k_b d_b) + i\alpha_+ \text{sen}(k_b d_b)]e^{ik_a d_a}, \quad (1.49a)$$

$$M_{12} = i\alpha_- \text{sen}(k_b d_b)e^{-ik_a d_a}, \quad (1.49b)$$

$$M_{21} = -i\alpha_- \text{sen}(k_b d_b) e^{ik_a d_a}, \quad (1.49c)$$

$$M_{22} = [\cos(k_b d_b) - i\alpha_+ \text{sen}(k_b d_b)] e^{-ik_a d_a}, \quad (1.49d)$$

donde α_{\pm} son factores de desajuste que miden el acoplamiento de la capa del medio a con la capa del medio b y se definen mediante las siguientes ecuaciones:

$$\alpha_{\pm} = \frac{1}{2} \left(\frac{Z_a}{Z_b} \pm \frac{Z_b}{Z_a} \right), \quad \alpha_+^2 - \alpha_-^2 = 1. \quad (1.50)$$

Debido a que la matriz de transferencia \hat{M} es resultado de las matrices ya mencionadas, esta matriz también es unimodular ($\det \hat{M} = 1$).

Ahora, la matriz de transferencia para el sistema de la Figura 3 con N bicapas o celdas unitarias, es definida por el producto de las matrices de transferencia $\hat{M}(c)$ de cada celda unitaria en la estructura, que presentan los índices $c = 1, 2, 3, \dots, N$. Sin embargo, debido a que las celdas unitarias son idénticas y periódicas, sus matrices de transferencia son iguales y no dependen del índice c , además, las impedancias $Z_{a,b}$ y los cambios de fase $\varphi_{a,b}$ de cada capa constituyente (a y b) permanecen constantes de celda en celda. Por lo tanto, tenemos la siguiente relación:

$$\begin{pmatrix} A_{N+1}^+ \\ A_{N+1}^- \end{pmatrix} = \hat{M}^{(T)} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix}, \quad \hat{M}^{(T)} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}^N. \quad (1.51)$$

La N -ésima potencia de la matriz $\hat{M}^{(T)}$ satisface la condición de unimodularidad y se puede definir mediante la identidad de Chebyshev de la siguiente forma [17, 18]:

$$\hat{M}^{(T)} = \begin{pmatrix} M_{11} J_N - J_{N-1} & M_{12} J_N \\ M_{21} J_N & M_{22} J_N - J_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (1.52)$$

donde J_N es el denominado polinomio de Chebyshev y tiene la forma:

$$J_N = \frac{\text{sen}(N\mu_B)}{\text{sen}(\mu_B)}, \quad (1.53)$$

donde μ_B es la fase de Bloch y se define por la siguiente relación de dispersión:

$$2\cos(\mu_B) = M_{11} + M_{22}. \quad (1.54)$$

En este caso, las transmitancias y reflectancias izquierdas (-) y derechas (+) son iguales y de forma general sus expresiones son:

$$T_N = \frac{1}{1 + |M_{12}^{(T)}|^2}, \quad \frac{R_N}{T_N} = |M_{12}^{(T)}|^2. \quad (1.55)$$

A partir de lo anterior, podemos emplear la matriz de transferencia $\widehat{M}^{(T)}$ (1.52) y los elementos de matriz (1.49a-1.49d) para obtener una expresión explícita para la transmitancia del sistema periódico analizado:

$$T_N = \frac{1}{1 + \left| M_{12}^{(T)} \right|^2 J_N^2} = \frac{1}{1 + \alpha^2 \text{sen}^2(k_b d_b) \text{sen}^2(N \mu_B) / \text{sen}^2(\mu_B)}. \quad (1.56)$$

Para aplicar esta ecuación es importante el complemento de la relación de dispersión con la forma $\cos(\mu_B) = R_{NM_{22}}$, la cual se puede definir mediante:

$$\cos(\mu_B) = \cos(k_a d_a) \cos(k_b d_b) - \frac{1}{2} \left(\frac{Z_a}{Z_b} \pm \frac{Z_b}{Z_a} \right) \text{sen}(k_a d_a) \text{sen}(k_b d_b). \quad (1.57)$$

1.5 Método de expansión en modos de bulto (MEMB)

Como ya se mencionó, el método de matriz de transferencia es uno de los más comunes para analizar y obtener los espectros ópticos R, T y A de sistemas basados en arreglos con multicapas, sin embargo, un método que se ha utilizado para complementar este tipo de análisis y que permite tener una interpretación física de los espectros ópticos [19], es el caso del método de expansión en modos de bulto (MEMB). Las ideas principales de este método nos dicen que los campos eléctricos y magnéticos dentro de la estructura multicapa de tamaño finito se expresan como una superposición de dos ondas normales de Bloch [20–22]. Para presentar este método, incluimos la descripción formal del desarrollo en [23].

En este caso, también vamos a considerar un sistema periódico multicapa basado en bicapas de diferentes medios repetidas N veces, sin embargo, a diferencia de la sección del MMT en este caso se consideran un medio metálico y otro dieléctrico (ver Figura 3), el cual es uno de los sistemas de interés en el presente estudio.

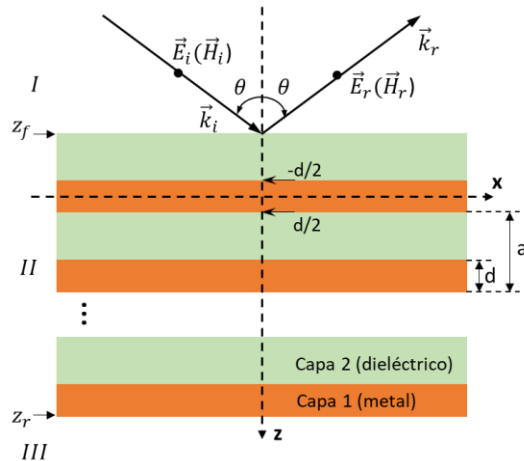


Figura 4. Esquema de un sistema periódico multicapa basado en bicapas de medios metálico y dieléctrico.

A partir del esquema de la Figura 4, vamos a considerar como primer caso una onda plana electromagnética monocromática con polarización S, la cual incide en la superficie frontal del arreglo multicapa ($z = z_f$). En cuanto al campo eléctrico total presente en el medio I , éste puede definirse como la suma del campo incidente (\vec{E}_i) con su vector de onda $\vec{k}_i = (k_x, 0, k_{zI})$ más el campo de la onda reflejada especularmente (\vec{E}_r) con su vector de onda $\vec{k}_r = (k_x, 0, -k_{zI})$, obteniendo la siguiente expresión:

$$\vec{E}_I = (E_i e^{ik_{zI}(z-z_f)} + E_r e^{-ik_{zI}(z-z_f)}) e^{ik_x x - i\omega t} \hat{y}, \quad (1.58)$$

donde los componentes del vector de onda incidente (\vec{k}_i) que son diferentes de cero son $k_x = k_I \sin\theta$ y $k_{zI} = k_I \cos\theta$, a su vez $k_I = (\omega/c)\sqrt{\epsilon_I}$, ϵ_I es la permitividad del medio I y θ el ángulo de incidencia.

Por otro lado, el componente eléctrico de la onda electromagnética transmitida en el medio homogéneo III , se puede expresar como:

$$\vec{E}_{III} = E_t e^{ik_x x + ik_{zIII}(z-z_r) - i\omega t} \hat{y}, \quad (1.59)$$

donde $k_{zIII} = \sqrt{\epsilon_{III}\omega^2/c^2 - k_x^2}$.

El campo eléctrico dentro del arreglo multicapa (medio II) se expresa de la siguiente manera:

$$\vec{E}_{II} = (B_1^+ U_{k_z}(z) e^{ik_z z} + B_1^- U_{-k_z}(z) e^{-ik_z z}) e^{ik_x x - i\omega t} \hat{y}, \quad (1.60)$$

donde B_1^\pm son las amplitudes que se determinarán y $U_{\pm k_z}$ son las partes periódicas de las ondas de Bloch ($U_{\pm k_z}(z+a) = U_{\pm k_z}(z)$), las cuales se pueden expresar de forma conveniente como [22]:

$$U_{\pm k_z}(z) = e^{\pm ik_z z} \begin{cases} \frac{A_2^\pm}{B_1^\pm} e^{ik_{z2} z} + \frac{B_2^\pm}{B_1^\pm} e^{-ik_{z2} z} & \text{si } d/2 - a \leq z \leq -d/2, \\ \frac{A_1^\pm}{B_1^\pm} e^{ik_{z1} z} + e^{-ik_{z1} z} & \text{si } -d/2 \leq z \leq d/2. \end{cases} \quad (1.61)$$

En esta expresión, las amplitudes A_1^\pm , B_1^\pm , A_2^\pm y B_2^\pm representan a las amplitudes de las ondas planas que se encuentran dentro de las capas metálica y dieléctrica de la celda unitaria cero del sistema.

Partiendo de la relación de dispersión para polarización S [16]:

$$\cos(k_z a) = \cos(k_{z1} d) \cos(k_{z2} (a-d)) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_{z1}}{k_{z2}} + \frac{k_{z2}}{k_{z1}} \right) \sin(k_{z1} d) \sin(k_{z2} (a-d))$$

la cual se retomará y explicará más adelante, existen dos soluciones independientes: una con el número de onda de Bloch k_z y la otra con $-k_z$ sin importar en que zona de Brillouin se encuentra k_z .

Por lo tanto, utilizando las ecuaciones 1.58 -1.60, la ley de Faraday y aplicando las condiciones de frontera de Maxwell para las componentes tangenciales de los campos magnético y eléctrico totales en las superficies frontal ($z = z_f$) y trasera ($z = z_r$) del sistema multicapas, se pueden determinar las siguientes expresiones:

$$E_i + E_r = \tilde{\alpha}^+ B_1^+ + \tilde{\alpha}^- B_1^-, \quad ik_{zI}(E_i + E_r) = \tilde{\alpha}'^+ B_1^+ + \tilde{\alpha}'^- B_1^-, \quad (1.62)$$

$$E_t = \tilde{\beta}^+ B_1^+ + \tilde{\beta}^- B_1^-, \quad ik_{zIII} E_t = \tilde{\beta}'^+ B_1^+ + \tilde{\beta}'^- B_1^-, \quad (1.63)$$

Donde se introdujeron las siguientes cantidades:

$$\tilde{\alpha}^\pm = \alpha^\pm e^{\pm ik_z z_f}, \quad \tilde{\alpha}'^\pm = \alpha'^\pm e^{\pm ik_z z_f} \quad (1.64)$$

$$\tilde{\beta}^\pm = \beta^\pm e^{\pm ik_z z_r}, \quad \tilde{\beta}'^\pm = \beta'^\pm e^{\pm ik_z z_r} \quad (1.65)$$

donde:

$$\alpha^\pm = U_{\pm k_z}(z_f), \quad \alpha'^\pm = \left. \frac{dU_{\pm k_z}}{dz} \right|_{z=z_f} \pm ik_z U_{\pm k_z}(z_f), \quad (1.66)$$

$$\beta^\pm = U_{\pm k_z}(z_r), \quad \beta'^\pm = \left. \frac{dU_{\pm k_z}}{dz} \right|_{z=z_r} \pm ik_z U_{\pm k_z}(z_r). \quad (1.67)$$

Resolviendo el sistema algebraico de las ecuaciones 1.62 y 1.63, podemos obtener las ecuaciones explicitas para los cocientes de las amplitudes de las ondas reflejada (E_r) y transmitida (E_t) respecto a la amplitud de la onda incidente (E_i):

$$r_s = \frac{E_r}{E_i} = \frac{ik_{zI}(\alpha^+ + \alpha^- \gamma) - (\alpha'^+ + \alpha'^- \gamma)}{ik_{zI}(\alpha^+ + \alpha^- \gamma) + (\alpha'^+ + \alpha'^- \gamma)}, \quad (1.68)$$

$$t_s = \frac{E_t}{E_i} = \frac{2ik_{zI}(\beta^+ e^{ik_z(z_r-z_f)} + \beta^- \gamma e^{-ik_z(z_r-z_f)})}{ik_{zI}(\alpha^+ + \alpha^- \gamma) + (\alpha'^+ + \alpha'^- \gamma)}, \quad (1.69)$$

donde:

$$\gamma = \frac{ik_{zIII} \beta^+ - \beta'^+}{ik_{zIII} \beta^- - \beta'^-} e^{2ik_z(z_r-z_f)}. \quad (1.70)$$

Sabemos que podemos obtener tanto la reflectancia (R) como la transmitancia (T) aplicando la norma al cuadrado para los cocientes de las ecuaciones 1.68 y 1.67.

Por otra parte, considerando ahora el caso donde la onda plana electromagnética monocromática, la cual incide sobre el sistema multicapa, presenta polarización P. La forma para calcular las expresiones de los coeficientes de transmisión y reflexión para este caso es muy similar al caso con polarización S y resultan de la siguiente manera:

$$r_p = \frac{H_r}{H_i} = \frac{\frac{ik_{zI}}{\varepsilon_I} (\zeta^+ + \zeta^- \phi) - \frac{1}{\varepsilon(z_f)} (\zeta'^+ + \zeta'^- \phi)}{\frac{ik_{zI}}{\varepsilon_I} (\zeta^+ + \zeta^- \phi) + \frac{1}{\varepsilon(z_f)} (\zeta'^+ + \zeta'^- \phi)}, \quad (1.71)$$

$$t_p = \frac{H_t}{H_i} = \frac{2 \frac{ik_{zI}}{\varepsilon_I} (\eta^+ e^{ik_z(z_r - z_f)} + \eta^- \phi e^{-ik_z(z_r - z_f)})}{\frac{ik_{zI}}{\varepsilon_I} (\zeta^+ + \zeta^- \phi) + \frac{1}{\varepsilon(z_f)} (\zeta'^+ + \zeta'^- \phi)}, \quad (1.72)$$

donde H_r , H_t y H_i son las amplitudes de las ondas reflejada, transmitida e incidente, respectivamente.

También se definen las siguientes cantidades:

$$\phi = - \frac{ik_{zIII} \eta^+ / \varepsilon_{III} - \eta'^+ / \varepsilon(z_r)}{ik_{zIII} \eta^- / \varepsilon_{III} - \eta'^- / \varepsilon(z_r)} e^{2ik_z(z_r - z_f)}, \quad (1.73)$$

$$\zeta^\pm = V_{\pm k_z}(z_f), \quad \zeta'^\pm = \left. \frac{dV_{\pm k_z}}{dz} \right|_{z=z_f} \pm ik_z V_{\pm k_z}(z_f), \quad (1.74)$$

$$\eta^\pm = V_{\pm k_z}(z_r), \quad \eta'^\pm = \left. \frac{dV_{\pm k_z}}{dz} \right|_{z=z_r} \pm ik_z V_{\pm k_z}(z_r), \quad (1.75)$$

donde $V_{\pm k_z}(z)$ representan las partes periódicas de la onda de Bloch para el campo magnético total en el arreglo multicapa (medio II) y de forma similar al caso previo se puede expresar como:

$$V_{\pm k_z}(z) = e^{\pm ik_z z} \begin{cases} \frac{C_2^\pm}{D_1^\pm} e^{ik_{z2}z} + \frac{D_2^\pm}{D_1^\pm} e^{-ik_{z2}z} & \text{si } d/2 - a \leq z \leq -d/2, \\ \frac{C_1^\pm}{D_1^\pm} e^{ik_{z1}z} + e^{-ik_{z1}z} & \text{si } -d/2 \leq z \leq d/2. \end{cases} \quad (1.76)$$

Finalmente, las amplitudes C_1^\pm , D_1^\pm , C_2^\pm y D_2^\pm también se asumen como las amplitudes de las ondas planas que se encuentran dentro de las capas metálica y dieléctrica de la celda unitaria cero del sistema.

1.6 Método de matrices para evaluar la reflectancia total de un sistema multicapas que incluye capas absorbentes

Ya se ha mencionado la utilidad de los métodos basados en matrices para facilitar los análisis de espectros ópticos (R y T) en sistemas multicapas, otro método que será de utilidad en el presente estudio es el desarrollado por Heavens [24], este método introduce una notación para los elementos de matriz de forma que permitan expresar relaciones para cualquier número de capas y por otra parte, de forma conveniente los resultados expresados en términos de coeficientes de Fresnel presentan una forma compleja, esto debido a que la m -ésima interfaz (m^{th}) se escribe como $r_m = g_m + ih_m$ y $t_m = 1 + g_m + ih_m$. Por lo tanto, la última y penúltima capa pueden ser consideradas como medios absorbentes, con índices de refracción de la forma $n_{m-1} = n_{m-1} - ih_{m-1}$ y $n_m = n_m - ih_m$, esta

consideración es de interés ya que las celdas solares que se analizarán presentan una estructura en la que las últimas dos capas son medios semiconductores absorbentes, como el caso de celdas solares basadas en CdS / CdTe. Entonces, para el caso de incidencia normal tenemos las siguientes expresiones [24]:

$$g_m = \frac{n_{m-1}^2 + k_{m-1}^2 - n_m^2 - k_m^2}{(n_{m-1} + n_m)^2 + (k_{m-1} + k_m)^2}, \quad (1.77)$$

$$h_m = \frac{2(n_{m-1}k_m - n_mk_{m-1})}{(n_{m-1} + n_m)^2 + (k_{m-1} + k_m)^2}. \quad (1.78)$$

Si el espesor de la capa $(m - 1)^{\text{th}}$ es d_{m-1} , entonces el término de la fase $e^{i\delta_{m-1}}$ en la m -ésima matriz se define como:

$$e^{i\delta_{m-1}} = e^{\frac{iz\pi}{\lambda}(n_{m-1} - ik_{m-1})d_{m-1}} = e^{\alpha_{m-1}} e^{i\gamma_{m-1}}, \quad (1.79)$$

donde $\alpha_{m-1} = \frac{2\pi}{\lambda} k_{m-1} d_{m-1}$ y $\gamma_{m-1} = \frac{2\pi}{\lambda} n_{m-1} d_{m-1}$.

Una notación de doble sufijo denota los elementos del producto de matrices. Así los elementos del producto $(C_1) (C_2)$ se escriben como:

$$\begin{pmatrix} p_{12} + iq_{12} & r_{12} + is_{12} \\ t_{12} + iu_{12} & v_{12} + i\omega_{12} \end{pmatrix}$$

Por la multiplicación de matrices, es necesario aplicar relaciones de recurrencia para poder obtener los elementos de $(C_1) (C_2) \dots (C_{n-1})$, estas relaciones tienen la forma:

$$\left. \begin{aligned} p_{1,n+1} &= p_{1n}p_{n+1} - q_{1n}q_{n+1} + r_{1n}t_{n+1} - s_{1n}u_{n+1} \\ q_{1,n+1} &= q_{1n}p_{n+1} + p_{1n}q_{n+1} + s_{1n}t_{n+1} + r_{1n}u_{n+1} \\ r_{1,n+1} &= p_{1n}r_{n+1} - q_{1n}s_{n+1} + r_{1n}v_{n+1} - s_{1n}\omega_{n+1} \\ s_{1,n+1} &= q_{1n}r_{n+1} + p_{1n}s_{n+1} + s_{1n}v_{n+1} + r_{1n}\omega_{n+1} \\ t_{1,n+1} &= t_{1n}p_{n+1} - u_{1n}q_{n+1} + v_{1n}t_{n+1} - \omega_{1n}u_{n+1} \\ u_{1,n+1} &= u_{1n}p_{n+1} + t_{1n}q_{n+1} + \omega_{1n}t_{n+1} + v_{1n}u_{n+1} \\ v_{1,n+1} &= t_{1n}r_{n+1} - u_{1n}s_{n+1} + v_{1n}v_{n+1} - \omega_{1n}\omega_{n+1} \\ \omega_{1,n+1} &= u_{1n}r_{n+1} + t_{1n}s_{n+1} + \omega_{1n}v_{n+1} + v_{1n}\omega_{n+1} \end{aligned} \right\} \quad (1.80)$$

La m -ésima matriz se expresa de la siguiente manera:

$$C_m = \begin{pmatrix} e^{id_{m-1}} & r_m e^{id_{m-1}} \\ r_m e^{-id_{m-1}} & e^{-id_{m-1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_m + iq_m & r_m + is_m \\ t_m + iu_m & v_m + i\omega_m \end{pmatrix}, \quad (1.81)$$

$$\begin{aligned} p_m &= e^{\alpha_{m-1}} \cos \gamma_{m-1} \\ q_m &= e^{\alpha_{m-1}} \sin \gamma_{m-1} \\ r_m &= e^{\alpha_{m-1}} (g_m \cos \gamma_{m-1} - h_m \sin \gamma_{m-1}) \\ s_m &= e^{\alpha_{m-1}} (h_m \cos \gamma_{m-1} + g_m \sin \gamma_{m-1}) \\ t_m &= e^{\alpha_{m-1}} (g_m \cos \gamma_{m-1} + h_m \sin \gamma_{m-1}) \\ u_m &= e^{\alpha_{m-1}} (h_m \cos \gamma_{m-1} - g_m \sin \gamma_{m-1}) \\ v_m &= e^{-\alpha_{m-1}} \cos \gamma_{m-1} \\ \omega_m &= -e^{-\alpha_{m-1}} \sin \gamma_{m-1} \end{aligned}$$

Finalmente, Heavens [24] nos dice que la expresión para obtener la reflectancia de un sistema de varias capas es:

$$R = \frac{t_m^2 + u_m^2}{p_m^2 + q_m^2}. \quad (1.82)$$

1.7 Aproximación de homogeneización no local para el cálculo de parámetros efectivos

Si propiedades como la permitividad (ϵ) se repiten en sistemas periódicos como el caso de los metamateriales, por ejemplo, metamateriales hiperbólicos basados en estructuras multicapas con componentes metal-dieléctrico (ver Figura 3), se vuelve muy relevante e interesante poder realizar aproximaciones tratando este tipo de estructuras como un medio homogéneo. Debido a esto, pueden ser descritas de forma simplificada por parámetros efectivos como el tensor de permitividad efectivo.

Para el caso de estructuras multicapas, una de las formas más comunes de calcular las componentes de la permitividad efectiva es aplicando la aproximación del medio efectivo (EMA, por sus siglas en inglés) [25]. Considerando un arreglo compuesto de materiales locales e isotrópicos, a partir de EMA podemos obtener las componentes del tensor de permitividad efectiva, el cual resulta diagonal y sus valores principales se definen por las siguientes expresiones [25]:

$$\epsilon_x^{(EMA)} = \epsilon_y^{(EMA)} = \epsilon_1 f + \epsilon_2(1 - f), \quad \frac{1}{\epsilon_z^{(EMA)}} = \frac{(1 - f)}{\epsilon_2} + \frac{f}{\epsilon_1}. \quad (1.83)$$

Para el caso ya mencionado con componentes metal-dieléctrico, ϵ_1 es la permitividad del medio metálico y ϵ_2 la permitividad del medio dieléctrico, f es la fracción de llenado del metal.

Una de las suposiciones más importantes para aplicar las expresiones 1.83 es que el campo electromagnético varía ligeramente dentro del sistema multicapas, es decir, que el tamaño de una celda unitaria (a) es mucho más pequeño comparado con la longitud de onda de la luz incidente. Particularmente, para estructuras periódicas multicapa que presentan componentes metálicos, la aplicación de EMA falla debido al efecto de profundidad de piel en los metales, este efecto implica una variación drástica del campo electromagnético dentro del medio metálico [26]. Por lo tanto, en los últimos años se han desarrollado teorías de homogeneización, las cuales describen el sistema como un medio homogéneo anisotrópico no local y presenta expresiones explícitas para calcular las componentes del tensor de permitividad efectiva.

En este trabajo se aplicará la aproximación de homogeneización no local (NHA, por sus siglas en inglés) desarrollada en [23], esta aproximación nos permite describir la estructura de banda fotónica completa a cualquier frecuencia y valor arbitrario del número de onda de Bloch y es válida también para longitudes de onda arbitrarias.

Para el desarrollo de NHA es importante de nueva cuenta considerar dos tipos de polarización S y P, los cuales también se refieren a los modos transversales eléctrico (TE) y magnético (TM), respectivamente, para el modo TE no hay campo eléctrico en la dirección de propagación y para el modo TM no hay campo magnético en la dirección de propagación. También, se retoman las relaciones constitutivas, en este caso para medios no magnéticos $\vec{D} = \varepsilon(z)\vec{E}$ y $\vec{B} = \vec{H}$, donde la permitividad $\varepsilon(z)$ es una función periódica que depende de las coordenadas a lo largo de la dirección de crecimiento del sistema periódico.

Comenzando con la polarización TE, la forma de los campos eléctrico y magnético se pueden expresar de la siguiente manera:

$$\vec{E} = E_y e^{ik_x x - i\omega t} \hat{y}, \quad \vec{H} = (H_x(z)\hat{x} + H_z(z)\hat{z}) e^{ik_x x - i\omega t}, \quad (1.84)$$

donde la componente conservada del vector de onda (k_x) ha sido orientada de forma paralela al eje x . Por lo tanto, podemos escribir las ecuaciones de Maxwell en la forma:

$$-\frac{\partial E_y(z)}{\partial z} = i\frac{\omega}{c} B_x(z), \quad k_x E_y(z) = \frac{\omega}{c} B_z(z), \quad (1.85)$$

$$-ik_x H_z(z) + \frac{\partial H_x(z)}{\partial z} = -i\frac{\omega}{c} D_y(z). \quad (1.86)$$

Entonces, la solución de las ecuaciones 1.85 y 1.86 utilizando las relaciones constitutivas mencionadas, presentan la forma de ondas de Bloch:

$$\begin{aligned} E_y(z) &= E_{y,p}(z) \exp(ik_z z), \\ D_y(z) &= D_{y,p}(z) \exp(ik_z z), \\ H_j(z) &= H_{j,p}(z) \exp(ik_z z), \end{aligned} \quad (1.87)$$

aquí $j = x, z$, el subíndice p indica que la función es periódica, la cual presenta el mismo periodo que $\varepsilon(z)$ y k_z es el número de onda de Bloch. Sustituyendo las ecuaciones 1.87 en 1.85 y 1.86 y además promediar espacialmente las ecuaciones resultantes en una celda unitaria, podemos obtener:

$$-k_z \langle E_{y,p} \rangle = \frac{\omega}{c} \langle H_{x,p} \rangle, \quad k_x \langle E_{y,p} \rangle = \frac{\omega}{c} \langle H_{z,p} \rangle, \quad (1.88)$$

$$-k_x \langle H_{z,p} \rangle + k_z \langle H_{x,p} \rangle = -\frac{\omega}{c} \frac{\langle D_{y,p} \rangle}{\langle E_{y,p} \rangle} \langle E_{y,p} \rangle, \quad (1.89)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ simboliza el promedio espacial en la celda unitaria. Cabe resaltar que las derivadas respecto a z promediadas en z de los diferentes campos (E y H) se establecen como cero debido a que estas funciones son periódicas. Además, comparando las ecuaciones anteriores con las amplitudes de los campos electromagnéticos TE en un medio homogéneo no magnético, se puede definir la componente y del tensor de permitividad efectiva como:

$$\varepsilon_{eff,y}(\omega, \vec{k}) = \frac{\langle D_{y,p} \rangle}{\langle E_{y,p} \rangle}, \quad (1.90)$$

donde $\vec{k} = (k_x, 0, k_z)$. Este parámetro efectivo se obtiene para valores arbitrarios del número de onda de Bloch (k_z). Por otra parte, la relación de dispersión fotónica para los modos electromagnéticos TE se puede escribir de la misma forma que para un medio dieléctrico homogéneo no local:

$$k_z^2 + k_x^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{eff,y}(\omega, \vec{k}), \quad (1.91)$$

esta relación de dispersión nos permite describir la estructura de banda fotónica completa para los modos TE.

Analizando ahora el caso de la polarización TM, podemos expresar a los campos eléctrico y magnético como:

$$\vec{H} = H_y e^{ik_x x - i\omega t} \hat{y}, \quad \vec{E} = (E_x(z)\hat{x} + E_z(z)\hat{z}) e^{ik_x x - i\omega t}. \quad (1.92)$$

De forma análoga al procedimiento para los modos TE, en este caso podemos definir las componentes x y z del tensor de permitividad efectiva como:

$$\varepsilon_{eff,x}(\omega, \vec{k}) = \frac{\langle D_{x,p} \rangle}{\langle E_{x,p} \rangle}, \quad \varepsilon_{eff,z}(\omega, \vec{k}) = \frac{\langle D_{z,p} \rangle}{\langle E_{z,p} \rangle}, \quad (1.93)$$

Así mismo, de manera similar al caso anterior, la relación de dispersión fotónica para los modos electromagnéticos TM tiene la siguiente forma:

$$\frac{k_z^2}{\varepsilon_{eff,x}(\omega, \vec{k})} + \frac{k_x^2}{\varepsilon_{eff,z}(\omega, \vec{k})} = \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (1.94)$$

esta relación de dispersión nos permite describir la estructura de banda fotónica completa para los modos TM.

Para el análisis del sistema presentado en la Figura 3, es importante conocer la permitividad periódica $\varepsilon(z)$, la cual caracteriza al sistema y dentro de la capa metálica esta descrita por una permitividad que depende de la frecuencia dentro del modelo local de Drude:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\nu_1\omega}, \quad (1.95)$$

donde ω_p es la frecuencia de plasma metálica y ν_1 es el parámetro de amortiguamiento. En el caso de las capas dieléctricas, $\varepsilon(z)$ es igual a una permitividad constante ε_2 .

Un modo de derivar de forma analítica las relaciones de dispersión para los modos electromagnéticos TE y TM es resolviendo las ecuaciones de Maxwell en cada capa del arreglo multicapa, aplicando la condición de continuidad de las componentes tangenciales de los campos

eléctricos y magnéticos en las interfaces metal-dieléctrico junto con el teorema de Bloch [16]. Para el caso de polarización TE se obtiene la siguiente relación de dispersión:

$$\begin{aligned} \cos(k_z a) = & \cos(k_{z1} d) \cos(k_{z2} (a - d)) \\ & - \frac{1}{2} \left(\frac{k_{z1}}{k_{z2}} + \frac{k_{z2}}{k_{z1}} \right) \text{sen}(k_{z1} d) \text{sen}(k_{z2} (a - d)), \end{aligned} \quad (1.96)$$

y para la polarización TM, la relación presenta la forma:

$$\begin{aligned} \cos(k_z a) = & \cos(k_{z1} d) \cos(k_{z2} (a - d)) \\ & - \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_2 k_{z1}}{\varepsilon_1 k_{z2}} + \frac{\varepsilon_1 k_{z2}}{\varepsilon_2 k_{z1}} \right) \text{sen}(k_{z1} d) \text{sen}(k_{z2} (a - d)), \end{aligned} \quad (1.97)$$

donde $k_{z1} = \sqrt{\varepsilon_1 \omega^2 / c^2 - k_x^2}$ y $k_{z2} = \sqrt{\varepsilon_2 \omega^2 / c^2 - k_x^2}$ son los componentes z de los vectores de onda de las ondas planas electromagnéticas en las capas de metal y dieléctrico, respectivamente. Finalmente, sabemos que k_z es el número de onda de Bloch y del esquema de la Figura 4 sabemos que el espesor de la capa metálica es $d_1 \equiv d$ y de la capa dieléctrica es $d_2 \equiv a - d$, donde a es el espesor de la celda unitaria del sistema.

1.8 Determinación teórica de la eficiencia de conversión de una celda solar

Una parte de gran importancia para este trabajo es lograr llevar a cabo la evaluación del desempeño de la capa antirreflejante (basada en metamateriales laminados) en dispositivos fotovoltaicos, con este fin, se analizará como influye considerar la CAR al momento de obtener la eficiencia de conversión de forma teórica de una celda solar basada en CdS/CdTe. Para lograr esto, se empleará el desarrollo descrito por S. Sze [27], el cual permite determinar la fotocorriente y la respuesta espectral (SR, por sus siglas en inglés). Mediante la obtención de estos parámetros podemos establecer la eficiencia del proceso para convertir fotones a cargas, particularmente, la SR nos indica el número de portadores recolectados por fotón incidente a cada longitud de onda.

El desarrollo en [27], comienza estableciendo una expresión para el porcentaje de generación de pares electrón-hueco a una distancia x de la superficie del semiconductor y tiene la siguiente forma:

$$G(\lambda, x) = \alpha(\lambda) F(\lambda) [1 - R(\lambda)] \exp[-\alpha(\lambda)x], \quad (1.98)$$

donde $\alpha(\lambda)$ es el coeficiente de absorción, $F(\lambda)$ es el número de fotones/cm²/s por unidad de ancho de banda y $R(\lambda)$ es la fracción de esos fotones reflejados de toda la estructura de la celda solar. Cabe mencionar que dentro de este parámetro de $R(\lambda)$ se puede observar el efecto de implementar la incorporación de la capa antirreflejante al dispositivo fotovoltaico. Debido a esto, se utilizará el método de Heavens [24] descrito en la sección 1.6, para complementar este análisis, sabemos que

este método nos permite calcular R para un sistema de muchas capas y además considera las últimas dos capas como medios absorbentes.

Considerando condiciones de baja inyección, las ecuaciones de continuidad unidimensionales en estado estacionario para electrones en el semiconductor tipo p y para huecos en el semiconductor tipo n, se pueden expresar como:

$$G_n - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} + \frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} = 0, \quad G_p - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} - \frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} = 0. \quad (1.99)$$

donde n_p es la densidad de electrones libres, p_n es la densidad de huecos libres, el subíndice cero indica un valor inicial, q es la carga del electrón y τ_n y τ_p son los tiempos de vida del hueco y del electrón, respectivamente. Además, las ecuaciones para densidad de corriente son:

$$J_n = q\mu_n n_p \vec{E} + qD_n \frac{dn_p}{dx}, \quad J_p = q\mu_p p_n \vec{E} + qD_p \frac{dp_n}{dx}. \quad (1.100)$$

Aquí, μ_n es la movilidad del hueco y μ_p la movilidad del electrón, D_n y D_p son los coeficientes de difusión del hueco y del electrón, respectivamente. En el caso de celdas solares que presentan una unión tipo n sobre p, como en la Figura 5, donde la parte superior es el semiconductor tipo n y la base uno tipo p, pueden emplearse las ecuaciones 1.98, 1.99 para huecos (caso p) y 1.100 también para huecos, para obtener una expresión para la parte superior de la unión:

$$D_p \frac{d^2 p_n}{dx^2} + \alpha F(1 - R) \exp(-\alpha x) - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} = 0, \quad (1.101)$$

cuya solución general es de la forma:

$$p_n - p_{n0} = A \cosh(x/L_p) + B \sinh(x/L_p) - \frac{\alpha F(1 - R)\tau_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1} \exp(-\alpha x), \quad (1.102)$$

donde $L_p = (D_p \tau_p)^{1/2}$ es la longitud de difusión. Para continuar se establecen dos condiciones de frontera, la primera es en $x = 0$, donde se presenta una superficie de recombinación con una velocidad de recombinación S_p que se expresa como:

$$D_p \frac{d(p_n - p_{n0})}{dx} = S_p(p_n - p_{n0}) \quad a \quad x = 0$$

Por otra parte, la segunda condición es en el borde de agotamiento, donde el exceso de densidad de portadores es pequeño debido al campo eléctrico en la región de agotamiento:

$$p_n - p_{n0} = 0 \quad a \quad x = x_j$$

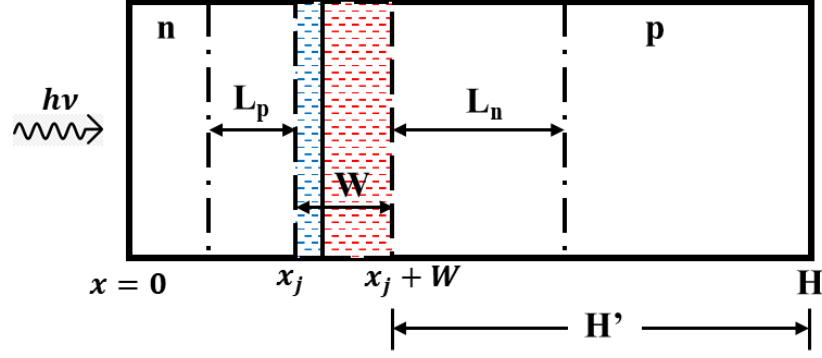


Figura 5. Esquema de una celda solar representando la capa CdS (tipo n) y la capa CdS (tipo p). El número de portadores colectados se obtiene en la parte superior ($x = x_j$), en la base ($x = x_j + W$) y dentro de la región de agotamiento ($x_j < x < x_j + W$). W es el ancho de la región de agotamiento. L_n y L_p son las longitudes de difusión de los portadores tipo n y p, respectivamente. H es el espesor de la celda entera y H' es la región neutral en la base de la capa tipo p.

Por lo tanto, mediante estas condiciones de frontera podemos obtener una expresión para la densidad de fotocorriente resultante de los huecos en el borde de agotamiento:

$$J_p = [qF(1 - R)\alpha L_p / \alpha^2 L_p^2 - 1] \times \left[\frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p} + \alpha L_p \right) - e^{-\alpha x} \left(\frac{S_p L_p}{D_p} \cosh \frac{x_j}{L_p} + \sinh \frac{x_j}{L_p} \right)}{\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh \frac{x_j}{L_p} + \cosh \frac{x_j}{L_p}} - \alpha L_p e^{-\alpha x} \right] \quad (1.103)$$

Esta fotocorriente se recolectaría de la parte superior de la unión tipo n-p a una longitud de onda dada, esto considerando que la región es uniforme en tiempo de vida, movilidad y nivel de dopaje.

De manera análoga, para obtener la fotocorriente generada debido a los electrones recolectados en el borde de agotamiento ($x = x_j + W$), se pueden emplear las ecuaciones 1.98, 1.99 y 1.100 para el caso de electrones (caso n), además de las condiciones de frontera. La primera condición establece que el exceso de densidad de portadores es casi cero en el borde de la región de agotamiento, es decir:

$$n_p - n_{p0} \cong 0 \quad a \quad x = x_j + W$$

donde W es el ancho de agotamiento (ver Figura 5).

La segunda condición establece que la superficie de recombinación trasera toma lugar en el contacto óhmico, o de otra forma:

$$S_n(n_p - n_{p0}) = -D_p dn_p / dx \quad a \quad x = H$$

aquí, H es el ancho de la celda entera. Por lo tanto:

$$J_n = \frac{qF(1-R)\alpha L_n}{\alpha^2 L_n^2 - 1} e^{-\alpha(x_j+W)} \times \left\{ \alpha L_n - \frac{\left(\frac{S_n L_n}{D_n}\right) \left[\cosh\left(\frac{H'}{L_n}\right) - e^{-\alpha H'} \right] + \sinh\left(\frac{H'}{L_n}\right) + \alpha L_n e^{-\alpha H'}}{\frac{S_n L_n}{D_n} \sinh\frac{H'}{L_n} + \cosh\frac{H'}{L_n}} \right\}, \quad (1.104)$$

donde H' es la región neutra de la base p como se observa en la Figura 5. En este caso también se asume que la región analizada es uniforme en tiempo de vida, movilidad y nivel de dopaje.

Otro caso por analizar es la región de agotamiento, en la cual también se presenta la generación de algo de fotocorriente. En esta región el campo eléctrico es generalmente alto, debido a esto los portadores fotogenerados son acelerados fuera de la región de agotamiento antes de que el proceso de recombinación pueda ocurrir. Por lo tanto, la fotocorriente por unidad de ancho de banda es igual al número de fotones absorbidos:

$$J_{dr} = qF(1-R)e^{(-\alpha x)} [1 - e^{(-\alpha W)}]. \quad (1.105)$$

Finalmente, la fotocorriente total a una longitud de onda dada se puede obtener mediante:

$$J(\lambda) = J_p(\lambda) + J_n(\lambda) + J_{dr}(\lambda). \quad (1.106)$$

La respuesta espectral es la suma de la ecuación anterior dividida por $qF(1-R)$ para el caso de la respuesta espectral interna:

$$SR = \frac{1}{qF(1-R)} [J_p(\lambda) + J_n(\lambda) + J_{dr}(\lambda)]. \quad (1.107)$$

La respuesta espectral interna ideal para un semiconductor con cierta energía de banda prohibida E_g es una función de paso, la cual es igual a cero cuando $h\nu < E_g$ e igual a la unidad cuando $h\nu \geq E_g$.

Otro parámetro importante para poder analizar una celda solar y obtener la eficiencia deseada es la curva I-V característica, la cual se presenta en la Figura 6 junto con los circuitos equivalentes idealizados de una celda solar tipo n-p.

Mediante el circuito b de la Figura 6, el cual considera la resistencia en serie (R_s), generada por los contactos metálicos, y la resistencia shunt (R_{sh}), generada por las pérdidas en el material semiconductor, podemos obtener una expresión para calcular la corriente (I) y poder generar la curva I-V característica:

$$I = I_0 \exp \left[\frac{q(V - IR_s)}{n \cdot kT} \right] + \frac{(V - IR_s)}{R_p} - I_{sc}, \quad (1.108)$$

donde I_0 es la corriente de saturación del diodo, I_{sc} es la fotocorriente con pérdida óptica multiplicada por el área de los contactos y n es un factor de idealidad del diodo.

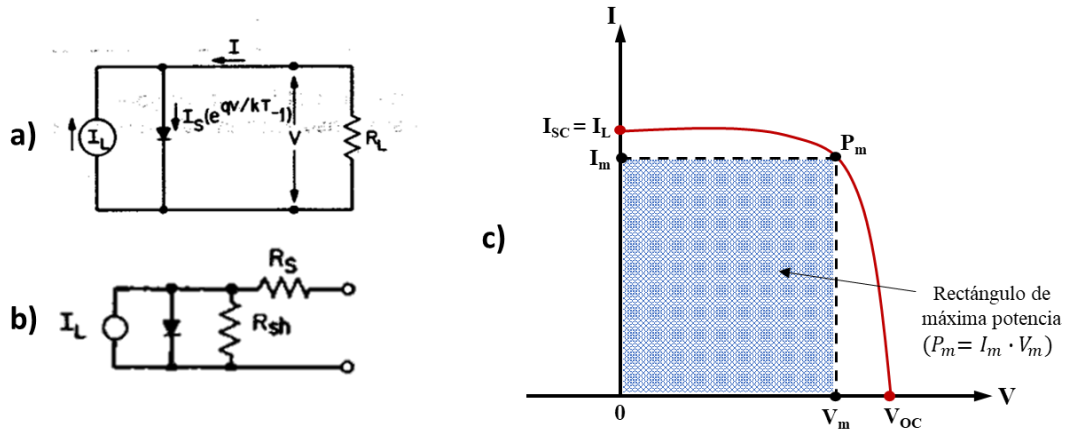


Figura 6. a) circuito equivalente idealizado para una celda solar tipo n-p [27], b) modificación del circuito para incluir la resistencia en serie de la pérdida óhmica en la superficie frontal y la resistencia shunt de las corrientes de fuga [27] y c) curva I-V característica de una celda solar bajo iluminación, en este grafico podemos observar los puntos donde se obtienen los valores de: corriente de corto circuito (I_{sc}), voltaje de circuito abierto (V_{oc}), potencia máxima (P_m) y el voltaje (V_m) y corriente (I_m) máximos.

De una curva I-V característica, como la de la Figura 6 (c), se puede definir el factor de llenado, el cual es una relación entre la potencia máxima (P_m) y el producto del voltaje de circuito abierto (V_{oc}) y la corriente en corto circuito (I_{sc}), es decir:

$$FF = \frac{P_m}{V_{oc}I_{sc}} = \frac{I_m V_m}{V_{oc}I_{sc}} \quad (1.109)$$

De forma gráfica, este parámetro es una medida de la calidad de la forma de la curva y es importante para analizar el rendimiento de la celda.

Finalmente, la eficiencia de conversión (η) de una celda solar se puede calcular relacionando la potencia máxima (P_m) que se puede obtener de la celda con la potencia total que incide sobre la celda (P_{in}), esta relación tiene la forma:

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{I_m V_m}{P_{in}} = \frac{FF \cdot V_{oc} I_{sc}}{P_{in}} \quad (1.110)$$

Capítulo 2

Metodología

2.1 Obtención de parámetros efectivos y espectros ópticos (R y T) de metamateriales laminados

Para lograr el primer objetivo particular planteado, se llevó a cabo el desarrollo de diferentes programas de cómputo en Fortran basados en los formalismos teóricos tanto del método de matriz de transferencia (MMT) como con del método de expansión en modos de bulto (MEMB) [23]. Para complementar la información obtenida y tener una mejor descripción de los sistemas analizados, también se implementó la forma de obtener los componentes del tensor de permitividad efectiva mediante el uso de la aproximación del medio efectivo (EMA) [25] y la aproximación de homogeneización no local (NHA) [23]. Por lo tanto, uno de los programas desarrollados nos permitió calcular los espectros ópticos de reflectancia (R) y transmitancia (T) a partir de MMT y también los parámetros efectivos mediante EMA, de forma análoga con un segundo programa se obtuvo la misma información, pero aplicando MEMB y NHA.

El proceso para utilizar los diferentes programas de cómputo es el mismo y consta de los siguientes pasos:

1. Determinación del componente metálico y dieléctrico del metamaterial.
2. Una vez definidos los componentes es necesario contar con una base de datos del índice de refracción (n) y del coeficiente de extinción (k) de cada material. Para el presente estudio, los sitios [28] y [29] han sido de gran relevancia para la obtención de datos.
3. Con n y k se pueden emplear las ecuaciones 1.23 y 1.24 para obtener los valores de la parte real (ϵ') e imaginaria (ϵ'') de la permitividad a diferentes longitudes de onda.
4. Si ambos componentes del sistema presentan diferentes rangos de longitudes de onda en su base de datos, es necesario realizar una interpolación y ajustar el rango respecto al material que presenta un rango más corto. Para este punto y el anterior fue importante el uso del software de análisis de datos *Origin* desarrollado por la corporación *OriginLab*.
5. Con los datos correctos de ϵ' y ϵ'' ya se pueden generar archivos con terminación *.dat* para correr adecuadamente el programa.

6. Determinación de parámetros importantes, los cuales son: espesor de la capa metálica y dieléctrica, número de bicapas o celdas unitarias y ángulo de incidencia. Cabe mencionar que para este estudio los análisis se llevaron a cabo bajo incidencia normal, esto debido a que la mayoría de los estudios de dispositivos fotovoltaicos que se reportan es a este ángulo.
7. Finalmente, con los pasos anteriores es posible correr los diferentes programas y obtener archivos de salida con los datos de R , T y ϵ_{eff} para su respectiva manipulación y análisis.

Partiendo del proceso establecido se pudieron obtener y analizar espectros de diferentes sistemas variando todos los parámetros posibles, lo cual nos permitió analizar cómo influyen estos parámetros en el diseño del metamaterial que se pretende usar como CAR. Aunado a esto, se lograron obtener sistemas con las configuraciones más eficientes de acuerdo con los espectros de R y T , los cuales se pueden considerar aptos para funcionar como CAR.

Dentro de los componentes metálicos más relevantes estudiados se encuentran: Au, Ag, Pt, Zn, Cu, Pd y Al. Por otro lado, los componentes dieléctricos fueron: Si, SiN, SiO₂, TiO₂, MgF₂, ZrO₂.

2.2 Incorporación de la CAR basada en HMMs laminados

Para llevar a cabo la evaluación del metamaterial propuesto como CAR, se desarrolló un programa de cómputo mediante el software matemático *MATLAB*, el programa se basa en el formalismo desarrollado por S. Sze [27]. En esta parte del estudio fue de gran importancia el apoyo y colaboración de la Dra. Carolina Janani Diliegros Godines, además de su experiencia en dispositivos fotovoltaicos fue de gran importancia su contribución con datos experimentales de celdas solares basadas en CdS/CdTe, tanto datos de ambos semiconductores como del óxido conductor transparente (TCO, por sus siglas en inglés).

Como se mencionó en el formalismo de la aproximación de S. Sze en el capítulo anterior, un parámetro importante para el desarrollo es el cálculo de la reflectancia de la celda solar mediante el método de Heavens [24]. Para este fin, también se elaboró un programa de cómputo en *MATLAB* basado en este formalismo.

Entonces, para obtener la R total de la celda, el programa requiere los datos de n y k , los cuales de forma similar a los programas de la sección anterior deben presentar el mismo rango de longitudes de onda, en este caso se deben acomodar los datos de cada capa que compone al dispositivo fotovoltaico, un esquema de este último se muestra en la Figura 7. Posteriormente se proponen los

espesores de cada capa del sistema y el programa estará listo para obtener la reflectancia de la celda solar, la cual ya puede emplearse en el formalismo de S. Sze.

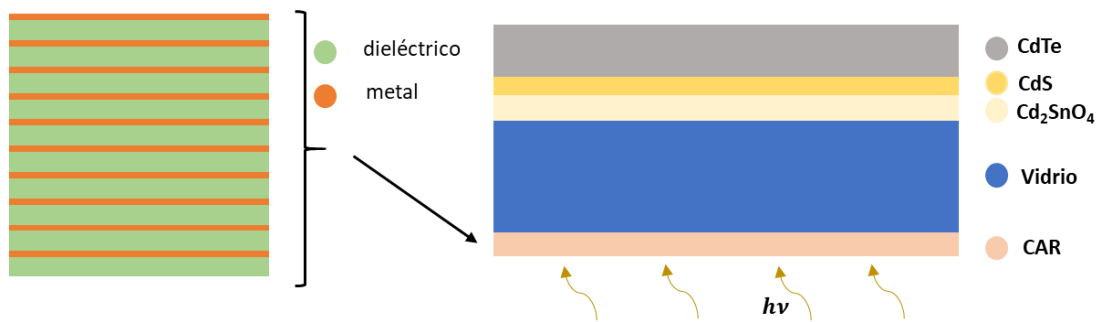


Figura 7. Estructura de una celda solar basada en CdS / CdTe. El esquema presenta una CAR basada en metamateriales laminares con componentes metal y dieléctrico.

En el caso del programa basado en el método de S. Sze, aparte del parámetro de la R del sistema y de n y k , también necesita datos de los coeficientes de absorción de los semiconductores, datos del espectro estándar de iluminación AM1.5, la transmitancia del TCO, espesores y otros parámetros más generales que aparecen en las ecuaciones del formalismo, como la temperatura y algunas constantes universales. Con estos parámetros determinados, se pueden calcular las diferentes densidades de corriente, la respuesta espectral y la curva I-V característica.

Mediante estos programas se logró simular el comportamiento de una celda solar basada en CdS/CdTe para poder comparar cómo se alteran los parámetros característicos de las celdas solares con y sin CAR. Estos parámetros característicos analizados fueron: voltaje a circuito abierto (V_{OC}), corriente en corto circuito (I_{SC}), potencia máxima (P_m), factor de llenado (FF) y eficiencia solar (η).

Capítulo 3

Transmitancia y reflectancia para sistemas metal – dieléctrico

3.1 Análisis y comparación de programas de cómputo empleados en la obtención de espectros ópticos de transmisión y reflexión

Para comenzar la sección de resultados, se llevó a cabo el análisis de los resultados obtenidos con los diferentes programas de cómputo desarrollados a partir de las teorías del método de matriz de transferencia y de expansión en modos de bulto mencionadas previamente. Además, se realizó también la comparación contra el software ya consolidado y de uso abierto de la compañía Filmetrics [29]. Para realizar este análisis se obtuvieron los espectros ópticos de reflectancia y transmitancia del primer sistema analizado (Si – Ag). En la Figura 8 se muestran espectros respectivos a las configuraciones de 15 bicapas con capas de Si de espesor de 24 nm y de Ag de 12 nm, y un sistema de 3 bicapas con capas de Si y Ag de espesores de 30 nm para cada capa.

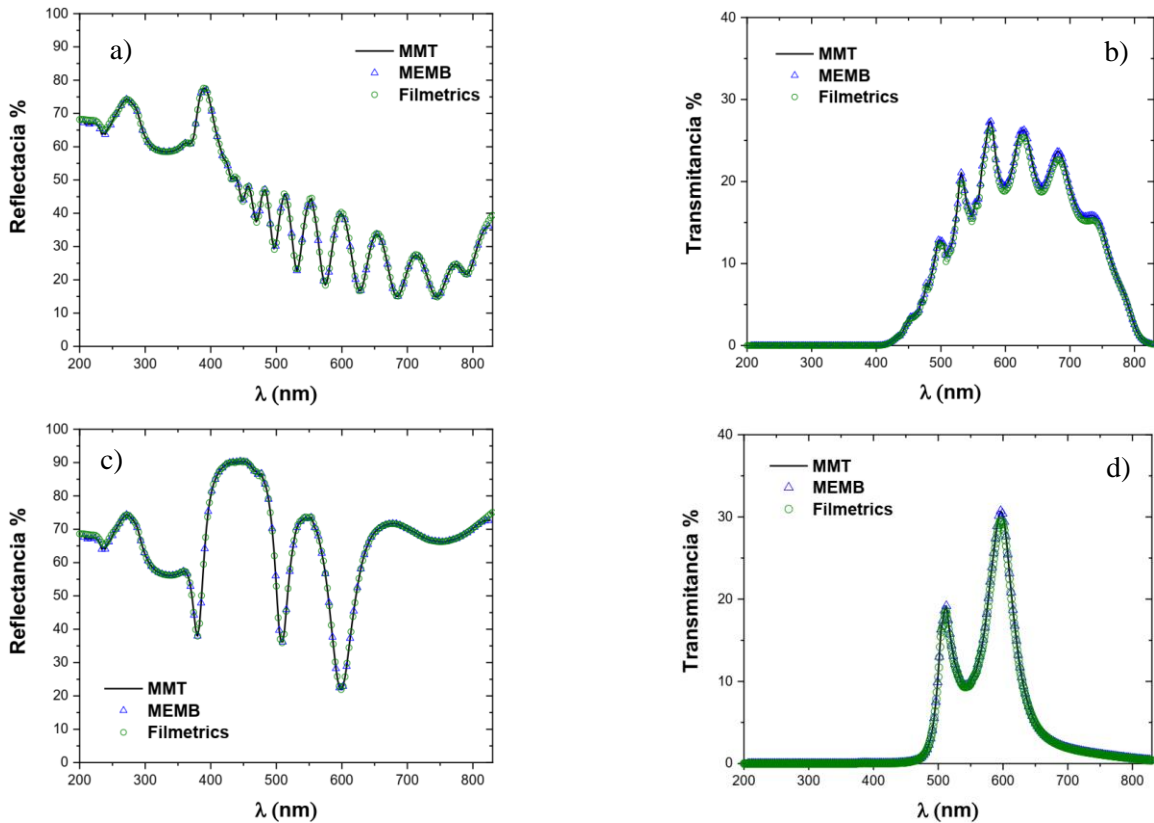


Figura 8. Comparación de espectros de reflectancia y transmitancia obtenidos a partir de programas basados en diferentes teorías (MMT y MEMB) y mediante el software de uso abierto de la compañía Filmetrics. Los espectros corresponden a: a)

y b) Sistema de 15 bicapas con componentes de Si (24 nm) y Ag (12 nm), c) y d) Sistema de 3 bicapas con componentes de Si (30 nm) y Ag (30 nm).

A partir de los espectros mostrados podemos observar que mediante los programas basados en las teorías de MMT y MEMB se obtuvieron prácticamente los mismos resultados tanto en reflectancia como en transmitancia de ambos sistemas analizados. Además, a partir de la comparación con Filmetrics, se logró la obtención de los mismos espectros en todos los casos validando así los programas desarrollados.

3.2 Estudio y análisis de los diferentes parámetros que influyen en el diseño de metamateriales laminares como CAR

3.2.1 Análisis de diferentes bases de datos para Ag

Una de las ventajas más relevantes de haber desarrollado programas de cómputo propios es la oportunidad de analizar y controlar la base de datos o valores de $n(\lambda)$ y $k(\lambda)$ de los materiales empleados para realizar los cálculos de los parámetros ópticos observables. Para analizar la importancia de este aspecto se llevó a cabo la obtención de los espectros ópticos de reflectancia y transmitancia de un sistema de 15 bicapas con capas de SiO₂ de 90 nm de espesor y de Ag de 8.1 nm de espesor. Los valores de n y k utilizados corresponden a Ag de distintos espesores: 20 nm [30], 8.1 nm [31] y películas gruesas [32] (ver Figura 9). Las películas gruesas tienen espectros de n y k parecidos a los reportados por Palik para plata en geometría de volumen. Los espectros de n y k de las películas de 20 nm tienen semejanza con aquellos reportados por Palik y varían ligeramente en magnitud. Los espectros n y k de las películas de 8.1 nm son distintos a los reportados por Palik. Esto se debe a que las películas de 8.1 están por debajo del umbral de percolación microestructural y, en consecuencia, su resistividad eléctrica ha incrementado ordenes de magnitud respecto al comportamiento metálico típico de la Ag. Los valores de n y k para el SiO₂ corresponden a películas delgadas reportadas por Rodríguez et al., [33]. Note que los espectros de reflectancia y transmitancia del sistema SiO₂/Ag se obtuvieron fijando el espesor de la plata en 8.1 nm, aunque los n y k provengan de películas gruesas. Esto se hizo deliberadamente para apreciar las distintas respuestas ópticas del apilamiento de bicapas de SiO₂/Ag. De esta manera, el único espectro para el cual la Ag tiene correspondencia con su espesor reportado es aquel que utiliza los n y k de la película de 8.1 nm.

La Figura 9 presenta los espectros de reflectancia y transmitancia para el sistema analizado. Con las bases de datos de diferente espesor a Ag-8.1nm se lograron obtener longitudes de ondas de paso dentro de la mayoría del espectro visible en ambos espectros e incluso con valores alrededor del 5 % de reflectancia. No obstante, estos resultados no son confiables ya que, como se mencionó

previamente, el único espectro para el cual la Ag tiene correspondencia con su espesor es la Ag-8.1 nm, de manera que es la más precisa por la configuración del sistema analizado.

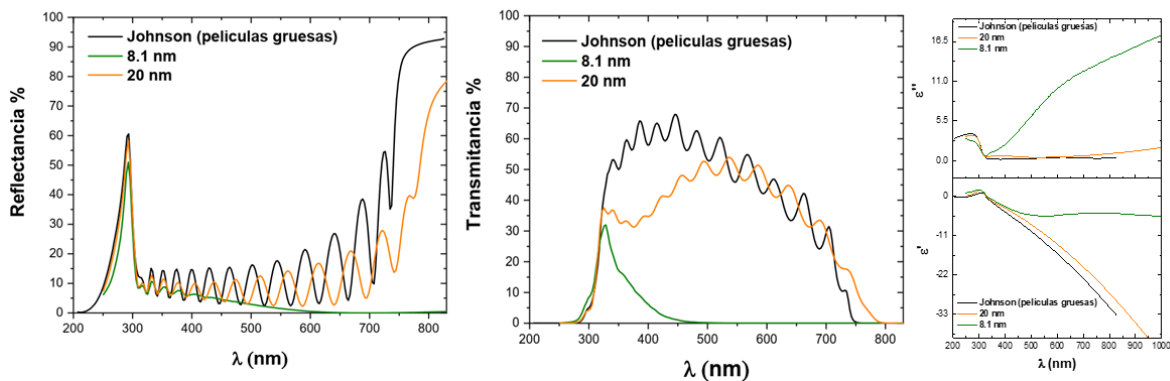


Figura 9. Comparación de espectros de reflectancia y transmitancia obtenidos a partir de diferentes bases de datos correspondientes a películas de Ag de diferentes espesores. Los espectros corresponden al sistema de 15 bicapas con componentes de SiO₂ (90 nm) y Ag (8.1 nm). Adicionalmente se muestra la parte real (ϵ') e imaginaria (ϵ'') de la permitividad correspondiente a cada base de datos.

Desde los espectros de reflectancia y transmitancia se observan resultados totalmente diferentes en función de los n y k de la plata utilizada. Para el caso del sistema que utiliza los n y k de la Ag-8.1 nm, sólo se aprecia una banda de paso de 300 nm a casi 500 nm donde la transmitancia apenas alcanza el 30 %. Además, a partir de 500 nm a mayores longitudes de onda se observan valores muy cercanos a 0 en ambos espectros. Este resultado indica una gran absorción en los apilamientos del sistema SiO₂/Ag, el cual probablemente es causado por el fenómeno de resonancia de plasmones de superficie y a la calidad de las películas, factores que son mucho más relevantes a estas dimensiones [34, 35].

Es por esto por lo que la base de datos debe ser lo más acorde posible respecto al sistema analizado y más en el caso del componente metálico, ya que es el que puede influir más en la absorción del sistema. Debido a que es complicado contar con una variedad de bases de datos experimentales de películas con diferentes espesores, en el presente estudio se realizaron aproximaciones con las bases de datos ya mencionadas.

3.2.2 Variación de número de bicapas

Aprovechando el sistema analizado previamente con capas compuestas de Si (24 nm) y Ag (12 nm), donde se utilizó la base de datos de películas gruesas de Ag [32], se analizó el efecto de modificar el parámetro de número de celdas unitarias o bicapas en el sistema. A continuación, se presentan los espectros de reflectancia y transmitancia correspondientes a sistemas con 3, 5, 10 y 15 bicapas.

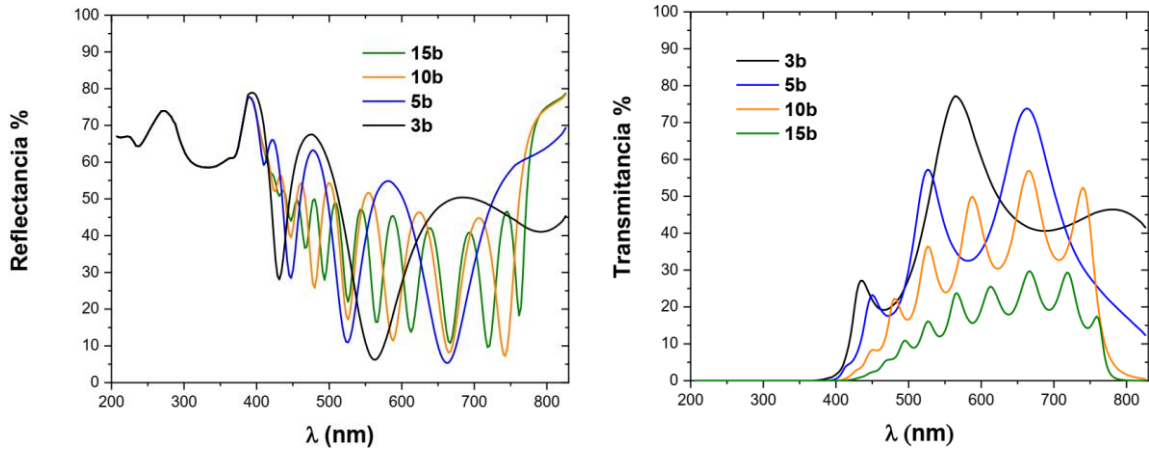


Figura 10. Comparación de espectros ópticos de reflectancia y transmitancia variando el número de bicapas. El sistema analizado está conformado de capas de Si con 24 nm de espesor y capas de Ag con 12 nm.

Observando los espectros de la Figura 10 podemos notar que en ambos casos se presentan oscilaciones debido a las interferencias en el sistema, las cuales son proporcionales al número de bicapas. En los sistemas con 3 y 5 bicapas se presentan N (bicapas) $- 1$ oscilaciones, las cuales se asocian a resonancias de Fabry-Perot que surgen debido a las múltiples ondas reflejadas en los límites de toda la estructura multicapa [18]. Conforme incrementa el número de bicapas se deja de cumplir la relación mencionada debido a que el sistema presenta pérdidas y dispersión por el componente metálico.

Debido a este incremento de oscilaciones en los espectros, también se logra obtener una reducción en el caso de la reflectancia en mayores rangos y a mayores longitudes de onda. En el caso de 15 bicapas, la última oscilación se presenta alrededor de 760 nm mientras que el sistema de 3 bicapas se presenta sobre los 560 nm.

A pesar del interesante resultado al disminuir la reflectancia mediante el incremento del número de bicapas, la reducción de la transmitancia resulta contraproducente para aplicaciones en celdas solares de película delgada ya que ahí se busca maximizar la transmitancia del CAR para que las capas de CdS y CdTe puedan colectar la luz visible y generar electricidad. La disminución de la reflectancia y transmitancia observada en los apilamientos de SiO_2/Ag se debe al incremento del compuesto metálico en el sistema, lo que se refleja en una mayor absorción. En los sistemas con pocas bicapas (3 y 5) se observaron valores máximos de transmitancia de alrededor de 75%, lo cual es aproximadamente 45 % más comparando con el sistema de 15 bicapas.

3.2.3 Variación del factor de llenado

3.2.3.1 Espesor de componente metálico

Otro parámetro delicado e importante en el diseño de un metamaterial basado en estructuras laminares es la manipulación de los espesores de las diferentes capas de la celda unitaria. En esta sección se analiza la variación del espesor de la capa metálica del sistema y cómo influye en los espectros ópticos de transmitancia y reflectancia. El sistema analizado está conformado por 10 bicapas y contiene TiO_2 [36] como componente dieléctrico y Ag como componente metálico con espesores de 10 y 20 nm, empleando la base de datos de películas de 20 nm de Ag.

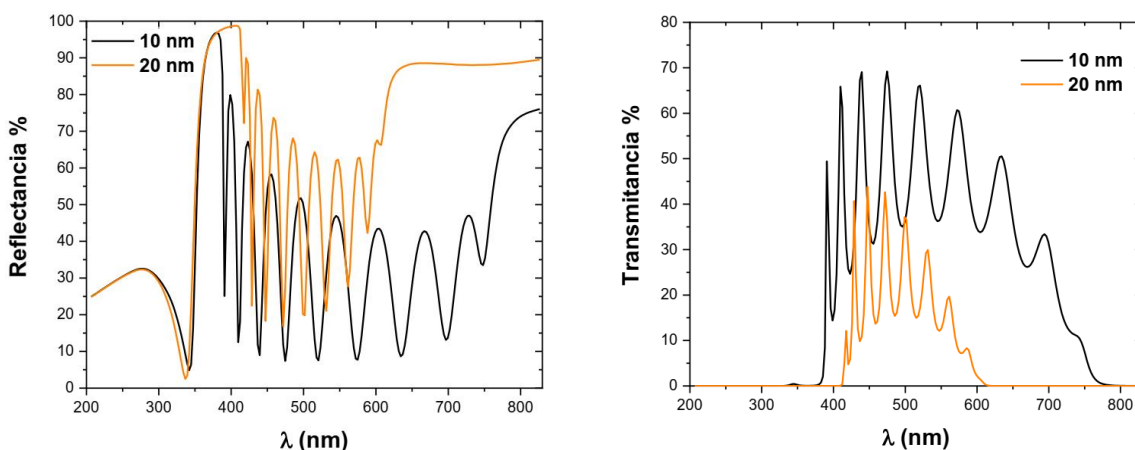


Figura 11. Comparación de espectros ópticos de transmitancia y reflectancia del sistema compuesto por 10 bicapas con TiO_2 (60 nm) y donde se varía el espesor de la capa de Ag con 10 y 20 nm.

En las secciones previamente analizadas ya se ha observado y discutido como influye de manera importante el componente metálico en las propiedades ópticas del sistema, en este caso, al analizar los espectros obtenidos variando los espesores de la Ag (ver Figura 11) podemos observar grandes diferencias en ambos casos. Al pasar de una plata de 10 nm a 20 nm de espesor en el sistema TiO_2/Ag , la reflectancia aumenta y la transmitancia disminuye. En ambos espectros podemos notar una banda de paso donde se presentan las oscilaciones. Esta banda de paso se presenta en un rango de 380 a 760 nm para el caso del sistema con Ag de 10 nm y se reduce a un rango de 410 a 610 nm para el sistema con Ag de 20 nm. Además, en estas bandas, los valores mínimos de reflectancia aumentan en un 10 % y los valores máximos de transmitancia disminuyen en un 30 % al pasar de una Ag de 10 nm a otra de 20 nm. En este caso también se confirma que debido al incremento del componente metálico hay más absorción en el sistema.

Es importante mencionar que los resultados obtenidos para el caso de 10 nm de espesor de películas de Ag es una aproximación utilizando la base de datos de películas de 20 nm de Ag, no se usó la base de Ag-8.1 nm por la mala calidad de la película reflejada en resultados previos. A esta escala ya podría ser relevante la calidad y uniformidad de las películas metálicas para limitar los efectos de absorción plasmónica.

3.2.3.2 Espesor de componente dieléctrico

De manera similar a la sección previa, también se llevó a cabo el análisis de la variación del espesor de la capa dieléctrica de la CAR para observar cómo influye en la obtención de los espectros ópticos de reflectancia y transmitancia. Para este fin se han estudiado dos sistemas, uno compuesto por 15 bicapas, con capas de Ag de 12 nm y con capas de TiO₂ como compuesto dieléctrico. Para este último se utilizaron espesores de 24, 50 y 70 nm. Por otro lado, también se estudió el sistema compuesto por 15 bicapas con el mismo espesor de 12 nm para las capas de Ag y como componente dieléctrico se implementaron capas de SiO₂ con espesores de 24, 90 y 100 nm.

A diferencia de lo observado en el caso donde la variación del factor de llenado es respecto a la capa metálica, en este caso, al incrementar el espesor de la capa dieléctrica es favorable tanto para la transmitancia como para la reflectancia, al menos en el caso de compuestos como TiO₂ y SiO₂ que son más transparentes que el silicio.

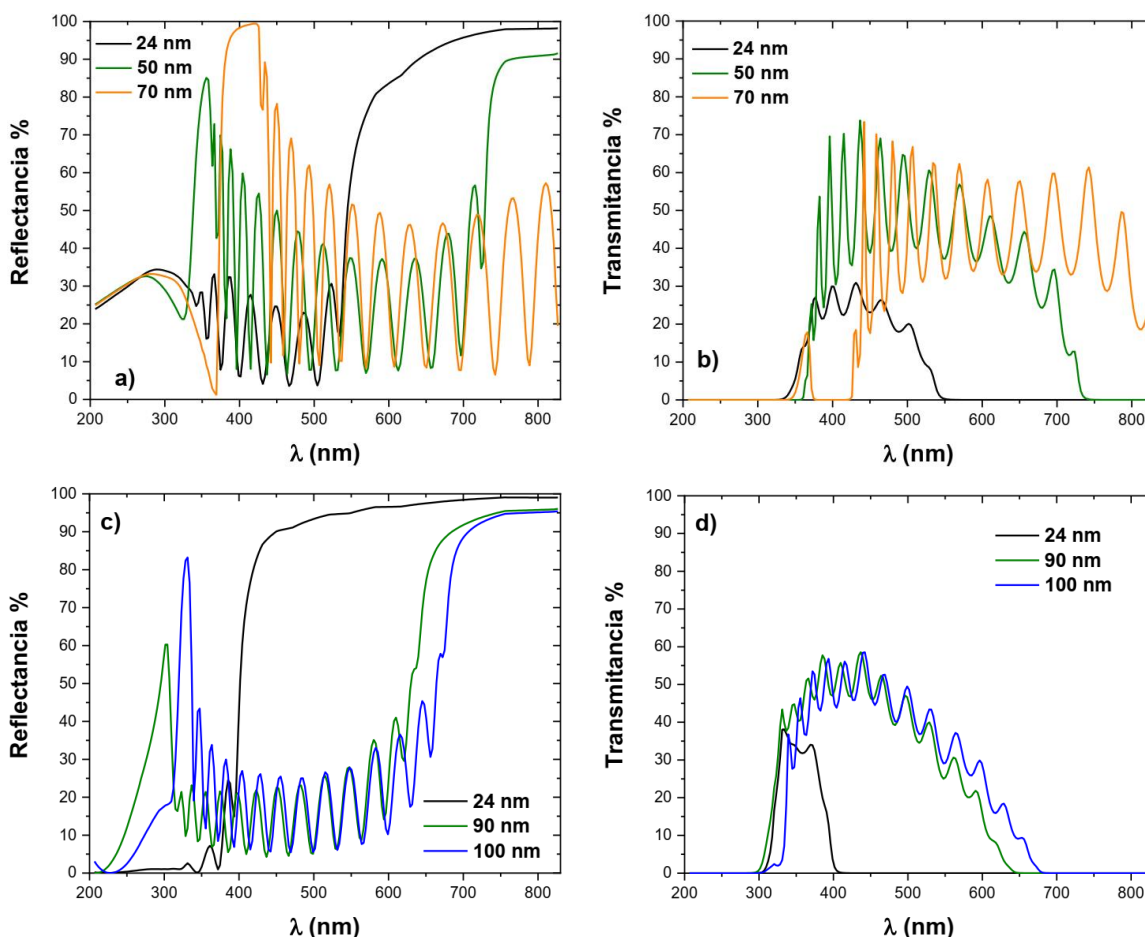


Figura 12. Comparación de espectros ópticos de transmitancia y reflectancia variando el espesor de la capa de componente dieléctrico de sistemas compuestos de 15 bicapas con capas de Ag como componente metálico con 12 nm de espesor y como componente dieléctrico en a) y b) se emplea TiO₂ con espesores de 24, 50 y 70 nm, en c) y d) se emplea SiO₂ con espesores de 24, 90 y 100 nm.

Se puede confirmar lo mencionado en el párrafo anterior analizando los diferentes espectros de la Figura 12, donde prácticamente en todos los espectros podemos observar un corrimiento y apertura de la banda de paso a mayores longitudes de onda e incluso en el caso de ambos sistemas analizados se observa un incremento en los porcentajes de transmitancia. El sistema con TiO_2 que presenta el menor espesor alcanza porcentajes alrededor del 30 % de transmitancia, los cuales se incrementan al aumentar el espesor de la capa dieléctrica, alcanzando valores máximos alrededor del 75 %. De igual manera para el sistema con SiO_2 , se puede observar un incremento desde valores máximos del 38 % hasta del 60 % aproximadamente al aumentar el espesor del componente dieléctrico.

En cuanto a los espectros de reflectancia, aparte del corrimiento y amplitud de la banda de paso, se puede notar que los porcentajes de reflectancia de los puntos mínimos en las oscilaciones aumentan ligeramente al incrementar el espesor. En ambos casos, al comparar el sistema de menor espesor respecto a los otros el incremento es alrededor de un 5 %. Otro aspecto interesante en los espectros correspondientes a los sistemas con TiO_2 es que las oscilaciones se hacen un poco más angostas y alcanzan mayores porcentajes en reflectancia y menores en transmitancia en ciertas longitudes de onda, en el caso de los sistemas con SiO_2 esto solo se puede observar a bajas longitudes de onda, aproximadamente de 300 nm a 450 nm.

Por todo esto, se destaca la importancia de la variación del espesor de la capa dieléctrica para manipular y diseñar una banda de paso eficiente para los fines del presente estudio, la cual consiste en abarcar la mayoría del espectro visible y poder proponer un metamaterial como CAR en dispositivos fotovoltaicos que absorben principalmente en ese rango de longitudes de onda.

3.2.4 Comparación con diferentes componentes dieléctricos

Como ya se mencionó previamente, el primer sistema analizado en este estudio estuvo conformado por Si y Ag debido al contraste dieléctrico que presentan estos materiales y aunque se obtuvo una banda de paso que abarca la mayoría del espectro visible, los porcentajes más bajos de reflectancia alcanzados fueron alrededor del 15 % y los más altos de transmitancia alrededor del 45 %, esto en oscilaciones que se encuentran entre 650 y 750 nm (ver Figura 13). Debido a esto, resultó de interés el estudio de sistemas con diferentes componentes dieléctricos, en esta sección se muestran espectros que se obtuvieron a partir de la configuración más relevante del sistema compuesto por Si y Ag, el cual consiste en 15 bicapas con 24 nm de espesor para el componente dieléctrico y de 12 nm para el metálico. Los componentes dieléctricos más relevantes fueron SiO_2 y TiO_2 , los cuales ya han sido propuestos en capas antirreflejantes [1–5].

En la Figura 13 se puede observar que los espectros ópticos obtenidos con diferentes componentes dieléctricos, pero con la misma configuración, varían mucho. El rango de la banda de paso, el número de oscilaciones y sus respectivos porcentajes de reflectancia y transmitancia son muy diferentes. La reducción en los porcentajes de reflectancia probablemente se debe a las propiedades ópticas del SiO₂ y TiO₂, ya que tienen menor índice de refracción que el Si y son más transparentes en el rango de frecuencias de la luz visible, como se observa en las permitividades graficadas en la siguiente figura.

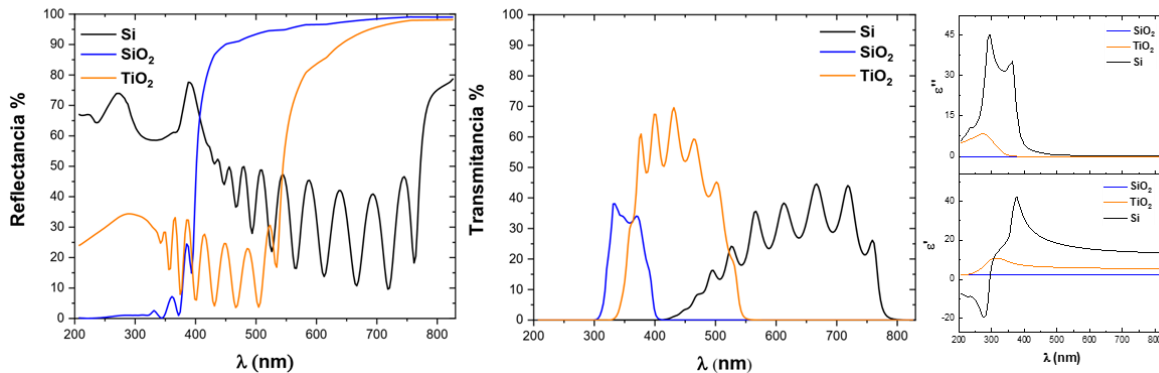


Figura 13. Comparación de espectros ópticos de reflectancia y transmitancia de sistemas con diferentes compuestos dieléctricos: Si, SiO₂ y TiO₂. Los sistemas se conforman por 15 bicapas con capas de Ag de 12 nm y las capas de los componentes dieléctricos con espesores de 24 nm. Adicionalmente se muestra la parte real (ϵ') e imaginaria (ϵ'') de la permitividad correspondiente a cada dieléctrico empleado.

Podemos notar que con SiO₂ se obtienen porcentajes de reflectancia cercanos a cero, sin embargo, es el sistema que presenta la banda de paso más corta de 300 nm a 400 nm y abarca muy poco del espectro visible. No obstante, sabemos que mediante los parámetros analizados en secciones previas podemos manipular esta banda de paso, por lo tanto, el SiO₂ y el TiO₂ son muy buenas opciones para proponer como compuesto dieléctrico trabajando con los parámetros ya mencionados.

3.2.5 Comparación con diferentes componentes metálicos

Para aplicaciones en el rango de la luz visible de metamateriales hiperbólicos basados en estructuras laminares, además de la Ag, el Au es la opción más ideal debido a las bajas pérdidas en este rango [13]. Por esta razón, también ha sido de interés el estudio y comparación con sistemas con Au como componente metálico y para esto se utilizó nuevamente la configuración de la sección anterior con sistemas de 15 bicapas con capas de Si como componente dieléctrico de 24 nm de espesor y capas de 12 nm de espesor para el componente metálico. Es importante señalar que para las aproximaciones en este análisis se utilizó la base de datos de películas de 20 nm de Ag ya mencionada y para el Au se utilizó una base de datos de los mismos autores [30] pero en este caso es para películas delgadas de 35 nm de Au [37].

Como se puede apreciar en los espectros ópticos de reflectancia y transmitancia en la Figura 14, el uso de películas de oro mejora los resultados en ambos casos, se logra obtener una banda de paso aproximadamente 100 nm más amplia. Además, a partir de 500 nm en adelante los porcentajes de reflectancia en los puntos mínimos de las oscilaciones son más bajos, los valores más bajos del sistema con Au rondan el 10 % a diferencia de los del sistema con Ag que rondan el 20 %. También, en el espectro de transmitancia se observan diferencias significativas de 500 nm en adelante, en este caso los valores máximos alcanzados mediante el sistema con Au son del 40 % aproximadamente, casi el doble comparando con el sistema con Ag.

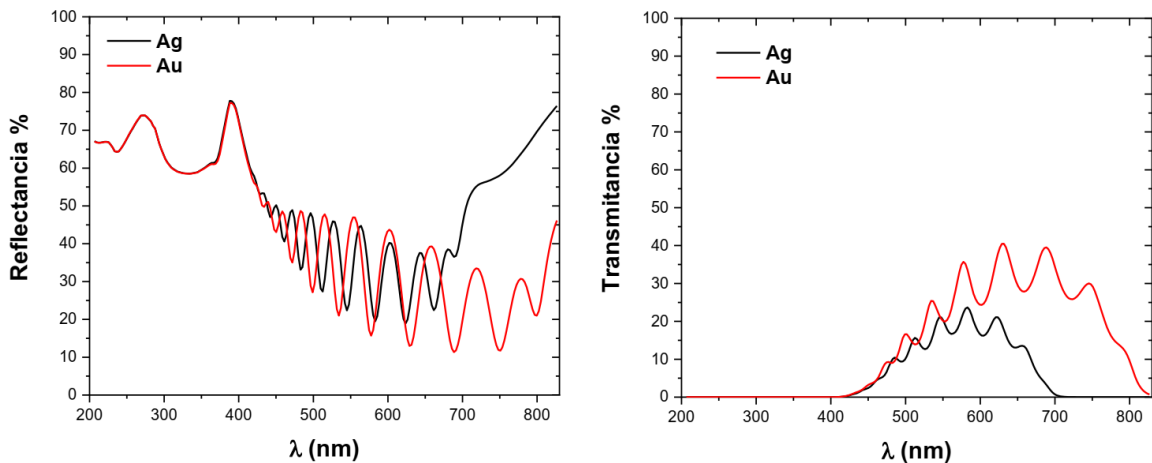


Figura 14. Comparación de espectros ópticos de reflectancia y transmitancia de sistemas con Au y Ag como compuestos metálicos. Los sistemas se conforman por 15 bicapas con capas metálicas de 12 nm y las capas de Si como componente dieléctrico con espesores de 24 nm.

Como ya se mencionó, hay 15 nm de diferencia en los espesores correspondientes a las bases de datos de ambos metales analizados y es importante decir que a una escala de 12 nm ya es probable que influya el espesor y la calidad de la película en las propiedades de los metales. También es relevante mencionar que el interés de trabajar sistemas con Ag es debido a que es un material más accesible debido a los costos.

A pesar de esto, la implementación de Au como componente metálico es una buena opción que nos permite obtener resultados interesantes y en complemento con los parámetros ya mencionados en secciones previas se puede llevar a cabo el estudio de metamateriales basados en estructuras laminares que funcionen como CAR para dispositivos fotovoltaicos, esto a partir del análisis de la obtención de espectros ópticos de reflectancia y transmitancia.

3.3 Análisis y comparación de programas de cómputo empleados en la obtención de los componentes del tensor de permitividad efectiva.

En esta sección se analizan y comparan los resultados obtenidos con las partes complementarias de los programas de cómputo desarrollados, en este caso consisten en el cálculo de las componentes del tensor de permitividad efectivo y como ya se mencionó se emplea la aproximación de medio efectivo y la aproximación de homogeneización no local. Este análisis se llevó a cabo aprovechando uno de los sistemas empleados en la comparación de programas enfocados a la obtención de espectros ópticos, es el caso del sistema de 15 bicapas con capas de 24 nm de espesor de Si como componente dieléctrico y capas de 12 nm de espesor de Ag como componente metálico. También es importante mencionar que los análisis fueron a incidencia normal.

Comenzando con el análisis de la aproximación de medio efectivo, en la siguiente figura se muestran las gráficas de permitividad obtenidas, donde se presentan tanto la parte real como la imaginaria de las diferentes componentes, de las cuales la x y y presentan la misma gráfica ya que ambas direcciones son paralelas a la dirección de propagación de la radiación electromagnética.

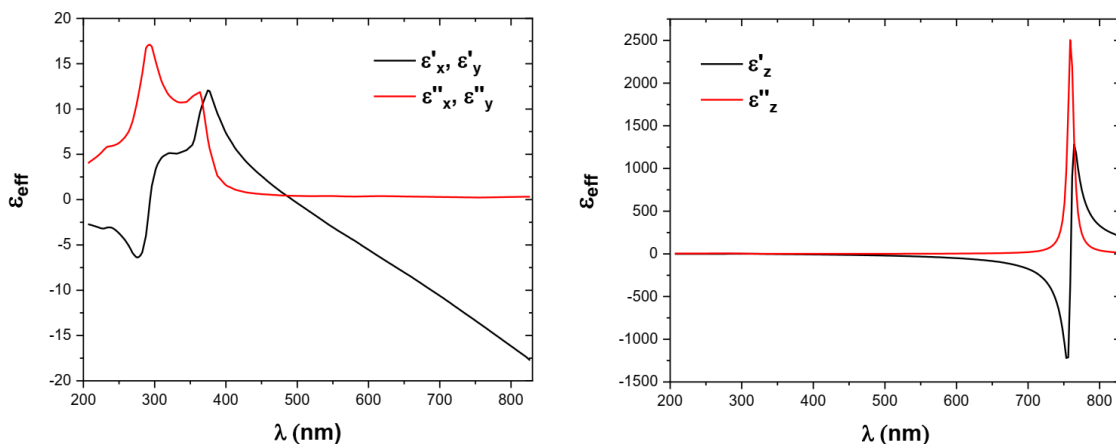


Figura 15. Gráficas de los componentes del tensor de permitividad efectiva (ϵ_{eff}) obtenidos a partir de la aproximación del medio efectivo (EMA).

Partiendo de estas gráficas, precisamente en el caso de las componentes x y y , podemos observar que existe un rango de 350 nm a 500 nm aproximadamente donde la parte real de la permitividad (ϵ') es mayor a la parte imaginaria (ϵ''), lo que significa que en este rango habrá propagación de la radiación electromagnética como se observa en los espectros ópticos de la Figura 8. Sin embargo, en la gráfica mencionada observamos un rango de longitudes de onda de paso de 400 nm a casi 800 nm, por lo tanto, podemos confirmar que la aproximación del medio efectivo no es eficiente para describir el tipo de sistemas que se analizan en el presente estudio. Cabe mencionar que en el caso de la componente z de la permitividad efectiva, sólo podemos notar resonancia alrededor

de 750 nm donde se presentan valores muy grandes de permitividad, esto debido a los cocientes que conforman la expresión para calcular esta componente. Además, debido al ángulo de incidencia no hay campo eléctrico de luz en esta dirección, por lo tanto, el análisis de este componente no es de interés para caracterizar los sistemas del presente estudio.

Por otro lado, mediante la aproximación no local (NHA), se obtuvieron las gráficas de la Figura 16 y a diferencia de EMA, en la gráfica de las componentes x y y podemos observar que la banda de longitudes de onda de paso formada por el intervalo donde ϵ' es mayor a ϵ'' coincide con la banda que se observa en los espectros ópticos de la Figura 8, por lo que podemos confirmar que mediante NHA se pueden obtener los componentes del tensor de permitividad efectiva que describen al MM en todo el rango de longitud de onda que interesa en el presente estudio, el cual es el espectro visible. Asimismo, con la comparación realizada previamente podemos validar el programa de cómputo desarrollado con esta teoría.

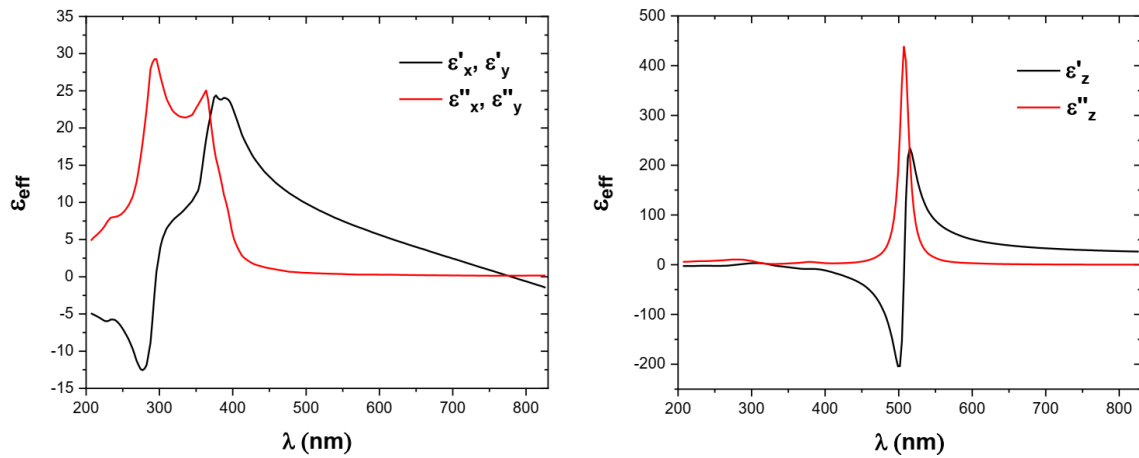


Figura 16. Gráficas de los componentes del tensor de permitividad efectiva (ϵ_{eff}) obtenidos a partir de la aproximación de homogeneización no local (NHA).

Capítulo 4

Propuesta de metamateriales como CAR en celdas solares

4.1 Metamateriales más eficientes para funcionar como CAR

Para iniciar el análisis de incorporar una CAR basada en MM, en esta sección se presentan y describen las configuraciones de los sistemas que mostraron los mejores resultados en cuanto a los espectros de R y T. En la Figura 17 podemos observar los espectros obtenidos de una de las configuraciones mencionadas, la cual consiste en un MM de 10 bicapas con TiO₂ como componente dieléctrico (60 nm) y con Ag como componente metálico (10 nm), para la plata se utilizó la base de datos de películas delgadas de 20 nm [30].

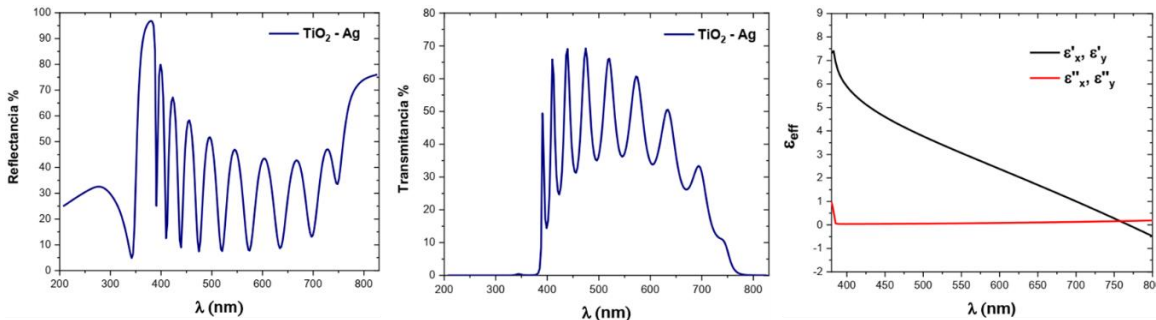


Figura 17. Espectros ópticos R y T de MM compuesto de 10 bicapas con capas de TiO₂ (60 nm) y Ag (10nm). También se muestra el espectro de las componentes *x* y *y* de la permitividad efectiva (ϵ_{eff}).

En el espectro de reflectancia podemos observar que el MM analizado genera una banda de longitudes de onda de paso en un rango de 390 nm a 750 nm aproximadamente, lo cual también se ve reflejado en el espectro de la permitividad efectiva. En esta región se observa que los puntos mínimos de las oscilaciones alcanzan el 7 % de R, por otro lado, los puntos máximos al inicio de la banda de paso mencionada, de 400 a 450 nm, se aproximan al 70 %. Sin embargo, a partir de 500 nm en adelante los puntos máximos no superan el 45 %. En relación con la transmitancia del sistema, en el espectro de la Figura 17 podemos notar que los puntos máximos de T alcanzan el 70 %, respecto a los puntos mínimos de las oscilaciones, en la mayor parte de la banda de paso rondan al 40 %.

A pesar de que la propuesta de utilizar oro como componente metálico en los MM estudiados significa un aumento en costos al aplicarse de forma experimental, resulta de interés analizar los resultados con esta opción debido a los resultados obtenidos en la sección 3.2.5 en donde se observa la mejora de algunos valores en los espectros de R y T al utilizar Au en las capas metálicas. Entonces, en la siguiente figura se muestran los espectros obtenidos de un metamaterial conformado por 10

bicapas con capas de TiO_2 de 50 nm de espesor y capas de Au de 10 nm. Esta configuración es similar al caso anterior, sin embargo, al utilizar Au en las capas metálicas en este caso la mejor configuración fue con menor cantidad de TiO_2 .

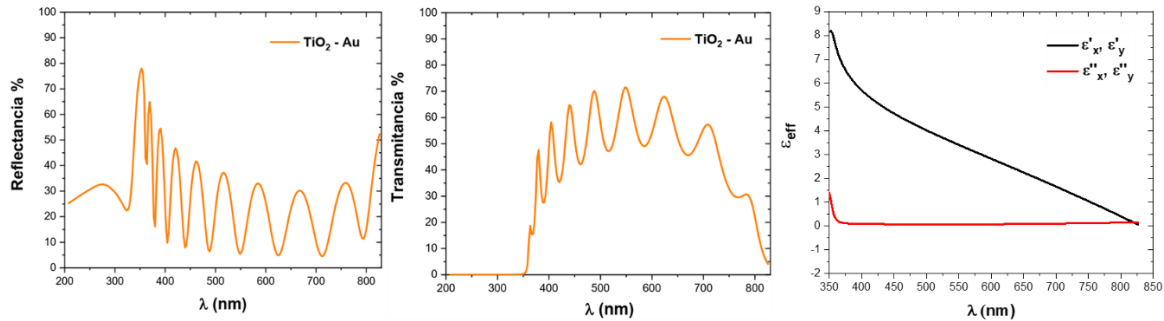


Figura 18. Espectros ópticos R y T de MM compuesto de 10 bicapas con capas de TiO_2 (50 nm) y Au (10nm). También se muestra el espectro de las componentes x y de la permitividad efectiva (ϵ_{eff}).

Analizando los espectros de la Figura 18, en los tres casos se presenta una banda de longitudes de onda de paso en un rango de 360 nm a 800 nm aproximadamente, en la cual los puntos mínimos de las oscilaciones en la parte central presentan valores menores al 6.3% de R, siendo el más bajo a 710 nm con un 4.5 % de R. Además, en esta misma parte central, los puntos máximos de las oscilaciones no superan el 37 %. De forma análoga, analizando la parte central del espectro de transmitancia podemos ver oscilaciones que presentan puntos máximos que rondan el 70% de T, siendo el más alto a 547 nm con un 71.5% de T. En contraste, los puntos mínimos de estas oscilaciones rondan el 50 % de T, siendo el punto más bajo a 460 nm con un 42 % de T. Con estos resultados se refuerza el hecho de que la incorporación de Au como componente metálico mejora el sistema.

Como ya se mencionó anteriormente, el SiO_2 como componente dieléctrico también ha sido muy relevante. Una de las mejores configuraciones con este componente consiste en un sistema de 10 bicapas con capas de SiO_2 de 120 nm de espesor y capas de Ag como componente metálico con 10 nm de espesor.

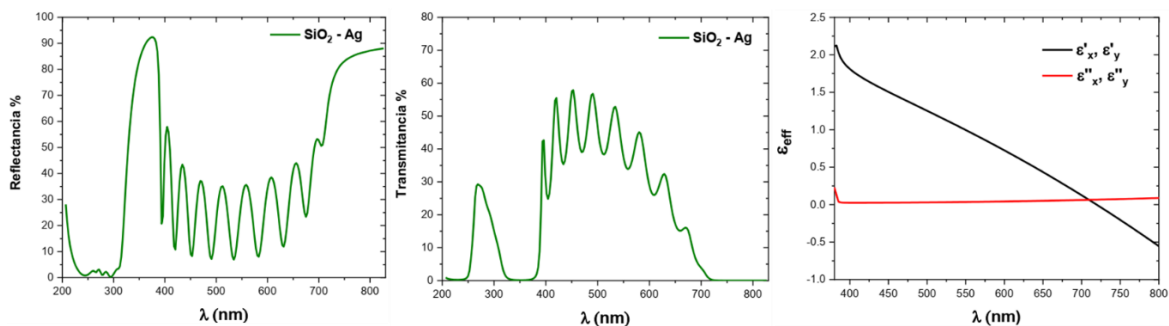


Figura 19. Espectros ópticos R y T de MM compuesto de 10 bicapas con capas de SiO_2 (120 nm) y Ag (10nm). También se muestra el espectro de las componentes x y de la permitividad efectiva (ϵ_{eff}).

Con el metamaterial mencionado se obtuvieron los espectros de la Figura 19, en los cuales se analizó la banda de longitudes de onda de paso que se observa en el rango aproximado de 390 nm a 700 nm. Empezando con el espectro de reflectancia las oscilaciones que presentan los valores más bajos de R en sus puntos mínimos son a 490 nm y a 534 nm con 7.1 % y 6.8 % de R respectivamente. Los demás puntos de este tipo presentan valores encima del 8 % de R, siendo el más elevado a 675 nm con un valor de 23 % de R. En cambio, los puntos máximos de la mayoría de las oscilaciones rondan al 35 % de R. Ahora, en el espectro de transmitancia podemos encontrar que el valor máximo alcanzado de T es a 453 nm con un 58 % y en cuanto a los puntos mínimos de las oscilaciones en este espectro, el valor más elevado de T es de 39 % a 469 nm.

De manera similar al metamaterial con TiO_2 , se realizó el análisis utilizando Au como componente metálico, obteniendo como configuración más eficiente un sistema de 10 bicapas con capas de SiO_2 con 110 nm de espesor y de Au con 10 nm. A partir de estos parámetros se obtuvieron los espectros que se muestran a continuación.

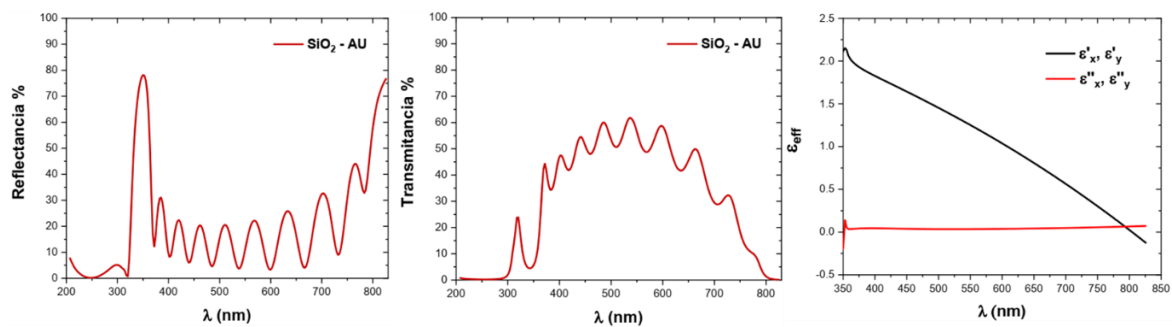


Figura 20. Espectros ópticos R y T de MM compuesto de 10 bicapas con capas de SiO_2 (120 nm) y Ag (10nm). También se muestra el espectro de las componentes x y y de la permitividad efectiva (ϵ_{eff}).

De estos espectros podemos observar claramente que continua la tendencia de la mejora del sistema con Au, desde la banda de longitudes de onda de paso en un rango más amplio (370 nm -800 nm), con porcentajes de R más bajos, siendo el más pequeño de 3.25 % a 600 nm y, por último, el máximo porcentaje de T alcanzado en de 62 % a 536 nm.

Finalmente, comparando los resultados mostrados en esta sección podemos notar que con los sistemas conformados por TiO_2 se obtienen porcentajes más altos de T y también el rango de la banda de paso en los espectros es más amplio. Sin embargo, analizando los resultados de las mejores configuraciones encontradas es evidente que a pesar de obtener valores mínimos de R de 3.5 %, las oscilaciones observadas en los espectros ópticos también presentan puntos máximos entre el 20 y 50 % de R, lo cual representa pérdidas de luz incidente. Además, en el caso de la transmitancia el máximo valor alcanzado fue de 71.5% y comparado con el caso de un sustrato de vidrio sin CAR que presentan un poco más del 90 % de T, este resultado es inadecuado para su uso como CAR.

Considerando el análisis realizado hasta el momento, podemos confirmar que la optimización de datos de la capa metálica es el principal reto para el estudio teórico de metamateriales laminares, ya que al depender de bases de datos de la literatura y de fuentes ajenas al estudio, se restringe el control de espesores adecuados y calidad de las películas, parámetros que son muy importantes para controlar las pérdidas a escala nanométrica, Ham y colaboradores [38] han obtenido un sistema metal-dieléctrico con Ag que transmite hasta 90 % en cierto rango de longitudes de onda.

Capítulo 5

Sistema dieléctrico – dieléctrico de espesores no periódicos

Para complementar el presente estudio, se ha optado por analizar sistemas laminares completamente dieléctricos para optimizar una CAR, de manera similar a los reportados comúnmente [1-5]. Aunado a esto, resulta interesante mencionar que actualmente ya existen diferentes enfoques que permiten la obtención de metamateriales compuestos completamente de materiales dieléctricos y también mediante estructuras con un orden aleatorio [39], por lo que existe la posibilidad de estar dentro del concepto de metamateriales y su estudio como CAR.

5.1 Reflectancia total de la celda solar con y sin CAR

Aplicando la aproximación de Heavens [24], en esta sección se analizaron los espectros de reflectancia de la celda solar basada en CdS/CdTe con y sin capa antirreflejante. Partiendo del análisis de los espectros de la Figura 21, podemos notar que se logró obtener un resultado coherente de la R total de la celda solar, sin embargo, al observar el espectro de la celda con CAR podemos ver que se obtiene un espectro erróneo, ya que se presentan valores de R mucho mayores al 100 % y la curva presenta bastante interferencia. En el presente caso la CAR utilizada se basa en un metamaterial de 10 bicapas con capas de TiO₂ de 50 nm y de Au de 10 nm, uno de los sistemas previamente analizados en la sección 4.1. En cuanto al resto de capas que componen al sistema (ver Figura 7), los espesores fueron de 1 mm para el sustrato de vidrio, de 450 nm para el estanoato de cadmio (Cd₂SnO₄), 160 nm para el CdS y 4500 nm para el CdTe.

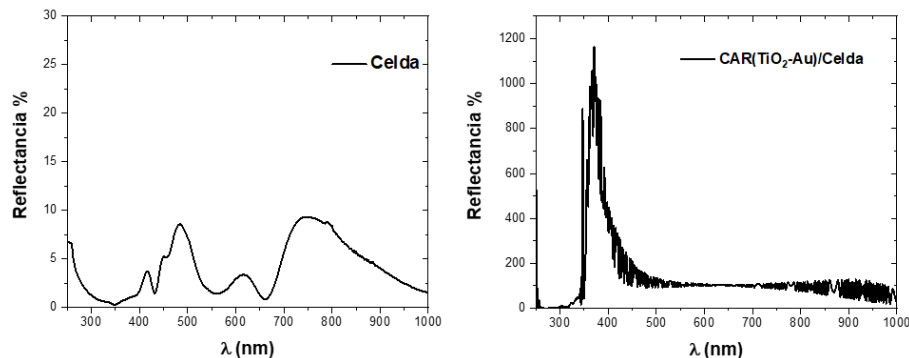


Figura 21. Espectros de R total de celda solar basada en CdS / CdTe con (derecha) y sin (izquierda) CAR (TiO₂-Au). El esquema del sistema analizado se muestra en la Figura 7.

Entonces, analizando diferentes sistemas con la intención de encontrar el problema y lograr validar el programa, se encontró que la teoría y el mismo programa no funcionan al analizar sistemas

con varias capas, característica de los metamateriales que se pretenden emplear y por lo cual buscaron otras opciones para realizar este análisis. Dentro de las opciones consideradas, la más interesante fue utilizar el software de uso abierto OpenFilters desarrollado por Martinu y Larouche [40]. Este software cuenta con diferentes herramientas que te permiten diseñar filtros ópticos, una de las cuales te permite calcular R, T y A de sistemas multicapas mediante un método de matrices. En las siguientes secciones se presentarán resultados obtenidos mediante este software.

5.2 Propuesta de sistemas completamente dieléctricos y con arreglos aleatorios

Otra de las herramientas del software OpenFilters es la optimización de los filtros ópticos a través de diferentes métodos [40], esto respecto a un espectro de referencia. Mediante esta herramienta se logró llevar a cabo el estudio y optimización de capas antirreflejantes basadas en estructuras multicapa de diferentes compuestos dieléctricos y de espesores aleatorios. El programa fue validado al lograr obtener los mismos espectros ópticos de sistemas analizados previamente con los programas de secciones anteriores.

5.2.1 Sistemas AR optimizados en sustrato de vidrio

Para realizar este análisis se consideraron los materiales dieléctricos que han resultado más eficientes en anteriores secciones, SiO_2 y TiO_2 , los cuales también se ha mencionado que han sido propuestos como CAR. Por lo tanto, utilizando la optimización por el método de aguja descrito en [40] se comenzó el análisis de un sistema inicial de 20 capas con capas de TiO_2 (20 nm) y de SiO_2 (40 nm), esto sobre un sustrato de vidrio de 1 mm de espesor y con el sistema en condiciones de aire. En el esquema de la Figura 22 se observa la configuración resultante de la optimización, la cual consiste en 8 capas con espesores variados y en la figura también se muestran sus respectivos espectros ópticos (R, T y A), donde se analizaron los casos donde la luz incide tanto por el lado del vidrio como del lado de la CAR.

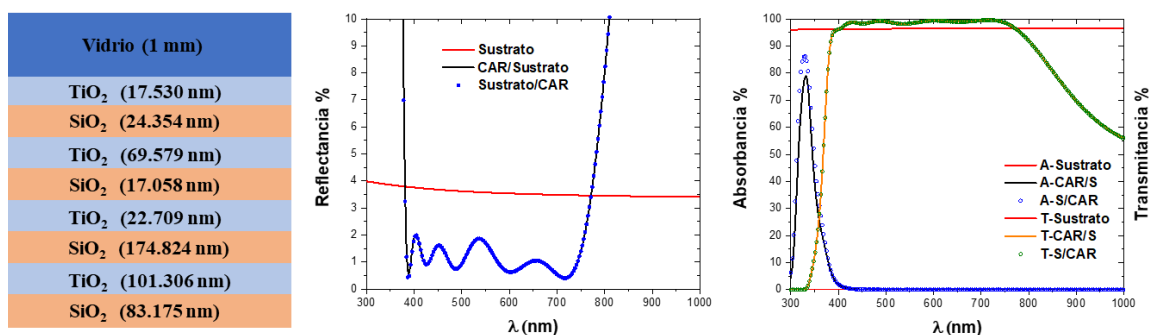


Figura 22. Esquema de CAR optimizada y sus respectivos espectros de R, T y A comparados con los del sustrato de vidrio. En la configuración CAR/Sustrato, la luz incide primero sobre la CAR y en Sustrato/CAR, incide primero sobre el sustrato.

En el espectro de reflectancia podemos ver que la CAR ($\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$) optimizada logró reducir la R del sustrato de vidrio de aproximadamente 4% a valores que rondan el 1 %, esto en un rango aproximado de 400 a 750 nm. Este mismo rango se ve reflejado en el caso de la transmitancia donde también se mejora la T del sustrato obteniendo valores alrededor del 99 %. En cuanto a la absorbancia de la CAR podemos notar en el espectro que a partir de 400 nm en adelante es cero, esto es importante para que la celda aproveche la mayor cantidad de luz incidente.

Con estos resultados obtenidos se incorporó la CAR a la celda solar basada en CdS/CdTe para obtener la R total del sistema y como se observa en los espectros de la Figura 23, a pesar de mejorar las propiedades ópticas del sustrato de vidrio la R total del sistema con CAR incrementó respecto a la R total del sistema sin CAR, solo hay una pequeña región poco antes de 500 nm donde los valores de R son más pequeños. Sin embargo, en el resto del espectro la reflectancia es mucho mayor y no se esperaría obtener una mejor eficiencia. Esta diferencia de R también se refleja en el espectro de absorbancia, donde se nota que el sistema absorbe menos debido a las pérdidas por reflexión. Cabe mencionar que a diferencia de la aproximación de Heavens, OpenFilters no considera a las últimas capas como medios absorbentes, lo cual podría influir en este resultado.

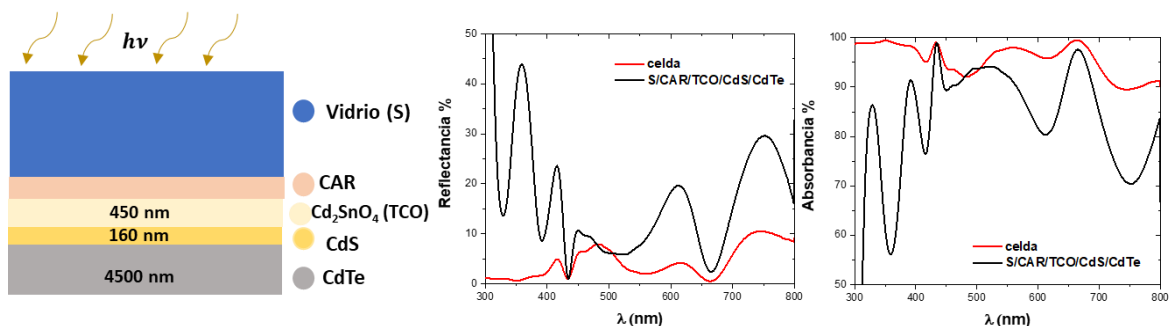


Figura 23. Esquema de dispositivo fotovoltaico S/CAR/TCO/CdS/CdTe y sus espectros de R y A comparados con los de la celda sin CAR.

Un inconveniente que surgió al utilizar OpenFilters es que fue imposible lograr un análisis del dispositivo con la configuración CAR/Celda, lo cual podría no ser tan relevante con los resultados observados en la optimización del sistema CAR/S donde los espectros ópticos son los mismos en la mayor parte del espectro en los dos casos analizados.

5.2.2 Sistemas AR optimizados en sustrato de vidrio y considerando la celda solar

Debido a los resultados de la sección anterior, se aprovechó la posibilidad en OpenFilters de fijar los parámetros de capas al momento de realizar una optimización para fijar los espesores de las capas S, TCO, CdS y CdTe para optimizar la CAR y lograr reducir la R del dispositivo. Entonces,

con esta manera de optimizar se encontró que reduciendo el número de capas dieléctricas se reducía la reflectancia del sistema y en la siguiente Figura se muestran los espectros de R más relevantes.

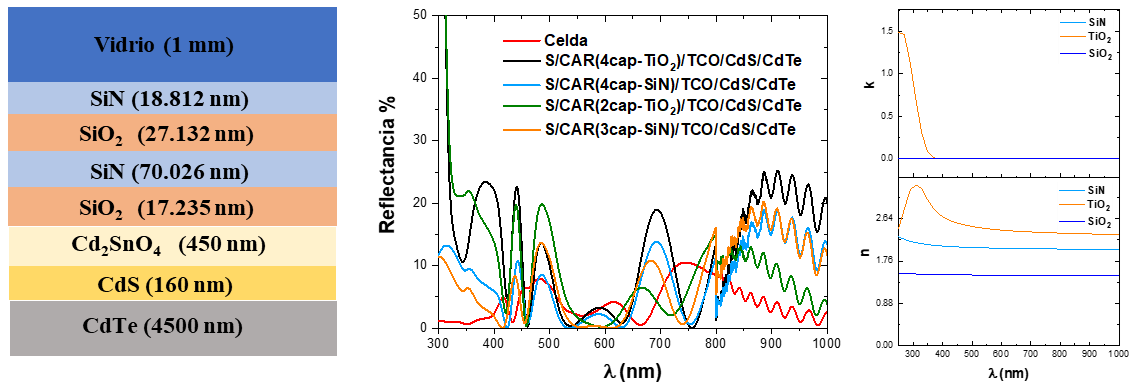


Figura 24. Esquema de dispositivo S/CAR/TCO/CdS/CdTe con CAR compuesta de SiN y SiO₂. También se muestran los espectros de R más relevantes de la optimización con la celda solar y su comparación con la R de la celda sin CAR. Adicionalmente se muestra los datos graficados del índice de refracción y el coeficiente de extinción de los materiales dieléctricos usados en esta sección.

El esquema de la Figura 24 corresponde al sistema con una CAR compuesta de SiN y SiO₂, donde el SiN se ha utilizado el lugar de TiO₂ ya que también presenta un índice de refracción alto en comparación del SiO₂ (ver Figura 24) y precisamente ese sistema es el que presenta mayores zonas que disminuyen la R respecto a la reflectancia de la celda sin CAR, principalmente en la oscilación cercana a 500 nm y la cercana a 750 nm, en el rango central de 550 nm a 650 nm todos los sistemas analizados presentan valores de R menores al de la celda sin CAR.

5.2.3 Sistema AR basado en arreglo completamente dieléctrico y periódico

Otro resultado relevante obtenido mediante OpenFilters es el caso de un sistema de capas compuestas de TiO₂ y SiO₂ con espesores periódicos, 18 nm y 40 nm, respectivamente. Mediante este sistema incorporado a la celda se logró obtener una reducción que no se observó en los espectros de la sección anterior, esto en el rango de 470 nm a 520 nm aproximadamente (ver Figura 24 y 25).

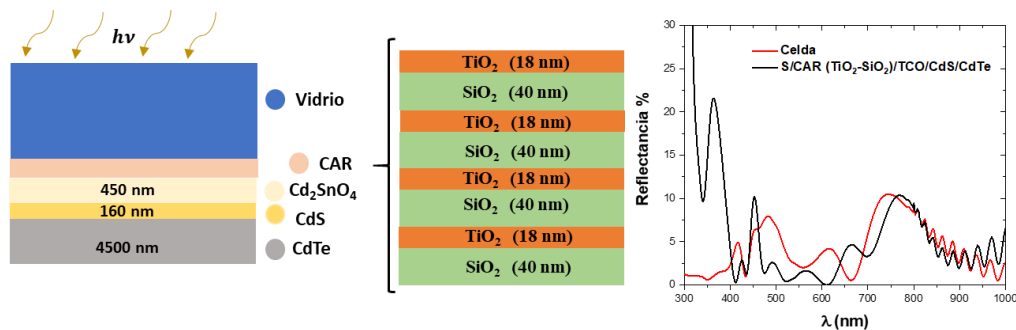


Figura 25. Esquema de dispositivo S/CAR/TCO/CdS/CdTe y su espectro de R comparado con el de la celda sin CAR. La CAR está compuesta de capas periódicas de TiO₂ (18 nm) y de SiO₂ (40 nm).

En general, dentro del rango del espectro visible el sistema analizado presenta valores de R menores al de la celda sin CAR, las excepciones son las oscilaciones a 450 nm y a 660 nm aproximadamente, por lo que esta configuración periódica puede incrementar la cantidad de luz transmitida a la celda solar y posiblemente mejorar su eficiencia.

5.2 Análisis de metasuperficie basada en nanorejillas para una celda solar (CdS/CdTe)

Debido a que no se lograron obtener resultados óptimos de metamateriales laminares con componentes metal-dieléctrico para funcionar como CAR, se consideró una manera diferente de incorporar el sistema de nanorejillas con componentes metal y dieléctrico, esta consiste en considerar como componente dieléctrico al estannato de cadmio (Cd_2SnO_4) y como componente metálico a la plata (datos de películas de 20 nm) en un medio homogéneo cuyas componentes del tensor de permitividad efectivo fueron calculadas con las ecuaciones de EMA (1.83) y utilizando diferentes fracciones de llenado del metal (f): 0.5, 0.2 y 0.8. Con los valores obtenidos de ϵ_{eff} se pudieron calcular tanto el índice de refracción efectivo (n_{eff}) como el coeficiente de extinción efectivo (k_{eff}) y fue posible incorporar este material a la base de datos de OpenFilters. Para simular la incorporación de las nanorejillas al dispositivo fotovoltaico se generó una capa con el metamaterial en la interfaz $\text{Cd}_2\text{SnO}_4/\text{CdS}$, como en el esquema de la Figura 26, y se optimizó su espesor.

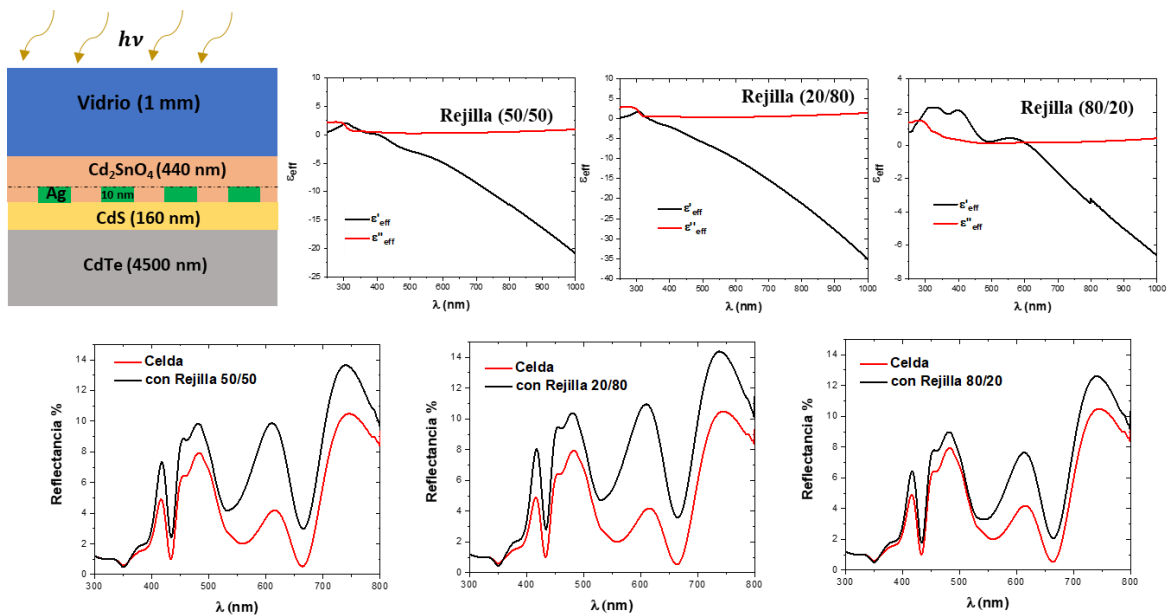


Figura 26. Esquema de dispositivo S/TCO/Rejillas/Unión n-p. Se muestran las ϵ_{eff} de las rejillas a diferentes fracciones de llenado y sus respectivos espectros de R comparados con los de la celda sin rejillas.

En los resultados presentados en la Figura 26 podemos ver que el espesor óptimo de las nanorejillas fue de 10 nm, sin embargo, no se analizaron espesores menores a este debido a los problemas discutidos en el caso de los MM laminares. Por otro lado, en cuanto a los espectros de R se observa que ningún sistema logra obtener valores de R menores a los de la celda sin nanorejillas, por lo que no se espera una mejora en la eficiencia de la celda.

Es importante mencionar que aparte del problema con la base de datos metálica, al emplear la aproximación de medio efectivo para caracterizar las nanorejillas sabemos que no es exacta y que sólo funciona a grandes longitudes de onda, además, al basarse sólo en la fracción de llenado el medio homogéneo no necesariamente se trata de nanorejillas y no se tiene un control de la orientación de los componentes y como ya se mencionó previamente, es un aspecto muy relevante en la propagación de la radiación electromagnética incidente y en este caso dentro del dispositivo. Por lo tanto, para obtener resultados determinantes es necesario complementar este análisis de forma experimental y de forma teórica con el desarrollo de programas que nos permitan caracterizar de forma más exacta los parámetros efectivos de una metasuperficie y también poder manipular la orientación de sus componentes.

Capítulo 6

Análisis de la eficiencia de conversión de una celda solar (CdS /CdTe) con y sin CAR

Contando con las reflectancias totales de los sistemas analizados como CAR en celdas solares, se logró implementar el programa basado en la aproximación de S. Sze [27] y obtener los parámetros característicos de la celda solar basada en CdS/CdTe y su eficiencia de conversión. A continuación, se muestran las curvas características P-V y J-V obtenidas del análisis de la celda solar basada en CdS/CdTe y de la misma celda, pero con la CAR basada en capas periódicas de TiO₂ (18 nm) y de SiO₂ (40 nm), con la cual se observaron los mejores resultados de reflectancia.

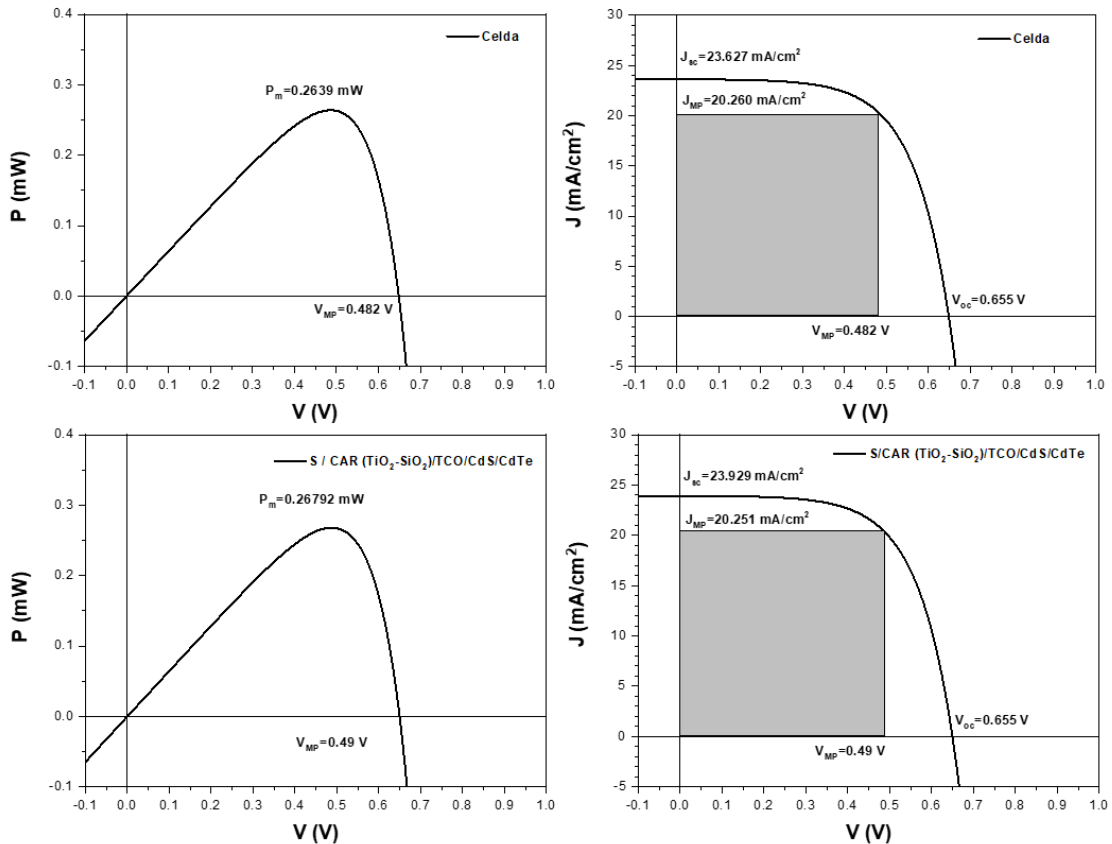


Figura 27. Curva P-V y J-V de celda solar basada en CdS / CdTe con y sin CAR.

De las curvas mostradas se obtuvieron los parámetros característicos P_m , V_{MP} , J_{MP} , V_{OC} y J_{SC} , de los cuales podemos ver que sólo el voltaje a circuito abierto V_{OC} se mantiene igual. La potencia máxima (P_m), ambas densidades de corriente (J_{MP} y J_{SC}) y el voltaje a máxima potencia V_{MP} son

parámetros que aumentan un poco al mejorar la R del dispositivo. Con esta información fue posible aplicar las ecuaciones 1.109 y 1.110 para obtener el factor de llenado (FF) y la eficiencia de conversión (η) y se muestran en la Tabla 2.

En esta tabla podemos encontrar que efectivamente los sistemas que mejoraron la eficiencia de la celda solar fueron el caso de la CAR de 4 capas de SiN y SiO₂ y también el caso de la CAR basada en capas periódicas de TiO₂ (18 nm) y de SiO₂ (40 nm), el primer caso mejora un 0.049 % y el segundo caso en un 0.147 %.

Tabla 2. Parámetros obtenidos mediante la aproximación de Sze [27] para caracterizar el desempeño de una celda solar con y sin CAR.

Parámetros	Celda	Celda/CAR (4 capas TiO ₂ /SiO ₂)	Celda/CAR (4 capas SiN/SiO ₂)	Celda/CAR (2 capas TiO ₂ /SiO ₂)	Celda/CAR (3 capas SiN/SiO ₂)	Celda/CAR (8 capas TiO ₂ /SiO ₂)
V _{MP} (V)	0.482	0.483	0.490	0.483	0.483	0.490
V _{OC} (V)	0.655	0.655	0.655	0.647	0.655	0.655
J _{MP} (mA/cm ²)	-20.260	-20.260	-20.051	-19.920	-20.173	-20.551
J _{SC} (mA/cm ²)	-23.627	-23.627	-23.728	-23.287	-23.540	-23.929
FF (mA/cm ²)	0.632	0.632	0.632	0.637	0.631	0.633
η (%)	9.776	9.776	9.825	9.611	9.734	9.923

Para complementar estos resultados se realizó el cálculo de la eficiencia de conversión de la celda solar considerando una R total de cero, para tener el límite máximo de mejora posible de η sólo optimizando las propiedades ópticas, en este caso la reflectancia del dispositivo fotovoltaico. Este porcentaje máximo de η resulto de 10.427 %, por lo que el rango de mejora es de 0.641 %. Esto indica que, del 100 % de mejora que se puede alcanzar reduciendo la reflectancia de la celda se ha logrado mejorar un 22.6 % implementando una CAR basada en capas periódicas de TiO₂ y SiO₂. Además, posiblemente al realizar el estudio de forma experimental con las capas AR propuestas se obtengan mejores resultados, ya que se obtuvieron resultados que con el sustrato de vidrio reflejaban alrededor del 1 % en el rango del espectro visible.

Conclusiones

Mediante las teorías de matriz de transferencia y expansión en modos de bulto [23] se lograron escribir programas de cómputo en Fortran para estudiar los espectros ópticos (R y T) de metamateriales basados en estructuras laminares, estos programas y teorías coincidieron en los resultados obtenidos y además fueron validados respecto a softwares ya establecidos y de uso abierto como Filmetrics y OpenFilters.

Con estos programas se identificaron los parámetros que influyen en el diseño de MM laminares como capas antirreflejantes para celdas solares que absorben principalmente en el rango de frecuencias visibles: base de datos de los componentes adecuada, número de celdas unitarias, factor de llenado y variación de los componentes metal y dieléctrico. A partir del control de estos parámetros se lograron diseñar y optimizar sistemas que presentan en sus espectros ópticos bandas de longitud de ondas de paso en el rango del espectro visible, dentro de estos sistemas los más relevantes fueron MM de 10 bicapas con capas de TiO_2 como componente dieléctrico y con capas de Ag/Au como componente metálico. A pesar de ser los resultados más relevantes, con estos sistemas sólo se alcanzaron porcentajes de transmitancia de 71.5 %, para mejorar este valor y tener resultados más interesantes y determinantes es importante tener bases de datos de películas delgadas metálicas de varios espesores y que controlen la calidad, ya que a escala nanométrica es muy importante para evitar las pérdidas por absorción.

La aproximación de homogeneización no local [23] nos permitió caracterizar de mejor manera las componentes del tensor de permitividad efectiva de los metamateriales estudiados.

Mediante el software OpenFilters se optimizaron capas AR basadas en componentes dieléctricos ($\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$) y con espesores aleatorios que lograron reducir la reflectancia del sustrato de vidrio a porcentajes que rondan el 1 % de R dentro del rango del espectro visible, sin embargo, al considerar la celda en el sistema la R incrementa posiblemente debido al contraste de permitividades con los componentes de la celda (CdS/CdTe). Al considerar la celda en la optimización, se encontró una CAR de cuatro capas, compuesta de SiN y SiO_2 , que disminuyó los porcentajes de R en varias regiones del espectro. Un resultado similar se obtuvo al considerar un sistema multicapa periódico de ocho capas de componentes dieléctricos, TiO_2 (18 nm) y SiO_2 (40 nm).

Aplicando la aproximación desarrollada por S. Sze [27], se logró calcular la eficiencia de conversión de una celda solar basada en CdS/CdTe y se observó la influencia en su desempeño al considerar una CAR. Sólo los dos sistemas AR mencionados en el párrafo anterior aumentaron la eficiencia, la CAR basada en SiN/ SiO_2 aumento en un 0.049 % y la CAR basada en $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ en un 0.147 %, resultado que refleja un 22.6 % del total de mejora posible al reducir la R del sistema.

Finalmente, el estudio de capas AR basadas en metaestructuras se vio mermado por la importancia del factor de la calidad y espesor de las películas metálicas en las bases de datos, las cuales fueron limitadas, debido a esto como proyecto a futuro el estudio se puede enriquecer de gran manera con la obtención experimental de bases de datos óptimas para incorporarse a metamaestructuras que se desean proponer como capas antirreflejantes para celdas solares. Otro aspecto que podría ser interesante observar y analizar de forma experimental es la interacción de la luz con la metasuperficie propuesta, ya que como mencionan Kamran y colaboradores [14] pueden funcionar como “trampas de luz” y mejorar la absorbancia del dispositivo fotovoltaico y es algo que no se pudo observar con la aproximación realizada en el presente estudio.

Productos generados

Los productos generados de este trabajo de tesis consisten en la presentación en los siguientes congresos:

1. Estudio de capas antirreflejantes de metaestructuras para celdas solares. – *H. Hernández Flores, F. Pérez Rodríguez y C. Diliégros Godines. Presentado en DES-2021 (Reunión Anual 2021 de la División de Estado Sólido de la Sociedad Mexicana de Física) México 2021. Modalidad: Ponencia.*
2. Metamaterials as antireflection coatings for solar cells applications. - *H. Hernández Flores, F. Pérez Rodríguez y C. Diliégros Godines. Presentado en FCSE-2021(9th Symposium on Functional Coatings and Surface Engineering) Canada 2021. Modalidad: Poster.*
3. Estudio de capas antirreflejantes de metaestructuras para celdas solares. – *H. Hernández Flores, F. Pérez Rodríguez y C. Diliégros Godines. Presentado en Simposio estudiantil de posgrado en ciencia de materiales BUAP 2021, México 2021. Modalidad: Ponencia.*
4. Estudio de capas antirreflejantes de metaestructuras para celdas solares. – *H. Hernández Flores, F. Pérez Rodríguez y C. Diliégros Godines. Presentado en Seminario de Estudiantes IFUAP 2021, México 2021. Modalidad: Ponencia.*

Bibliografía

- [1] 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.*, vol. 35, no. 2, p. 021201, 2017, doi: 10.1116/1.4973909.
- [2] J. Wang *et al.*, “Highly Stable and Efficient Mesoporous and Hollow Silica Antireflection Coatings for Perovskite Solar Cells,” *ACS Appl. Energy Mater.*, vol. 3, no. 5, pp. 4484–4491, 2020, doi: 10.1021/acsaem.0c00175.
- [3] 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*, vol. 111, pp. 160–164, 2013, doi: 10.1016/j.solmat.2012.12.037.
- [4] J. Zhang *et al.*, “Simultaneous realization of light distribution and trapping in micromorph tandem solar cells using novel double-layered antireflection coatings,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 143, pp. 546–552, 2015, doi: 10.1016/j.solmat.2015.08.002.
- [5] 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.)*, vol. 177, pp. 123–130, 2019, doi: 10.1016/j.ijleo.2017.12.024.
- [6] Y. Liu, Y. Chen, J. Li, T. chen Hung, and J. Li, “Study of energy absorption on solar cell using metamaterials,” *Sol. Energy*, vol. 86, no. 5, pp. 1586–1599, 2012, doi: 10.1016/j.solener.2012.02.021.
- [7] V. G. Veselago, “The Electrodynamics of Substances with Simultaneous Negative Values of ϵ and μ ,” *Sov. Phys. Uspekhi*, vol. 10, no. 4, pp. 509–514, 1968.
- [8] P. Kužel and H. Nemeč, *Chapter 22: Metamaterials*, vol. 171. 2013.
- [9] M. Beech, *The Physics of Invisibility*. New York: Springer, 2012.
- [10] A. A. Zhilin and M. P. Shepilov, “Metamaterials: A new direction in materials science,” *Glas. Phys. Chem.*, vol. 36, no. 5, pp. 521–553, 2010, doi: 10.1134/S1087659610050019.
- [11] C. L. Cortes, W. Newman, S. Molesky, and Z. Jacob, “Corrigendum: Quantum nanophotonics using hyperbolic metamaterials (2012 J. Opt. 14 063001),” *J. Opt. (United Kingdom)*, vol. 16, no. 12, 2014, doi: 10.1088/2040-8978/16/12/129501.
- [12] Y. Guo, W. Newman, C. L. Cortes, and Z. Jacob, “Applications of hyperbolic metamaterial

- substrates,” *Adv. Optoelectron.*, vol. 2012, no. 1, pp. 1–10, 2012, doi: 10.1155/2012/452502.
- [13] P. Huo, S. Zhang, Y. Liang, Y. Lu, and T. Xu, “Hyperbolic Metamaterials and Metasurfaces: Fundamentals and Applications,” *Adv. Opt. Mater.*, vol. 7, no. 14, pp. 1–25, 2019, doi: 10.1002/adom.201801616.
- [14] M. Kamran and M. Faryad, “Anti-reflection coatings of zero-index metamaterial for solar cells,” *AIP Adv.*, vol. 10, no. 2, 2020, doi: 10.1063/1.5129516.
- [15] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd ed. New Delhi: Wiley India, 2011.
- [16] P. Yeh, *Optical waves in layered media*. John Wiley & Sons Inc., 1988.
- [17] P. Markoš and C. M. Soukoulis, *Wave Propagation. From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials*. Princeton: Princeton University Press, 2008.
- [18] D. A. Iakushev, N. M. Makarov, and F. Pérez-Rodríguez, “Narrow-pass-band filters based on binary superlattices with strong impedance contrast,” *Fiz. Nizk. Temp.*, vol. 43, no. 8, pp. 1141–1145, 2017, doi: <https://doi.org/10.1063/1.5001289>.
- [19] S. Cortés-López, S. L. Gastélum-Acuña, F. J. Flores-Ruiz, V. Garcia-Vazquez, R. García-Llamas, and F. Pérez-Rodríguez, “Berreman effect in bimetallic nanolayered metamaterials,” *Opt. Mater. (Amst.)*, vol. 99, no. December 2019, p. 109578, 2020, doi: 10.1016/j.optmat.2019.109578.
- [20] A. Konovalenko *et al.*, “Nonlocal electrodynamics of homogenized metal-dielectric photonic crystals,” *J. Opt. (United Kingdom)*, vol. 21, no. 8, p. 85102, 2019, doi: 10.1088/2040-8986/ab2a4e.
- [21] W. L. Mochn and M. Del Castillomussot, “Optics of multilayered conducting systems: Normal modes of periodic superlattices,” *Phys. Rev. B*, vol. 37, no. 12, pp. 6763–6771, 1988, doi: 10.1103/PhysRevB.37.6763.
- [22] F. J. Lawrence, C. M. de Sterke, L. C. Botten, R. C. McPhedran, and K. B. Dossou, “Modeling photonic crystal interfaces and stacks: impedance-based approaches,” *Adv. Opt. Photonics*, vol. 5, no. 4, p. 385, 2013, doi: 10.1364/aop.5.000385.
- [23] S. Cortés and F. Perez, “Nonlocal effects in nanolayered hyperbolic metamaterials,” in *2D and Quasi-2D Composite and Nanocomposite Materials*, Elsevier Inc., 2020, pp. 163–191.
- [24] O. S. Heavens, *Optical properties of thin solid film*. New York: Dover, 1991.
- [25] S. P. Jetp, “S.m.rytov,” vol. 2, no. 3, pp. 466–475, 1956.
- [26] A. A. Krokhin, J. Arriaga, L. N. Gumen, and V. P. Drachev, “High-frequency homogenization for layered hyperbolic metamaterials,” *Phys. Rev. B*, vol. 93, no. 7, pp. 1–11, 2016, doi: 10.1103/PhysRevB.93.075418.
- [27] S. N. Sze, *Physics of semiconductor devices*, 2nd ed. New York: John Wiley & Sons Inc.,

- 1981.
- [28] M. Polyanskiy, “Refractive index database.” <https://refractiveindex.info> (accessed Apr. 20, 2021).
- [29] KLA, “Refractive Index Database.” <https://www.filmetrics.com/refractive-index-database> (accessed Apr. 25, 2021).
- [30] A. Ciesielski, L. Skowronski, M. Trzcinski, and T. Szoplik, “Controlling the optical parameters of self-assembled silver films with wetting layers and annealing,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. 421, pp. 349–356, 2017, doi: 10.1016/j.apsusc.2017.01.039.
- [31] J. Gong, R. Dai, Z. Wang, and Z. Zhang, “Thickness Dispersion of Surface Plasmon of Ag Nano-thin Films: Determination by Ellipsometry Iterated with Transmittance Method,” *Sci. Rep.*, vol. 5, pp. 1–5, 2015, doi: 10.1038/srep09279.
- [32] P. B. Johnson and R. W. Christy, “Optical Constant of the Nobel Metals,” *Phys. Rev. B*, vol. 6, no. 12, pp. 4370–4379, 1972.
- [33] L. V. Rodríguez-de Marcos, J. I. Larruquert, J. A. Méndez, and J. A. Aznárez, “Self-consistent optical constants of SiO₂ and Ta₂O₅ films,” *Opt. Mater. Express*, vol. 6, no. 11, p. 3622, 2016, doi: 10.1364/ome.6.003622.
- [34] Y. Yu *et al.*, “Thickness dependence of surface plasmon damping and dispersion in ultrathin Ag films,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 72, no. 20, pp. 1–6, 2005, doi: 10.1103/PhysRevB.72.205405.
- [35] W. Wang *et al.*, “Transparent ultrathin oxygen-doped silver electrodes for flexible organic solar cells,” *Adv. Funct. Mater.*, vol. 24, no. 11, pp. 1551–1561, 2014, doi: 10.1002/adfm.201301359.
- [36] T. Siefke *et al.*, “Materials Pushing the Application Limits of Wire Grid Polarizers further into the Deep Ultraviolet Spectral Range,” *Adv. Opt. Mater.*, vol. 4, no. 11, pp. 1780–1786, 2016, doi: 10.1002/adom.201600250.
- [37] A. Ciesielski, L. Skowronski, M. Trzcinski, E. Górecka, P. Trautman, and T. Szoplik, “Evidence of germanium segregation in gold thin films,” *Surf. Sci.*, vol. 674, no. April, pp. 73–78, 2018, doi: 10.1016/j.susc.2018.03.020.
- [38] J. Ham, S. Kim, G. H. Jung, W. J. Dong, and J. L. Lee, “Design of broadband transparent electrodes for flexible organic solar cells,” *J. Mater. Chem. A*, vol. 1, no. 9, pp. 3076–3082, 2013, doi: 10.1039/c2ta00946c.
- [39] K. Sun *et al.*, “An overview of metamaterials and their achievements in wireless power transfer,” *J. Mater. Chem. C*, vol. 6, no. 12, pp. 2925–2943, 2018, doi: 10.1039/c7tc03384b.
- [40] S. Larouche and L. Martinu, “OpenFilters: Open-source software for the design, optimization,

and synthesis of optical filters,” *Appl. Opt.*, vol. 47, no. 13, pp. 219–230, 2008, doi:
10.1364/AO.47.00C219.