



BUAP

Instituto de Ciencias

Centro de Investigaciones en Dispositivos Semiconductores

Posgrado en Dispositivos Semiconductores

Modelado y simulación de celdas solares transparentes a base de la heterounión $n\text{-TiO}_2/p\text{-NiO}$.

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

Presentada por:

María del Rayo Morales Díaz

Matrícula: 220470574

Dirigida por:

Dr. Enrique Rosendo Andrés

Director

Dra. Reina Galeazzi Isasmendi

Codirector

Dr. Héctor Pérez Ladrón de Guevara

Codirector Externo

BUAP. Diciembre de 2021.

Beca CONACyT # 1076490

CONTENIDO

CAPÍTULO 1.....	6
MARCO TEÓRICO	6
1.1 FÍSICA DE LAS CELDAS SOLARES	6
1.1.1 Difusión y arrastre.....	7
1.1.2 Operación de una celda solar	8
1.1.3 Recombinación.....	10
1.2 CARACTERÍSTICAS DE DESEMPEÑO DE LAS CELDAS SOLARES	11
1.2.1 Gráfica I-V de la celda solar	11
1.2.2 Corriente de corto circuito.....	14
1.2.3 Voltaje de circuito abierto.....	14
1.2.4 Potencia máxima.....	14
1.2.5 Factor de llenado.....	15
1.2.6 Eficiencia.....	15
1.3 CELDAS SOLARES DE HOMOUNIÓN Y HETEROUNIÓN	16
1.3.1 Celdas solares de homounión	16
1.3.2 Celdas solares de heterounión	16
1.4 CARACTERÍSTICAS DE LOS MATERIALES	18
1.4.1 TCO (Transparent Conductive Oxide).....	19
1.4.2 Dióxido de Titanio (TiO ₂).....	20
1.4.2a Variación de la banda de energía prohibida.....	22
1.4.3 Óxido de Niquel (NiO)	24
1.5 ESTRUCTURA DE LA CELDA SOLAR.....	26
1.5.1 Análisis de las propiedades de los materiales.....	27
1.5.2 Depósito de la celda solar	28
1.6 CARACTERÍSTICAS DE LA CELDA SOLAR A SIMULAR	30
1.6.1 Celda solar iluminada desde la región n de la unión.....	30

1.6.2 Celda solar iluminada desde la región p de la unión.....	31
CAPÍTULO 2.....	33
DESARROLLO EXPERIMENTAL	33
2.1 DESCRIPCIÓN DEL SIMULADOR.....	33
2.1.1 Ecuaciones utilizadas por SCAPS	33
2.1.2 Simulador SCAPS.....	35
2.2 DIAGRAMA DE BANDAS DE ENERGÍA PARA LA HETEROUNIÓN N-TiO₂/P-NiO.....	38
2.2.1 Niveles de energía de Fermi	40
2.3 CELDA SOLAR PARA LA HETEROUNIÓN N-TiO₂/P-NiO ILUMINADA DESDE LA PARTE n DE LA UNIÓN. 52	52
2.3.1 Simulación de la heterounión n-TiO ₂ /P-NiO iluminada desde la parte n de la unión.	53
2.3.1a Selección del espesor de la capa ventana y la capa absorbadora de la heterounión.	53
2.3.1b Efecto de la temperatura en el comportamiento de los parámetros de la heterounión.	54
2.3.1c Efecto de la función de trabajo del metal en el comportamiento de los parámetros de la heterounión.	55
2.3.1d Interfaz de la heterounión.....	57
2.4 CELDA SOLAR PARA LA HETEROUNIÓN N-TiO₂/P-NiO ILUMINADA DESDE LA PARTE P DE LA UNIÓN. 59	59
2.4.1 Simulación de la heterounión n-TiO ₂ /P-NiO iluminada desde la parte P de la unión.....	59
2.4.1a Selección del espesor de la capa ventana y la capa absorbadora de la heterounión.	59
2.4.1b Efecto de la temperatura en el comportamiento de los parámetros de la heterounión	60
2.4.1c Efecto de la función de trabajo del metal en el comportamiento de los parámetros de la heterounión.	61
2.4.1d Interfaz de la heterounión.....	61
CAPÍTULO 3.....	63
RESULTADOS.....	63
3.1 Resultados de la simulación de la heterounión n-TiO ₂ /P-NiO iluminada desde la parte n de la unión.	63
3.1a Resultados de la modificación del espesor de la capa ventana y la capa absorbadora y los efectos que se producen en los parámetros que caracterizan a la heterounión.	63
3.1b Resultados de la modificación de la temperatura y sus efectos en los parámetros que caracterizan a la heterounión.....	71
3.1c Resultados de la modificación de la función de trabajo de los contactos trasero y delantero y sus efectos en los parámetros que caracterizan a la heterounión.	73

3.1d Resultados de la variación de la densidad de estados en la interfaz de la heterounión y su impacto en los parámetros que caracterizan a la heterounión.	76
3.2Resultados de la simulación de la heterounión n-TiO₂/P-NiO iluminada desde la parte P de la unión.....	80
3.2a Resultados de la modificación del espesor de la capa ventana y la capa absorbadora y los efectos que se producen en los parámetros que caracterizan a la heterounión.	80
3.2b Resultados de la modificación de la temperatura y sus efectos en los parámetros que caracterizan a la heterounión.....	87
3.2c Resultados de la modificación de la función de trabajo de los contactos trasero y delantero y sus efectos en los parámetros que caracterizan a la heterounión.	89
Conclusiones	94
Referencias	96

INTRODUCCIÓN

La necesidad de hacer uso de recursos renovables para la producción de energía, es vital para el desarrollo de la sociedad. La situación ambiental que se vive actualmente requiere de acciones responsables y conscientes que permitan satisfacer las necesidades de la población sin seguir afectando al planeta; es por esto que la energía solar se presenta como una gran oportunidad de desarrollo, puesto que al ser considerada como inagotable, se puede utilizar de forma ilimitada por medio de dispositivos aptos para ser utilizados en la vida diaria; tal es el caso de las celdas solares.

La tecnología que utiliza a la energía solar como fuente energética ha sido ampliamente estudiada, por lo que hay una gran variedad de celdas solares de diferentes diseños, tipos y materiales, sin embargo, para que la fabricación de una celda solar, sea realmente viable, debe ser diseñada con materiales que sean abundantes en la corteza terrestre, tener un costo de obtención accesible y deben contaminar lo menos posible al medio ambiente.

Las celdas solares de heterounión de óxidos metálicos ofrecen una gran promesa por ser una solución a una energía asequible, respetuosa con el medio ambiente, sostenible y viable, por lo que el uso de estos materiales está atrayendo la atención por su gran potencial de conversión energética. [1]

Los óxidos metálicos utilizados en el presente trabajo cuentan con características muy interesantes, que en conjunto pueden formar una celda solar de heterounión cuya eficiencia sea aceptable en comparación con los dispositivos utilizados actualmente; en consecuencia, es importante analizar distintos factores de interés en el dispositivo que es propuesto, como lo son: las características físicas y químicas de cada uno de los materiales, la estructura de la celda solar y su comportamiento en relación a los materiales utilizados, el método tecnológico para la creación de la celda solar y el análisis de los resultados obtenidos mediante el método de simulación para obtener las características generales que podría presentar la celda para que en estudios posteriores sean comparados con resultados obtenidos por métodos experimentales.

Actualmente, el software de simulación se ha convertido en un recurso muy útil puesto que ayuda a reducir la cantidad de horas de trabajo experimental, así como los recursos dedicados a la realización de dichos experimentos, sin embargo, en relación a la simulación de dispositivos fotovoltaicos, la mayoría de estudios se centran principalmente en celdas solares relacionadas con silicio, por lo que existe la necesidad de explorar formas de modelar y simular celdas solares a base de otros materiales como lo son los óxidos metálicos.

El software Solar Cell Capacitance Simulator (SCAPS por sus siglas en inglés), ha sido implementado con éxito en la investigación de celdas solares, ya que permite proponer materiales, en relación a las propiedades que estos poseen; por lo tanto, para cumplir con los objetivos del presente estudio, SCAPS es una opción viable para simular el dispositivo que se propone, utilizando al Dióxido de Titanio (TiO_2) como capa tipo n y al óxido de Níquel (NiO) como capa tipo p [2][3] como lo muestra la figura 1:

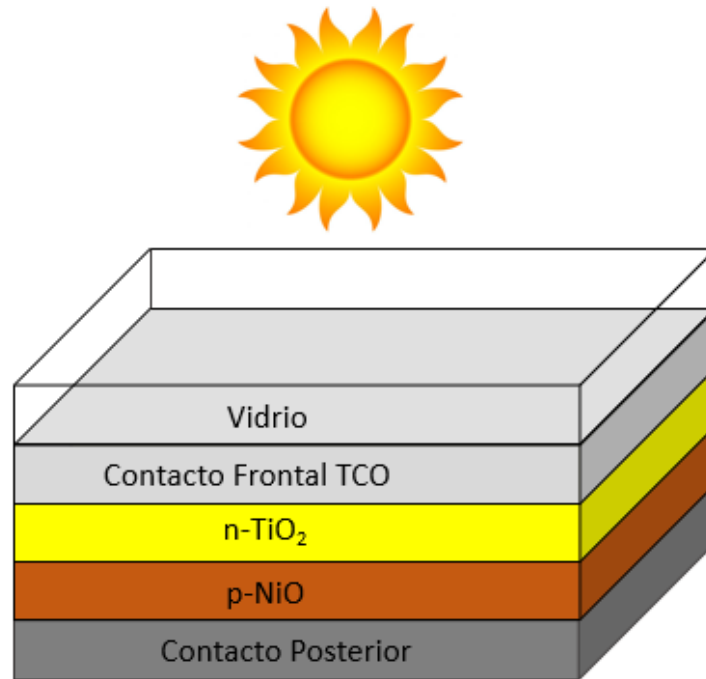


Figura 1. Configuración de la celda solar a simular.

Para realizar la simulación, es necesario buscar los factores ideales para obtener la mejor eficiencia posible en el modelado de la heterounión antes mencionada, con este fin, los factores de interés que se pueden modificar son: el espesor de ambas capas, la concentración de defectos en la interfaz, la variación de la temperatura de trabajo y el material de los contactos transparentes en relación a la función de trabajo que presentan.

Los resultados de la simulación serán muy importantes, ya que se ha planteado que servirán para futuros estudios experimentales, por lo que se busca que, en investigaciones posteriores, sean llevados a la práctica en el Posgrado en Dispositivos Semiconductores.

JUSTIFICACIÓN

Actualmente, es una necesidad buscar alternativas para reemplazar algunos materiales semiconductores en la fabricación de celdas solares, ya sea por su poca abundancia en la naturaleza, el alto costo de producción o por su alta toxicidad al medio ambiente.

El presente proyecto de tesis intenta modelar y simular celdas solares transparentes a base de la heterounión n-TiO₂/p-NiO, utilizando como herramienta de modelado y simulación el software Solar Cell Capacitance Simulator (SCAPS), el cual ya ha sido utilizado anteriormente en la investigación y el estudio de celdas solares. [2][3]

Se estudiará el efecto de los espesores de la capa absorbente (NiO) y de la capa ventana (TiO₂), así como la concentración de defectos de cada capa, las variaciones de la temperatura de trabajo en el rendimiento de la celda solar y se buscarán los contactos transparentes que nos proporcione la mejor eficiencia posible. Los resultados obtenidos, ayudarán a diseñar los experimentos para depositar las diferentes películas delgadas y finalmente, permitirán la fabricación de una celda solar transparente en el Posgrado en Dispositivos Semiconductores con materiales que actualmente se están trabajando y estudiando en los laboratorios de erosión catódica y de depósito de vapores químicos.

OBJETIVO GENERAL

Llevar a cabo el análisis, modelado y la simulación de celdas solares basadas en la heteroestructura n-TiO₂/p-NiO.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- a) Utilizar la herramienta Solar Cell Capacitance Simulator (SCAPS) para simular las celdas solares basadas en la heteroestructura n-TiO₂/p-NiO.
- b) Simular la celda solar variando el espesor de la capa ventana (TiO₂) y la capa absorbedora (NiO) para optimizar su eficiencia.
- c) Simular la celda solar con diferentes contactos frontales y posteriores para encontrar los materiales óptimos de fabricación.
- d) Simular la celda solar bajo diferentes temperaturas de trabajo.
- e) Proporcionar de acuerdo a los resultados obtenidos, la estructura de la celda solar con mejor eficiencia

METODOLOGÍA

La simulación de las celdas solares que se está proponiendo en este trabajo y que se muestran en la figura 1, permitirá estudiar su comportamiento como dispositivo fotovoltaico y nos dará una predicción de la eficiencia en función de la variación de los parámetros propuestos. Para la creación del modelado del dispositivo, se recopilarán valores experimentales de los parámetros físicos de las diferentes capas que constituyen cada celda solar, y se darán de alta en el paquete SCAPS.

En el presente trabajo se utilizará el software de simulación SCAPS, para esto, se determinará un periodo para estudiar y entender el funcionamiento del mismo. Para modelar del dispositivo, primero se proveerá al software con los parámetros físicos de la capa ventana (TiO_2) y la capa absorbadora (NiO), entre los que se encuentran: la movilidad de electrones y huecos, concentración de portadores intrínsecos, afinidad electrónica, ancho de banda prohibida, función de trabajo, etc. A la par, se buscarán los materiales que puedan utilizarse como contacto frontal y posterior. Posteriormente, se variará el grosor de la capa ventana y la capa absorbadora, para estudiar cual es el efecto de este parámetro en la eficiencia de la celda solar [2][3]. Una vez que se haya encontrado la configuración con la mejor eficiencia, se simulará la celda solar bajo diferentes temperaturas de trabajo. Todas las simulaciones se llevarán a cabo usando una radiación solar de 1.5 AM con una densidad de potencia de 1000 W/m^2 como fuente de iluminación [4].

El uso del paquete SCAPS permitirá obtener la curva característica J-V, así como la respuesta espectral, factor de forma, J_{sc} y V_{oc} , y eficiencia del dispositivo simulado en función de los parámetros de entrada.

CAPÍTULO 1

MARCO TEÓRICO

1.1 FÍSICA DE LAS CELDAS SOLARES

Las celdas solares son dispositivos que utilizan a la luz solar como energía incidente para convertirla en electricidad sin necesidad de movimientos mecánicos, utilizando un tipo de material conocido como semiconductor. Las celdas solares más comunes son esencialmente largas áreas de diodos de unión p-n y su funcionamiento puede ser explicado en base a la física de dicha unión [5].

En primer lugar, debe comprenderse que se pueden modificar las características de un semiconductor agregando impurezas al material, a este fenómeno se le conoce como *dopamiento*. En la mayoría de los casos, el material semiconductor utilizado es el silicio. Para obtener un material tipo **n**, se requiere agregar impurezas de tipo donadoras a la red del material semiconductor, la cual está unida mediante *enlaces covalentes*; de esta manera al agregar un elemento con un mayor número de electrones de valencia, se incrementará el número de estos portadores en la banda de conducción a temperatura normal, por el contrario, cuando el semiconductor es dopado con impurezas aceptoras, se obtiene un material tipo **p**, en el cual, habrá un mayor número de espacios disponibles para ser ocupados por un electrón; estos espacios son conocidos como *huecos* [6].

Para formar la unión p-n, se deben unir precisamente estos dos tipos de materiales, en el material tipo **p** habrá un exceso de huecos y una cantidad de electrones, mismos que se pueden comprender como átomos aceptores negativamente cargados y que pueden considerarse iones con carga eléctrica negativa; de forma similar, en el material tipo **n** habrá un exceso de electrones libres y una cantidad de huecos que se pueden comprender como donantes cargados positivamente y que pueden considerarse iones con carga eléctrica positiva; cabe señalar que la carga de ambas regiones en este punto es neutra. Al unir ambos materiales, los iones de cada una de las partes no pueden moverse, sin embargo, los huecos y los electrones libres se mantienen en constante movimiento, este movimiento genera incluso cierta velocidad conocida como *velocidad térmica* que se puede definir como una forma de energía que existe derivada de la vibración de las partículas en la materia. Esta velocidad tanto para electrones como para huecos es de aproximadamente 10^7 cm/seg .

1.1.1 Difusión y arrastre

El movimiento de los portadores da lugar al fenómeno de *difusión*: los portadores se mueven desde la zona de mayor a menor concentración, es decir, los electrones libres se mueven o se difunden desde la región **n** hacia la región **p** y de forma similar lo hacen los huecos. Esta difusión de portadores origina una *corriente de difusión* y, por consiguiente, un *gradiente de concentración de portadores*, respetando que los iones se mantienen fijos en la red cristalina; cuando ambas regiones se unen, se crea un bloque único que conforma a la unión pn, donde, la región **n** tendrá una cantidad menor de electrones que en el estado inicial, dado que algunos de dichos portadores se difundieron hacia la región **p** y tendrá más huecos provenientes de la región **p**; en este punto la región **n** tendrá una carga neta influenciada por los iones que no se difundieron, de modo que, tendrá una carga neta positiva, por el contrario y de manera similar, la región **p** tendrá una carga neta negativa. Debido a esto, la unión pn en conjunto sigue teniendo una carga neta neutral.

La presencia de estas cargas fijas favorece la aparición de un campo eléctrico que va desde la región **n** hacia la región **p**; esto significa que va en contra de la corriente de difusión. Este campo origina una diferencia de potencial que recibe el nombre de *barrera de potencial* (V_{bi}) cuya principal función es detener la difusión de portadores a partir de la creación de una barrera energética que origina la formación de la *región de agotamiento* o *región de carga espacial*, que es la región en donde se concentran los portadores que se mantuvieron fijos y, en consecuencia, no hay movimiento de portadores. La figura 2 ilustra a la unión pn en relación al comportamiento descrito anteriormente:

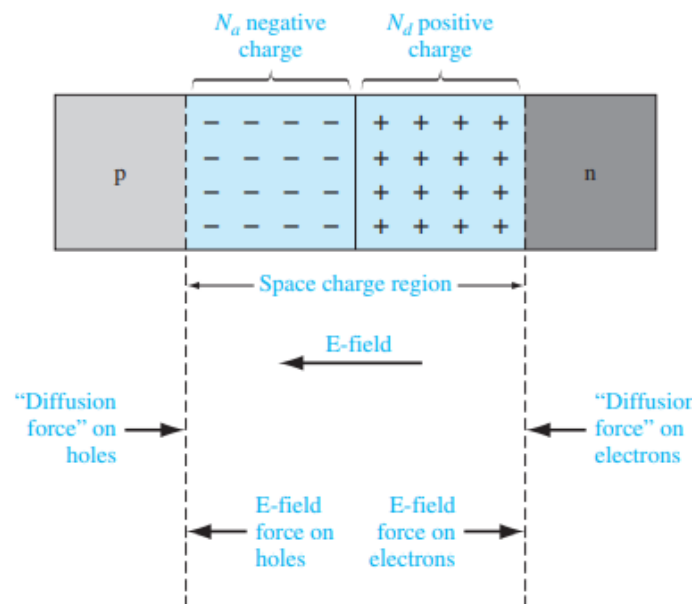


Figura 2. Unión pn destacando la región de carga espacial (Space charge region) con sus correspondientes cargas netas, el campo eléctrico (E field) y las fuerzas de difusión de portadores (Diffusion) [6].

Además de la corriente de difusión, se origina también una corriente de arrastre debido al campo eléctrico, la cual va desde la región **n** a la **p** para los electrones y desde la región **p** a la **n** para los huecos; por lo tanto, en equilibrio térmico, la corriente total es la suma de la corriente de difusión y la corriente de arrastre; la suma de la corriente de ambos portadores debe ser igual a cero.

Otro factor importante que vale la pena mencionar, es la movilidad de los portadores, ya que describe que tan bien se mueven las partículas debido al campo eléctrico, por lo que se relaciona con el arrastre; dentro de las expresiones en los cálculos de la unión pn se toma en cuenta tanto la movilidad de los electrones como la de los huecos. Dado que la movilidad refleja el movimiento de portadores, se comprende que este parámetro está directamente relacionado con la temperatura y la concentración de dopado, pues entre mayor sea el dopamiento, menor capacidad tiene cada uno de los portadores para moverse. Es preciso señalar que la movilidad de los electrones presenta un valor mayor que la movilidad de los huecos.

1.1.2 Operación de una celda solar

Para aprovechar a la unión pn, es necesario buscar que los electrones continúen en movimiento, por lo cual se requiere una fuerza motriz que favorezca el desplazamiento de los portadores; en las celdas solares, esta fuerza puede provenir de la luz solar. Se sabe que la luz está formada por partículas llamadas *fotones*, los cuales son portadores de energía de radiación electromagnética. Los fotones se comportan como una partícula cuando interactúa con la materia y de esta manera son capaces de transferir una cantidad determinada de energía.

En la mayoría de los casos la luz solar incide en la celda desde la región tipo **n** (sin embargo esto depende del nivel energético de la brecha de energía de banda prohibida de los materiales como se analizará más adelante); cuando esto sucede los enlaces covalentes que forman a la región se rompen y aumenta el número de electrones libres, esta misma energía llega a la región de agotamiento, donde se lleva a cabo una *absorción fundamental*, que en relación al diagrama de bandas de energía, se entiende como el fenómeno en el que un electrón estando inicialmente en la banda de valencia, brinca hacia la banda de conducción dejando tras de sí un hueco, es decir, el electrón aumenta su energía y se produce un par electrón-hueco [7]. Esto sucede siempre y cuando el fotón que es inducido tenga una energía mayor que el ancho de la energía de banda prohibida del material que es iluminado. La figura 3 ilustra al diagrama de bandas de energía, representando el fenómeno antes definido donde el electrón gana energía y pasa hacia la banda de conducción superando la brecha de la banda de energía prohibida (E_g); este parámetro es muy importante dentro de las características de los materiales semiconductores.

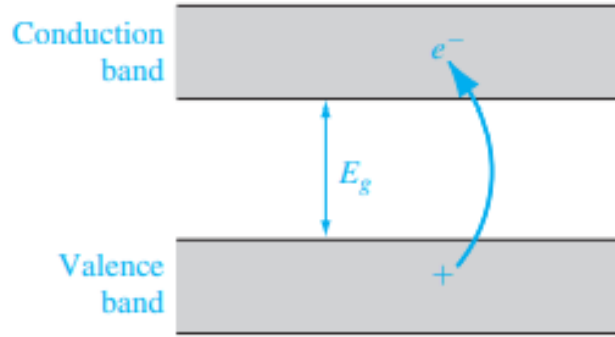


Figura 3. Diagrama de bandas de energía mostrando el comportamiento de un electrón en el fenómeno de absorción [6]

A causa del campo eléctrico que hay en la región de agotamiento, los electrones y los huecos que se produjeron, son impulsados fuera de esta región, hacia la región que les corresponde de acuerdo a su carga, y en consecuencia, la concentración de electrones en la región **n** y de huecos en la región **p**, aumentan y se vuelven tan altas que se desarrolla una diferencia de potencial entre ellas que se refleja en la producción de energía fotoeléctrica que se traduce como energía eléctrica cuando es conectada a un dispositivo externo.

La figura 4 muestra el diagrama de bandas de energía para la unión pn, se observa la presencia de la barrera de potencial, la cual, como se explicó en la sección 1.1.1 (difusión y arrastre), impide el paso de los portadores mayoritarios hacia el lado contrario de la región donde se encuentran. Los fotones al incidir en el sistema influyen en la región de agotamiento (sección entre líneas punteadas) permitiendo la creación de pares electrón-hueco y el movimiento de cada uno de los portadores hacia la región donde sean considerados portadores mayoritarios para desarrollar la diferencia de potencial antes descrita.

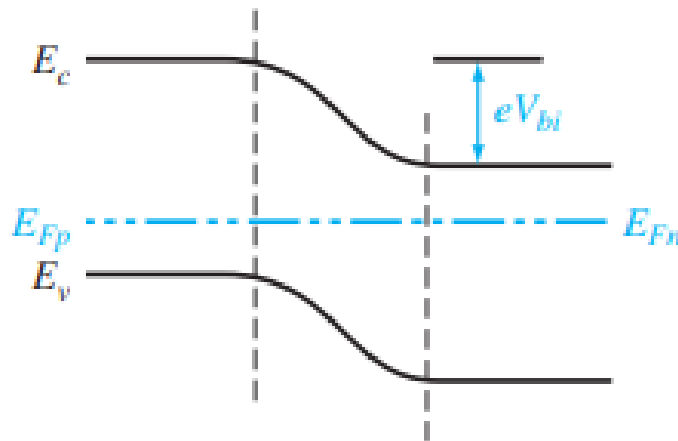


Figura 4. Diagrama de bandas de energía de la unión pn, en la parte superior se observa la banda de conducción (E_c), en la parte inferior la banda de valencia (E_v) y la presencia de la barrera de potencial (V_{bi}) [6].

Dado que la luz solar penetra desde alguna de las regiones de la unión pn, para un mejor aprovechamiento de los electrones, la unión antes descrita, perteneciente a la celda solar se presenta de una forma asimétrica, esto quiere decir que la región correspondiente al material a través del cual la luz penetra es más delgada, con la finalidad de disminuir el área de la región de agotamiento. Si la celda solar es iluminada desde el lado **n**, la asimetría favorecerá la disminución de la región de agotamiento en el lado **n** y aumentará en el lado **p**, de forma similar sucedería si la celda solar se ilumina desde el lado correspondiente al semiconductor tipo **p**. Si además, la región que es iluminada tiene un mayor dopamiento, cuando la luz solar incida en el material, aprovechando la asimetría al tener una región más delgada, habrá un mejor aprovechamiento de los fotones incidentes y cuando la luz solar llegue hasta la región de agotamiento, habrá un mayor número de portadores y una mayor área de movimiento para producir los pares electrón-hueco que ayudarán a producir una mayor corriente en la celda solar, lo cual se refleja en una mejor eficiencia [2][8].

1.1.3 Recombinación

Otro fenómeno importante que se debe tomar en cuenta es la *recombinación*; si bien es cierto que en teoría todos los portadores deberían poder ser aprovechados para producir energía fotoeléctrica, cuando se generan los pares electrón-hueco, algunos portadores regresan a su estado inicial, es decir, regresan hacia la banda de valencia perdiendo así energía, lo cual degrada el funcionamiento del dispositivo. Este fenómeno se puede presentar en distintas formas, por ejemplo: cuando la energía absorbida se cede a la red en forma de calor que se puede identificar mediante el aumento de la temperatura o por la emisión de un fotón. La recombinación depende del tiempo de vida promedio (tiempo que tarda el portador en recombinarse) y de la longitud de difusión de los portadores de carga minoritarios [9]. Los portadores que se recombinan no son aprovechados, es decir, no participan en la generación de corriente ni energía.

En relación al ancho de las regiones **p** y **n** de la celda solar, se puede entender que, al tener una asimetría en las regiones de carga espacial teniendo una más ancha que la otra, se origina un menor parámetro de recombinación, ya que los portadores tardan más tiempo en difundirse hacia la región correspondiente ya que tienen que trasladarse por una longitud mayor, comprendida como longitud de difusión y por lo tanto el tiempo de vida medio (tiempo de vida hasta que se lleva a cabo la recombinación) será mayor. Este comportamiento favorece el aprovechamiento de los portadores y aumenta la eficiencia del dispositivo, de esta forma se comprende también la necesidad de la asimetría de las regiones **n** y **p** en la celda solar.

1.2 CARACTERÍSTICAS DE DESEMPEÑO DE LAS CELDAS SOLARES

Para evaluar el funcionamiento y el diseño de una celda solar, se requiere de la medición de ciertos parámetros que permitan visualizar el rendimiento eléctrico, es por esto que existen parámetros estándar utilizados para este fin. [5][9].

Como se ha mencionado con anterioridad, el funcionamiento de una celda solar puede ser comprendido a través del análisis físico y matemático de un diodo, donde la corriente puede ser calculada mediante la ecuación del diodo no lineal, representada a continuación mediante la ecuación 1.

$$I = I_0 \left(e^{\frac{V_D}{nV_T}} - 1 \right) \quad (1)$$

Donde I representa a la corriente del diodo, I_0 a la corriente de saturación en polarización inversa, V_D es el voltaje que pasa a través del diodo, n al factor de idealidad del diodo (para un diodo ideal es igual a 1) y V_T es el voltaje térmico, el cual a su vez es calculado mediante la ecuación 2.

$$V_T = \frac{kT}{q} \quad (2)$$

Donde k representa a la constante de Boltzmann ($1.381 \times 10^{-23} \frac{J}{K}$) T a la temperatura absoluta de la unión y q a la corriente del electrón ($1.6 \times 10^{-19} C$)

1.2.1 Gráfica I-V de la celda solar

De acuerdo a la información anterior, las características corriente-voltaje (I-V) ayudan a analizar el funcionamiento de un diodo, por lo tanto, también de una celda solar; por esto la gráfica de la corriente-voltaje (I-V) de una celda solar es muy útil para la realización de los cálculos requeridos para conocer las características de una celda solar. Esta curva puede ser obtenida cuando se realiza la superposición de la curva I-V de la celda solar cuando no se suministra luz solar (celda solar en la oscuridad), en relación a la corriente que es generada por la luz cuando se lleva a cabo la iluminación. La corriente que se genera cuando la celda solar se ilumina, es sumada a la corriente normal del diodo (ecuación 1) y debido a esto la ecuación 1 se transforma en la ecuación 3, en donde aparece un factor I_L el cual representa la corriente fotogenerada; si se asume que este es un factor constante a través del dispositivo en realidad se refleja como un factor de pérdida en la ecuación 1, por lo que se obtiene la ecuación 3.

$$I = I_0 \left(e^{\frac{V_D}{nV_T}} - 1 \right) - I_L \quad (3)$$

Al ser un dispositivo fotoeléctrico, la celda solar tiene un circuito electrónico equivalente que permite su comprensión y estudio, en relación a los parámetros que la conforman. La figura 5 ilustra el circuito equivalente de una celda solar, en el cual es posible identificar los elementos que la conforman; cuando se lleva a cabo la absorción fundamental, el campo eléctrico que es introducido mediante las capas de material definidas como semiconductor tipo **n** o tipo **p**; la presencia del campo eléctrico ocasiona que las cargas de los portadores se repelan y fluyan en direcciones contrarias a través de un circuito externo; este comportamiento se puede describir como una fuente de corriente conectada en paralelo con un diodo, donde los elementos como la corriente de saturación I_0 , y la corriente fotogenerada I_{ph} representan parámetros útiles para definir el comportamiento de la celda solar y generar el gráfico I-V de la celda solar, el cual brinda una gran cantidad de información sobre el funcionamiento de la misma como se revisará a continuación.

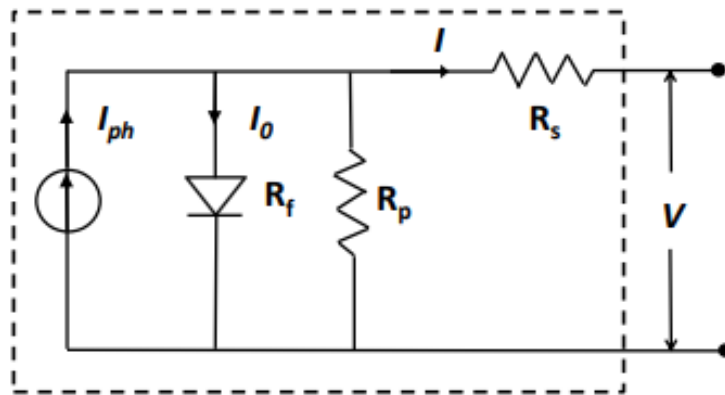


Figura 5. Circuito electrónico equivalente de una celda solar [10]

Normalmente las celdas solares poseen defectos que afectan su desempeño, debido a que originan una disminución en la fotocorriente que se genera, dichos efectos pueden ser representados como un diodo conectado con una resistencia en serie “ R_s ” y una en paralelo “ R_p ” conectadas a una fuente de corriente denominada “fotocorriente”. Estos parámetros también son observables en la figura 6.

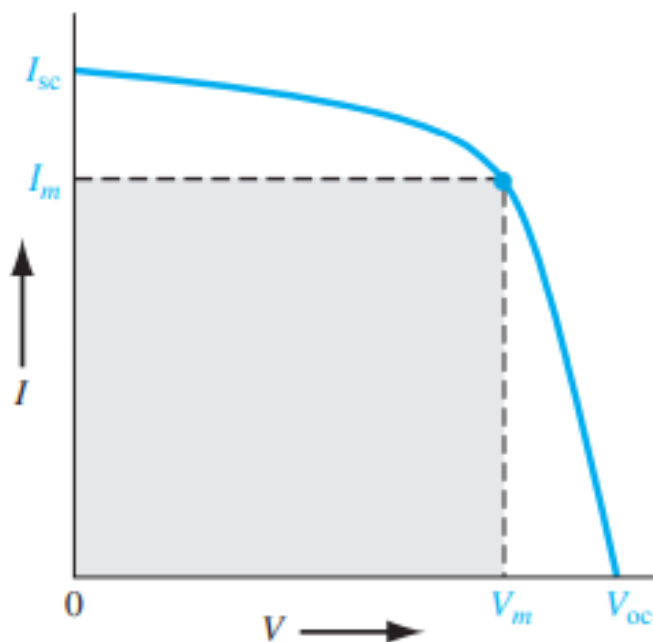


Figura 6. Gráfica I-V de la celda solar

La figura 6 ilustra la gráfica I-V de la celda solar, destacando los parámetros más importantes que la conforman. Se puede observar que en el eje de x se encuentra un rango de voltajes en relación al eje de y que representa un rango de corrientes de la celda solar. Es notable que esta gráfica es realmente útil puesto que los valores de varios de los parámetros mencionados en los puntos anteriores, pueden ser encontrados fácilmente mediante la observación de este recurso. La corriente de corto circuito (I_{SC}) se halla en el punto máximo que toca la curva en el eje “y” de la corriente; de forma similar, el voltaje de circuito abierto (V_{OC}) se halla en el punto que corta el eje “x” del voltaje, también comprendido como el punto donde I_{SC} es igual a cero. Otros parámetros importantes que se pueden encontrar son la corriente máxima (I_m) y el voltaje máximo (V_m) que pueden ser medidos en el punto donde la curva decrece de forma casi constante o donde se puede trazar fácilmente un rectángulo como se observa en la figura 5. Cabe mencionar que es posible comprender al factor de llenado (FF) como una figura de mérito, puesto que gráficamente indica la razón del área llenada en el rectángulo $V_m I_m$ y $V_{OC} I_{SC}$.

Al obtener los cuatro parámetros que se observan en la figura 6, se puede realizar la mayoría de los cálculos de obtención de las características de la celda solar y de esta manera se podrá determinar si su diseño, configuración y funcionamiento es apto para ser utilizado como un dispositivo generador de energía. Dichos parámetros se explican a continuación:

1.2.2 Corriente de corto circuito

La corriente de corto circuito es representada con las siglas I_{SC} (Short-Circuit Current). Se define como la corriente que pasa a través de la celda solar cuando el voltaje entre sus terminales es cero, es decir, cuando estas están cortocircuitadas. Este parámetro es de suma importancia, ya que representa la corriente máxima que puede producir una celda solar y está directamente relacionada con la generación y la recolección de portadores de carga que se generan en el dispositivo, por lo cual, algunos de los factores que la modifican son: el área de la celda solar (densidad de corriente que fluye a través de una superficie que es expuesta a la luz solar), número de fotones incidentes, espectro de la luz incidente, nivel de iluminación y las características de los materiales empleados para el diseño de la celda solar, entre otros.

1.2.3 Voltaje de circuito abierto

El voltaje de circuito abierto es representado con las siglas V_{OC} (Open-Circuit Voltage). Se define como el máximo voltaje que puede producir una celda solar cuando la corriente es igual a cero, es decir, cuando sus terminales están abiertas (no están conectadas a ninguna carga). Para una celda solar los valores de V_{OC} se encuentran entre 0.4 y 0.6 Volts y corresponden a la cantidad de polarización directa de la celda solar originada por la polarización de la unión debido a la corriente que es generada por la luz solar, por lo tanto, los principales factores que modifican a este parámetro son las características interiores de la construcción de la celda. El voltaje de circuito abierto puede ser calculado mediante la ecuación 4:

$$V_{OC} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{I_{ph}}{I_o} + 1 \right) \quad (4)$$

Donde k es la constante de Boltzmann ($8.62 \times 10^{-5} \frac{eV}{K}$), T es el valor de la temperatura, q es la carga del electrón ($1.6 \times 10^{-19} C$), I_o es la corriente de saturación del diodo (originada térmicamente, no depende del voltaje aplicado sino de la temperatura del sistema) y I_{ph} es la corriente fotogenerada.

1.2.4 Potencia máxima

La potencia máxima, en una definición sencilla, es la cantidad máxima de energía que se transfiere desde una fuente a otros elementos o, en otros términos, es el punto óptimo de funcionamiento de la celda. Se obtiene mediante el producto ($V_m * I_m$) del voltaje máximo (V_m) y la corriente máxima (I_m), datos obtenidos

mediante la curva característica corriente-voltaje (I-V) de la celda solar como se observa en la ecuación 5.

$$P_M = V_M * I_M \quad (5)$$

1.2.5 Factor de llenado

El factor de llenado, representado con las siglas FF (Fill Factor), es el parámetro mediante el cual se determina la máxima potencia de la celda solar, relacionando a la potencia máxima calculada y el producto de la corriente de corto circuito y el voltaje de circuito abierto que son los parámetros máximos que se pueden obtener en la celda solar, la fórmula para su obtención es representada mediante la ecuación 6.

Como se observa en la figura 5, los valores del voltaje y corriente máximo, así como el voltaje de circuito abierto y la corriente de corto circuito, crean la figura de un rectángulo. Esta figura representa al factor de llenado, puesto que refleja precisamente la relación que existe entre los parámetros máximos y los parámetros reales del dispositivo, precisando que tan cercanos se encuentran al modelo ideal; es por esto que el FF se representa como un valor porcentual.

$$FF = \frac{P_M}{V_{OC} * I_{SC}} = \frac{V_M * I_M}{V_{OC} * I_{SC}} \quad (6)$$

1.2.6 Eficiencia

La eficiencia de una celda solar, también conocida como rendimiento, es representada mediante el símbolo η y representa la relación entre la potencia que se puede obtener de la celda y la potencia que entra al sistema por medio de la luz incidente, es una forma de medir el aprovechamiento de los recursos que inciden en relación con los que son obtenidos. La fórmula para su obtención es representada mediante la ecuación 7.

$$\eta = \frac{I_M * V_M}{P_{Light}} = \frac{FF * I_{SC} * V_{OC}}{P_{Light}} \quad (7)$$

Donde P_{Light} se refiere a la potencia de luz incidente.

1.3 CELDAS SOLARES DE HOMOUNIÓN Y HETEROUNIÓN

Dentro de los tipos de celdas solares existentes se encuentran las celdas solares de homounión y heterounión, las cuales toman su nombre a partir de las características que poseen en relación a los materiales que las componen. [1][7][9][11].

1.3.1 Celdas solares de homounión

Actualmente las celdas solares existentes que son más comunes, son las de homounión, utilizando al silicio como principal material. Se comprende que una celda solar de homounión es aquella que está formada por el mismo material en ambos lados de la unión, difiriendo únicamente en el tipo de dopado o la concentración del mismo. En esta configuración, el dispositivo mantiene una energía de banda prohibida (E_g) constante a través de la unión, sin embargo, no tiene una estabilidad ni una eficiencia altas.

El diagrama de bandas de una celda solar de homounión puede ser representado como el diagrama de bandas de energía de la unión pn, debido a que, al tener al mismo material en ambas partes de la unión, la banda de energía prohibida puede representarse con el mismo valor en ambos lados de la unión como se observa en la figura 4.

1.3.2 Celdas solares de heterounión

Las celdas solares de heterounión (en las cuales está basado el presente trabajo), son dispositivos formados por semiconductores, pero diferentes semiconductores en cada lado de la unión. En vista de que se trata de diferentes materiales, cada uno tendrá características particulares diferentes; uno de los parámetros a resaltar es el valor de la banda de energía prohibida para cada uno de los materiales y es por esta diferencia, que las bandas energéticas tendrán una discontinuidad en la interface de la unión. Esta discontinuidad puede ser observada en el diagrama de bandas de energía para una heterounión, representada en la figura 7.

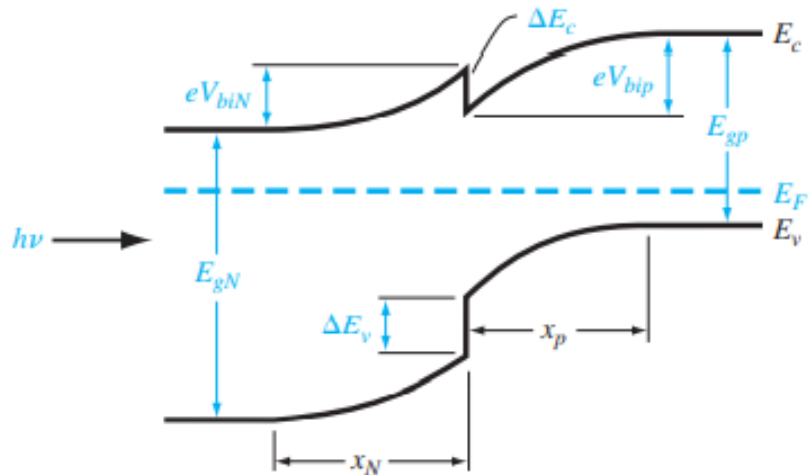


Figura 7. Diagrama de bandas de energía de una heterounión pn en equilibrio térmico [7].

En la figura 7 se puede observar que los fotones (representados mediante la relación $h\nu$, la cual representa la energía del fotón), inciden en el material cuyo valor de la banda de energía prohibida es mayor, de modo que otra de las características que debe tener la celda solar a diseñar, es tener un material a través del cual incide la luz solar, cuyo valor de banda de energía prohibida sea mayor que el valor de la banda de energía prohibida del material que completa la unión. Los fotones que tengan una energía menor que la de la banda de energía prohibida donde incide la luz, pasarán a través del material con la banda de energía prohibida más amplia sin ser absorbidos, siempre y cuando tengan la energía suficiente para excitar al semiconductor de la banda de energía prohibida más estrecha y es en este material en donde serán absorbidos. Los fotones que tengan una energía mayor que la de la banda de energía prohibida del material donde incide la luz, se absorberán en el material que tiene la banda de energía prohibida más amplia.

A causa de estos dos mecanismos, la absorción se puede producir a partir de dos frecuencias diferentes, por lo que es evidente que aumentará el número de fotones absorbidos y la energía de estas partículas será mejor aprovechada al evitar las pérdidas que se deben al exceso de energía de los fotones.

Cuando se forma la heterounión, además de la energía de la banda prohibida de cada uno de los materiales, existen otros dos parámetros de interés que deben ser comprendidos: la función de trabajo (que se puede definir como la energía mínima requerida para inducir fotoemisión de electrones de la superficie de un metal) y la afinidad electrónica (definida como la energía requerida para remover un electrón localizado en el borde de la banda de conducción).

Durante la formación de la unión, se construye un potencial electrostático a través del dispositivo que es igual a la diferencia entre las funciones de trabajo, además, también hay una discontinuidad en el borde de la banda de conducción de la unión, que es igual a la diferencia entre las afinidades electrónicas; esta misma discontinuidad se presenta en el borde de la banda de valencia y como se mencionó anteriormente, también en la banda de energía prohibida (Figura 7).

En la sección 1.1.2 (Operación de una celda solar) se explicó la necesidad de diseñar una celda solar en donde la región **n** y **p** sean asimétricas con la finalidad de aprovechar, de una mejor forma a los portadores presentes en el dispositivo; en la heterounión, la región **n** actúa como un bloque para los huecos y la región **p** como un bloque para los electrones. Un pico en la banda de conducción de la región **n** también actúa como un bloque para los electrones que fluyen desde la región **p** hacia la región **n**. Este pico dificulta que la región tipo **p** contribuya a la fotocorriente; esto puede ser evitado mediante una combinación apropiada de afinidades electrónicas y niveles de dopamiento.

En la heterounión, al tener diferentes materiales, existe una diferencia en las estructuras cristalinas de los materiales semiconductores involucrados, esto puede originar un desajuste espacial en la red que a su vez crea defectos en la misma. La densidad de defectos estará directamente relacionada con el grado de desajuste que hay en la red. Los defectos en la red cristalina dan lugar a niveles de energía permitidos dentro de la banda de energía prohibida, esto a su vez permite que haya niveles de energía dentro de la región de agotamiento que actúan como centros de recombinación.

Para producir heterouniones con propiedades que sean lo más cercanas posible a la idealidad, se requiere que los materiales semiconductores utilizados tengan estructuras de red prácticamente idénticas.

1.4 CARACTERÍSTICAS DE LOS MATERIALES

Como se analizó en la sección 1.3.2 (Celdas solares de heterounión), es muy importante conocer las características de los materiales que serán utilizados para producir una celda solar de heterounión. En el presente trabajo se emplearán dos materiales semiconductores diferentes que pertenecen a un tipo de material que es denominado como TCO (Transparent Conductive Oxides) de modo que, se cumple la principal característica de la celda solar de heterounión, por lo que es muy importante analizar las propiedades de ambos materiales para determinar si el diseño del dispositivo es viable en relación a las características físicas y químicas de los mismos.

El objetivo de este trabajo es la realización de una celda solar diseñada mediante la heterounión de Dióxido de Titanio tipo **n** (n-TiO₂) y Óxido de Niquel tipo **p** (p-NiO), por lo cual se procede a analizar el término de material TCO y posteriormente a los materiales que serán utilizados.

1.4.1 TCO (Transparent Conductive Oxide)

Los Óxidos Conductores Transparentes (TCO por sus siglas en inglés), son materiales óxidos semiconductores con una amplia banda de energía prohibida (normalmente >3.1 eV). Su nombre proviene de la capacidad que poseen como conductores eléctricos con una baja absorción de ondas electromagnéticas en la región visible del espectro [12][13].

Se requiere que estos materiales sean utilizados con tecnología de capa delgada, debido a que en muchas aplicaciones actuales se busca aprovechar sus capacidades de alta conductividad y buena transparencia en un amplio rango espectral, por lo que son utilizados en dispositivos optoelectrónicos tales como celdas solares, pantallas y circuitería [14].

En los materiales semiconductores, la conducción depende precisamente de la longitud de onda que es introducida al dispositivo, mientras que la conducción eléctrica es dependiente del dopado del material; en el caso de los materiales TCO son estados intermedios flexibles en ambas características [13].

Algunas ventajas del uso de estos materiales, radican en las modificaciones que se le pueden realizar bajo distintas condiciones para obtener comportamientos y características diferentes incluso en un mismo material; la conductividad puede ajustarse para que el material se comporte como aislante o como semiconductor, la transparencia también puede modificarse en relación al espesor de la capa de material que se utilice y como en todos los semiconductores, existen tipo n y tipo p en relación al dopado que se utilice [13][14].

Los materiales TCOs están compuestos por una parte no metálica y una parte metálica, la parte no metálica consiste en oxígeno (B) que en combinación con diferentes metales o combinaciones metálicas (A) forman el semiconductor A_yB_z el cual, de acuerdo a sus componentes, tendrá características y propiedades eléctricas singulares; estas mismas propiedades pueden ser alteradas mediante el dopamiento con otros metales, metaloides o no metales (D), formando así un compuesto A_yB_zD ; cabe mencionar que el componente dopante (D) puede formar parte del semiconductor o simplemente ser un agente dopante[12].

1.4.2 Dióxido de Titanio (TiO_2)

El Dióxido de Titanio también conocido como Bióxido de Titanio cuya fórmula química es TiO_2 (de acuerdo al compuesto TCO A_yB_z) es un compuesto inorgánico considerado un óxido metálico de transición (diferentes estados de oxidación) y anfótero (puede reaccionar ya sea como ácido o base). Tiene una estructura formada por un átomo de Titanio y dos átomos de Oxígeno, configuración a partir de la cual toma nombre. Este compuesto se crea de manera natural en varios tipos de rocas ígneas cuando el Titanio reacciona con el Oxígeno presente en el aire [15].

Se considera que el TiO_2 es químicamente inerte, lo cual significa que no reacciona con otras sustancias químicas, característica que lo convierte en una sustancia estable que es utilizada en una gran variedad de aplicaciones que abarcan productos como la pintura, plásticos, papel, fármacos, protectores solares y alimentos entre otros. Otras propiedades del TiO_2 que vale la pena mencionar son la no toxicidad, biocompatibilidad, sensibilidad a la luz (absorbe radiación electromagnética principalmente en la región UV). En partículas ultrafinas (nanomateriales) presenta transparencia y sus propiedades de absorción se vuelven más eficientes. Los monocristales transparentes o láminas delgadas tienen un alto índice de refracción lo que hace que el TiO_2 sea adecuado para aplicaciones ópticas.

Puesto que tiene un ancho de banda de energía prohibida de aproximadamente 3.2 eV, el TiO_2 es considerado prácticamente un aislante, sin embargo, dado que su estructura presenta una deficiencia de oxígenos, se originan estados localizados cerca de la banda de conducción, lo cual le otorga características de semiconductor, además, la deficiencia de oxígenos introduce un exceso de electrones en el material que resultan en el aumento de la conductividad eléctrica. Las vacancias de oxígeno son los principales defectos del material; estas vacancias actúan como donadores de electrones, convirtiendo al TiO_2 en un material semiconductor con un exceso de electrones, es decir, en un semiconductor tipo n [16]. El TiO_2 es un material que presenta polimorfismo lo que significa que se presenta en diferentes formas cristalinas; en este caso el número de formas o fases que presenta son tres: anatasa, rutilo y brookita [17]. La figura 8 ilustra las fases del TiO_2 .

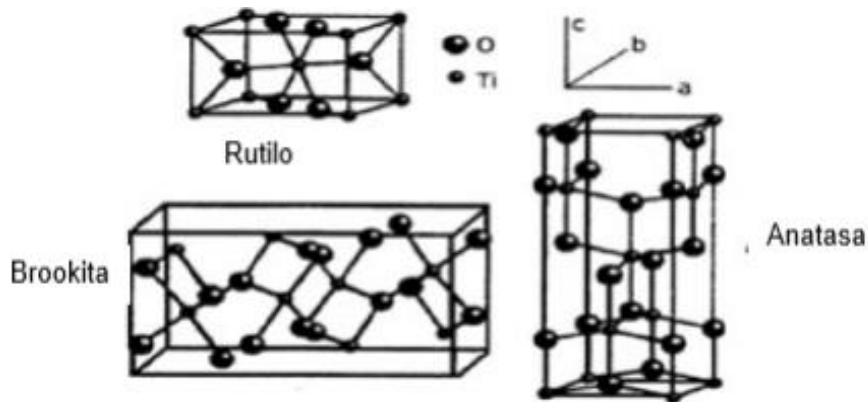


Figura 8. Estructuras cristalinas que presenta el TiO_2 . Las esferas de mayor tamaño representan a los átomos de Oxígeno y las pequeñas a los átomos de Titanio [18].

La fase rutilo del TiO_2 presenta una estructura tetragonal simple, la anatasa una estructura tetragonal centrada en el cuerpo y la brookita una estructura ortorrómbica. El TiO_2 presenta las características de semiconductor en las fases anatasa y rutilo, las cuales son utilizadas en una gran variedad de aplicaciones tecnológicas; las fases antes mencionadas son también las más frecuentes y las más estables debido a que muchos compuestos cristalizan presentando estructuras tetragonales. El valor de la banda de energía prohibida en ambos materiales si presenta una diferencia, aunque es mínima: para el rutilo $E_g = 3.03 \text{ eV}$ y para la anatasa $E_g = 3.2 \text{ eV}$. Ambas energías corresponden a longitudes de onda en la región ultravioleta y son sensibles a factores asociados con el tamaño del cristal o la presencia de defectos e impurezas en el material.

Para el presente estudio, el TiO_2 que se utilizará será el que presenta la fase anatasa, ya que es ampliamente utilizado como fotocatalizador, esto se refiere a que es posible acelerar la reacción que se produce cuando el material absorbe la luz. En el dispositivo que se busca diseñar, esta propiedad puede favorecer el aprovechamiento fotónico e incrementar la eficiencia.

La síntesis de las nanopartículas de TiO_2 , comprendido como la obtención de los polvos de dióxido de titanio, se pueden realizar utilizando distintos métodos tales como la síntesis química en fase vapor, hidrotérmal, precipitación controlada, sol-gel y precursor polimérico (método Pechini). Los métodos sol-gel y Pechini presentan ventajas en relación a los otros métodos mencionados ya que permiten tener un mejor control sobre el tamaño de la partícula y su pureza química [19][20].

El mecanismo de formación de las nanopartículas se puede resumir de manera general en tres pasos:

1. La solución precursora: se presenta una solución estable con características dependientes del método que se utilizará para la síntesis.

2. La nucleación: su importancia recae en que es el punto en donde se forma un gran número de partículas.
3. Estado de crecimiento: de igual manera, el crecimiento de las nanopartículas dependerá del método utilizado para sintetizar el material, requiriendo siempre que la maduración se produzca de una forma adecuada para obtener el tamaño, la morfología y las propiedades requeridas en la nanopartícula.

1.4.2a Variación de la banda de energía prohibida

Como se mencionó en la sección 1.4.1, los materiales TCOs tienen características y propiedades ópticas singulares, las cuales se pueden alterar al agregar otros elementos a un compuesto; tal es el caso de Dióxido de Titanio (TiO_2) puesto que a pesar de tener una amplia utilidad en aplicaciones ópticas por sus propiedades fotocatalizadoras, principalmente en la fase anatasa por exhibir mayor actividad fotovoltaica, tiene un ancho de banda de energía prohibida muy alto (3.2 eV), correspondiente a una absorción de radiación en la región UV del espectro: esto impacta en el aprovechamiento fotónico debido a que la radiación que este compuesto absorbe, desaprovecha la radiación en la región visible, perdiendo una gran cantidad de energía; es por esto que se busca mejorar la fotorespuesta agregando elementos que ayuden a disminuir el nivel de la banda de energía prohibida.

Actualmente existen estudios que avalan que al añadir nitrógeno (N) al TiO_2 en diferentes concentraciones modifica el posicionamiento de la banda de valencia, esto se refleja en que, al agregar un compuesto de alta concentración, la banda de valencia crece, disminuyendo el bandgap, mientras que, a una baja concentración, no se altera significativamente el máximo de la banda de valencia. Otra forma de realizar esta modificación se lleva a cabo con Flúor (F) e incluso se pueden utilizar ambos elementos en conjunto para reducir el bandgap de una forma efectiva y brindar un coeficiente de absorción alto en la región visible.

Al añadir alguno de estos elementos al compuesto, el coeficiente de absorción del TiO_2 que originalmente se encuentra aproximadamente en 365 nm, aumenta hasta cerca de los 500 nm, permitiendo tener una mayor absorción en el nivel del espectro UV-visible. [21]

La tabla 1 muestra el bandgap para los diferentes sistemas de TiO_2 , agregando los compuestos antes mencionados en diferentes concentraciones.

Tabla 1. Modificación del Bandgap de TiO₂, al agregar diferentes concentraciones de Flúor y Nitrógeno.

Sistema	Band gap (eV)
Anatasa puro	2.18
2.08 % F	2.13
6.25 % F	2.15
10.4 % F	2.05
2.08 % N	1.91
6.25 % N	2.04
10.4 % N	1.82
6.25 % N y F d ₀	2.36
10.4 % N y F d ₁	1.96
6.25 % N y F d ₂	2.13

Otros resultados reportados en diferentes artículos, refieren un bandgap de 3.2, 2.6, 2.3 y 2.2 eV [21].

De acuerdo a los estudios, el dopado con Flúor (F) resulta en un semiconductor tipo **n** debido a que el nivel de Fermi pasa de la parte superior de la banda de valencia a la parte inferior de la banda de conducción, mientras que el dopado con Nitrógeno (N) resulta en un semiconductor tipo **p** debido a que el nivel de Fermi está cerca de la banda de valencia. Al utilizar al TiO₂ como la parte de material tipo **n**, se puede asumir que al TiO₂ utilizado en el presente trabajo, se le agrega Flúor para reducir su bandgap hasta en 17% lo cual facilita la absorción en el espectro visible [22].

Según los resultados obtenidos, al TiO₂ en su fase anatasa, cuando le es agregado Nitrógeno (N) o Flúor (F), se logra aumentar la eficiencia de las celdas fotovoltaicas debido a que se ha comprobado que la reducción del bandgap mejora significativamente la absorción de la radiación en el material [22].

Debido a lo mencionado con anterioridad, los parámetros de TiO₂ que serán utilizados en la simulación, corresponden a las propiedades citadas en artículos donde se emplea el mismo compuesto [2] [23]. En la tabla 2 se muestran los valores para TiO₂ necesarios para la simulación en SCAPS.

Tabla 2. Propiedades de TiO₂ empleados para la simulación en SCAPS [2].

Propiedades del material	n-TiO ₂
Banda de energía prohibida	2.26
Afinidad electrónica	4.20
Permitividad dieléctrica relativa	10.0
CB Densidad efectiva de estados (1/cm ³)	2x10 ¹⁷
VB Densidad efectiva de estados (1/cm ³)	6x10 ¹⁷
Movilidad del electrón (cm ² /Vs)	100
Movilidad del hueco (cm ² /Vs)	25
Densidad de impurezas donadoras (1/cm ³)	1x10 ¹⁷
Densidad de impurezas aceptoras (1/cm ³)	0

1.4.3 Óxido de Niquel (NiO)

El Óxido de Niquel es un óxido metálico considerado transparente en la región de luz visible, compuesto por un átomo de oxígeno y un átomo de níquel. La forma mineral del NiO es la bursenita, mineral poco común en la naturaleza [24].

El Óxido de Niquel presenta una estructura cúbica centrada en las caras, donde un átomo de Niquel se une a seis átomos de Oxígeno que forman una mezcla de octaedros que comparten esquinas y bordes; este tipo de estructura es prototípica de una roca salina. La figura 9 muestra la estructura de estado sólido del NiO.

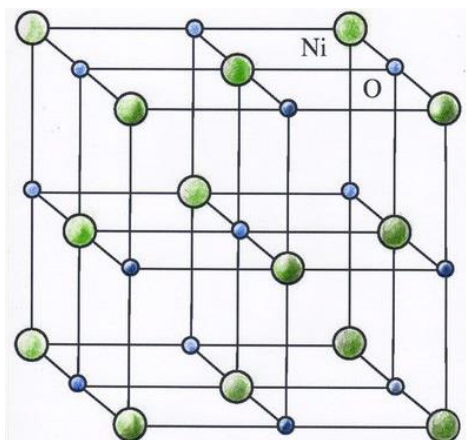


Figura 9. Estructura cristalina del NiO

A consecuencia de los defectos que el Óxido de Níquel presenta en su estructura (los cuales dependen directamente del tamaño de la partícula), el material genera un comportamiento como semiconductor tipo **p** con una banda de energía prohibida de 3.8 eV.

Debido a su excelente estabilidad química, el NiO cuenta con un amplio rango de aplicaciones tales como material de baterías, polvo metalúrgico, colorante en esmaltes y barnices, fabricación de vidrio y fabricación de aleaciones de acero entre otras [25].

Las nanoestructuras de NiO pueden ser preparadas mediante distintos métodos, algunos de los más comunes se basan por ejemplo en el calentamiento del polvo de níquel a altas temperaturas (400°C aproximadamente), ya que, cuando este reacciona con el oxígeno, produce NiO; de igual manera, se puede obtener al calentar una mezcla de polvo de níquel y agua a 1000°C; otras formas de preparación que se pueden emplear son spray pirolisis, sol-gel y sputtering por mencionar algunas [26].

Los parámetros de NiO que serán utilizados en la simulación son mostrados en la tabla 3.

Tabla 3. Propiedades de NiO empleados para la simulación en SCAPS [27]

Propiedades del material	p-NiO
Banda de energía prohibida	3.8
Afinidad electrónica	1.46
Permitividad dieléctrica relativa	10.0
CB Densidad efectiva de estados (1/cm³)	2.8x10 ¹⁹
VB Densidad efectiva de estados (1/cm³)	1x10 ¹⁹
Movilidad del electrón (cm²/Vs)	12
Movilidad del hueco (cm²/Vs)	2.8
Densidad de impurezas donadoras (1/cm³)	0
Densidad de impurezas aceptoras (1/cm³)	1x10 ¹⁹

1.5 ESTRUCTURA DE LA CELDA SOLAR

La estructura de una celda solar se basa en una serie de capas que en conjunto forman al dispositivo y le permiten obtener las características adecuadas para la producción de fotoenergía [15].

En las celdas solares, la luz es introducida al dispositivo a través de una capa transparente o casi transparente denominada capa ventana; en la mayoría de las ocasiones, la capa ventana se forma mediante el material tipo **n**, y la absorción fundamental se lleva a cabo en la capa del material tipo **p**, denominada capa absorbadora; sin embargo, debido a que en el presente trabajo se utilizan dos materiales conductivos transparentes, se plantea la posibilidad de utilizar cada uno como capa ventana y observar los resultados obtenidos en la simulación de ambas posibilidades, es decir, en primer lugar se utiliza la iluminación a través de la capa tipo **n** donde el TiO_2 actuará como capa ventana (figura 10) y el NiO como capa absorbadora. Por el contrario, se plantea en segundo lugar la posibilidad de iluminar a la celda solar a partir del material tipo **p** donde el NiO actuará como capa ventana (figura 11) y el TiO_2 como capa absorbadora; por lo tanto, las figuras 10 y 11 ilustran las posibles celdas solares que se simulan para la heterounión $n\text{-TiO}_2/p\text{-NiO}$. El funcionamiento de las capas, así como la disposición de las mismas, se explican en las secciones siguientes.

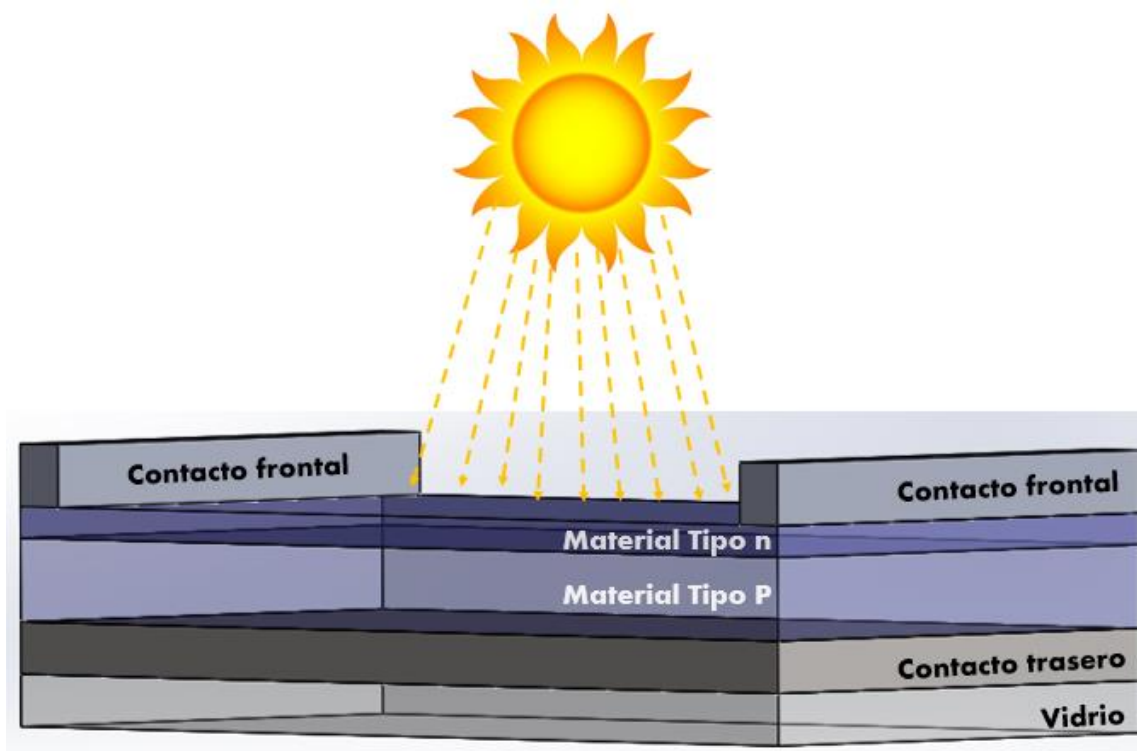


Figura 10. Estructura de la heterounión $n\text{-TiO}_2/p\text{-NiO}$ iluminada desde la región **n** de la unión.

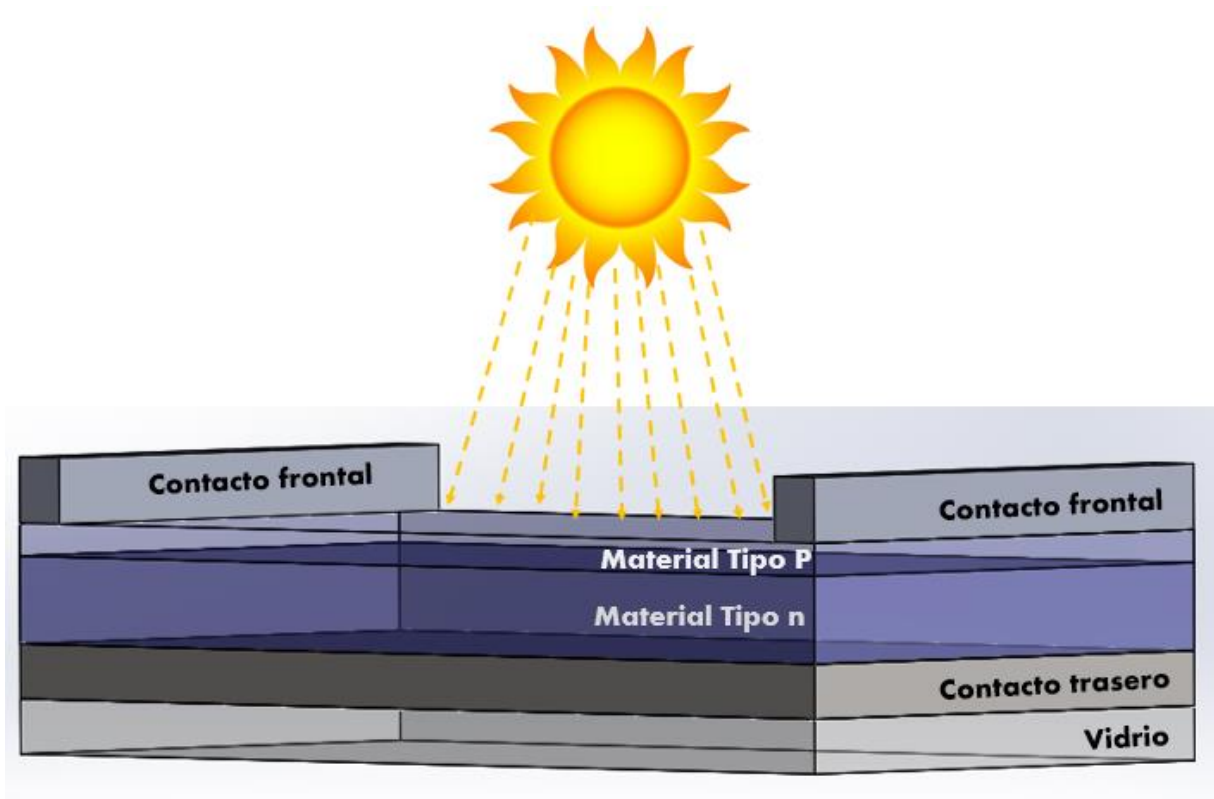


Figura 11. Estructura de la heterounión n-TiO₂/p-NiO iluminada desde la región p de la unión.

1.5.1 Análisis de las propiedades de los materiales

De acuerdo a las propiedades de los materiales analizadas en la sección 1.4 en relación a las características del material, tomando en cuenta la física del dispositivo, y las propiedades utilizadas para la simulación mostradas en las tablas 2 y 3, la luz debe incidir a través del material cuyo valor de la banda de energía prohibida sea mayor; en este caso, debido a que el Óxido de Niquel (NiO) tiene un bandgap energético de 3.8 eV que resulta mayor que el Óxido de Titanio (TiO₂) cuyo valor es de 2.26 eV. Debido a esto, es factible que la luz incida a partir del material tipo **p** (NiO) como se observa en la figura 11.

Debido a que la mayoría de las celdas solares es iluminada a partir del material tipo **n**, y, a que se han encontrado artículos que impulsan la iluminación de celdas diseñadas a partir de los mismos compuestos desde el lado **n** de la unión [28][29][30] como se observa en la figura 10, uno de los principales análisis de la simulación realizada se centra en los beneficios o las desventajas que presenta la iluminación desde el lado contrario de la unión, ya que algunos parámetros relacionados principalmente con el diseño de la celda solar deben cambiarse a fin de obtener un dispositivo físicamente funcional.

De ser comprobable que la iluminación desde la parte **p** de la unión, es posible, funcional y mejora la eficiencia de la celda solar, es necesario analizar los factores que permiten este funcionamiento, así como realizar los cálculos pertinentes para su total comprensión.

1.5.2 Depósito de la celda solar

La iluminación de la celda solar, es independiente a la forma de depósito de las capas de la misma, sin embargo, cada capa tiene una función específica en el dispositivo que si se verá afectada en relación a la forma de iluminación de la celda solar.

Si se comprende que, en relación a las propiedades físicas de los materiales, la celda debe ser iluminada preferentemente desde el lado **p** de la unión, a continuación, se describe la forma de depósito de las capas de una celda solar específicamente para esta modalidad de iluminación. La figura 12 ilustra el orden de depósito de las capas para una celda solar de heterounión n-TiO₂/p-NiO.

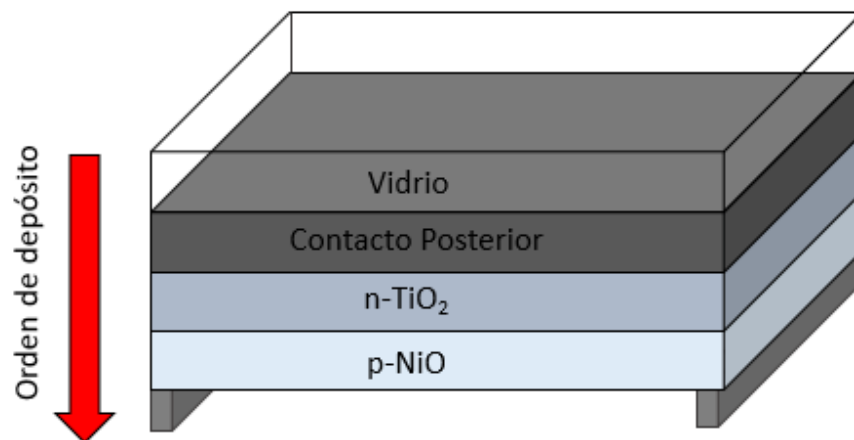


Figura 12. Orden de depósito de la heterounión n-TiO₂/p-NiO iluminada desde la región p de la unión.

Si se analiza la estructura desde la iluminación de la parte P de la unión, la primera capa se forma mediante un sustrato, el cual es un componente inactivo dentro de la estructura ya que está químicamente inactivo al depositar las siguientes capas del dispositivo. En ciertos casos, después del sustrato, se deposita un óxido conductor transparente (TCO), no obstante, al observar la figura 10 del dispositivo, esta capa no se tomará en cuenta para el presente estudio, por lo tanto, después del sustrato se encuentra la capa relacionada con el material tipo **n**.

La segunda capa que se deposita, es la capa denominada capa absorbedora, la cual está hecha mediante el material tipo **n**; en esta capa, los fotones provenientes de la radiación solar son absorbidos y se convierten en energía electromagnética para la generación de pares electrón-hueco. El coeficiente de absorción del material empleado en esta capa debe ser alto para absorber la mayor parte de la radiación solar dentro de la película; para la simulación a realizar, la capa absorbedora estará hecha de Dióxido de Titanio (TiO_2).

Posteriormente se deposita la capa identificada como capa ventana puesto que realiza el papel de emisor de la unión pn, lo que significa que es el medio a través del cual incide la radiación solar; en esta capa se debe cuidar que exista la menor cantidad de absorción posible con la finalidad de que la energía fotónica alcance la zona de la unión; en este caso, la capa ventana estará hecha de Óxido de Níquel (NiO).

Una forma experimental del crecimiento de la estructura n- TiO_2 /p- NiO , es explicada a continuación [31]: en primer lugar, se requiere encontrar un sustrato para la realización de la síntesis; un material que se puede utilizar para este fin es un FTO (Fluorine doped Tin Oxide), que es básicamente un vidrio conductor sobre el cual crecerá la capa ventana y la capa absorbedora. El sustrato de FTO debe ser limpiado adecuadamente; posteriormente se mezcla 1 ml de TTIP (Titanio Isopropóxido), 20 ml de ácido clorhídrico al 37% y 40 ml de agua desionizada, manteniendo la mezcla con agitación constante durante 30 minutos. La solución se transfiere a un recipiente de teflón de 125 ml de capacidad y se sella en autoclave, manteniéndola en un horno precalentado a 110°C durante 12 horas. Acto seguido, el sustrato de FTO donde se han desarrollado nanoestructuras de TiO_2 se lava con agua desionizada y se seca a temperatura ambiente.

Por método hidrotermal usando una concentración equimolar de cloruro de níquel hexahidrato (0,1 M) y hexametilentetramina, se cultivan nanoestructuras de NiO en las nanoestructuras de TiO_2 ; la solución de crecimiento se deja a 95°C durante 4-6 horas en un horno eléctrico precalentado.

Una vez completado el tiempo de crecimiento, las heteroestructuras se lavan con agua desionizada y se secan con flujo de nitrógeno gaseoso a temperatura ambiente. Por último, se realiza un recocido a las heteroestructuras a 450°C para la conversión completa de las nanoestructuras de $\text{Ni}(\text{OH})_2$ en una fase cristalina de NiO .

1.6 CARACTERÍSTICAS DE LA CELDA SOLAR A SIMULAR

Analizando la física de las celdas solares en relación a la estructura que tendrá el dispositivo a simular, se plantean las siguientes características que debe tener la celda solar, contemplando los parámetros más convenientes del funcionamiento de la misma, con la finalidad de alcanzar un nivel de eficiencia aceptable.

1.6.1 Celda solar iluminada desde la región **n** de la unión

A pesar de que se ha planteado la idea de que, en base a las características de los materiales utilizados en la heterounión, la iluminación adecuada del dispositivo se lleva a cabo desde la región **p** de la unión, la primera simulación tiene como objetivo desmentir la necesidad específica de iluminar la celda desde el lado **n** de la unión [28][29], de manera que, en primer lugar, se diseña un dispositivo con los mismos compuestos, iluminándose desde la región **n** de la unión que cumpla con las características físicas adecuadas para realizar la simulación, tal como el diseño observado en la figura 9. [29]:

En primer lugar, la funcionalidad de las capas, al estar estrechamente relacionada con la iluminación de la celda solar, cambia de acuerdo a la descripción realizada en la sección 1.5.2, por lo tanto, la capa ventana a través de la cual incide la luz, será ahora la que está formada mediante el material tipo $n\text{-TiO}_2$ y la capa absorbidora, donde se lleva a cabo precisamente la absorción fotónica, está formada por el material tipo $p\text{-NiO}$. Es evidente que, de acuerdo al orden de iluminación, los contactos también cambian en el dispositivo, ya que el contacto que está relacionado con la capa ventana funge como contacto frontal, mientras que aquel que se relaciona con la capa absorbidora funciona como contacto posterior (figura 9).

De acuerdo a la sección 1.1, si la luz incide a través de la región del material tipo **n**, es necesario que el espesor de esta capa sea menor que el espesor de la región **p**. Al tener una capa **n** más delgada, esta misma debe tener un mayor dopamiento que el lado **p** para lograr que la región de agotamiento se forme prácticamente solo en la región del material tipo **p** y favorecer el aprovechamiento de los portadores.

Durante la realización de las simulaciones, se deben buscar los parámetros adecuados para encontrar la mayor eficiencia del dispositivo en relación a las características que se pueden controlar en el simulador (espesor de las capas, contactos trasero y frontal, temperatura del sistema, etc.) para valorar la viabilidad del dispositivo en relación a los resultados obtenidos y compararlos con los encontrados a partir de la celda solar iluminada desde la región **p** de la unión.

1.6.2 Celda solar iluminada desde la región **p** de la unión.

Debido a que los parámetros que presentan los materiales, indican que es posible iluminar la celda solar a través de la región del material tipo **p**, se busca comprobar que este modelo es posible y comparar si realmente presentaría un mayor beneficio en relación al modelo típico de la celda solar.

Durante la realización de la simulación, se asume que toda la luz que proviene de la radiación solar se transmite (100% de transmisión), que la radiación solar será de 1.5 AM y que habrá una densidad de potencia de 1000 W/m². La relevancia de la mención de estos parámetros radica en que en el simulador se deben especificar algunos de ellos para favorecer una simulación cercana a las condiciones ideales de funcionamiento, como se analiza en la sección siguiente.

Para este modelo de simulación, los materiales de la heterounión siguen siendo los mismos, y cada una de las capas tendrá un funcionamiento específico (explicado en la sección 1.5.2) puesto que el material n-TiO₂ formará a la capa absorbidora y el p-NiO a la capa ventana.

La fase cristalina que se utilizará para el TiO₂ será anatasa, y en relación a la sección 1.4.2a, se requiere disminuir la energía de banda prohibida de dicho compuesto, utilizando el dopamiento, con la finalidad de mejorar sus propiedades de fotorespuesta.

Por lo anterior, los datos del valor de la banda energía prohibida son, para el n-TiO₂ $E_g = 2.26$ eV y para el p-NiO $E_g = 3.8$ eV.

Referente al análisis realizado en la sección 1.1, el espesor de la película del material tipo **n** (TiO₂) debe ser mayor en comparación con el espesor del material tipo **p** (NiO), debido a que esta asimetría favorece el aumento del área de la región de agotamiento que deriva en un menor parámetro de recombinación; esto a su vez beneficia el aprovechamiento de los portadores y aumenta la eficiencia del dispositivo. Este requerimiento también puede ser explicado desde la movilidad del electrón, pues al ser mayor que la del hueco, origina que los electrones requieran de un menor tiempo de traslado al electrodo opuesto sin que se recombinen y debido a que la longitud de difusión de la región **p** es menor, los huecos también tendrán el tiempo de vida suficiente para llegar al electrodo.

La capa **p** tiene un mayor dopamiento que el lado **n** para lograr que la región de agotamiento se forme prácticamente solo en la región del material tipo **n** para favorecer siempre la absorción en el TiO₂. Al tener un espesor de la capa **p** más delgado, los fotones incidentes serán mejor aprovechados y cuando la luz solar llegue hasta la región de agotamiento, habrá un mayor número de portadores que a su vez tendrán una mayor área de movimiento para producir los pares electrón-hueco. Algo importante que se debe tomar

en cuenta es que los principales defectos que presentan ambas partes de la unión (tanto la región **n** como la región **p**) son vacancias de oxígeno

Durante la realización de la simulación se buscan los parámetros que favorezcan el aumento en la eficiencia del dispositivo, por lo tanto, se cambiara el valor de algunos de los datos requeridos en el simulador para analizar el funcionamiento del dispositivo y poder compararlo con el modelo típico de la celda solar (iluminación desde lado n de la unión).

Para realizar una simulación, es necesario comprender tanto el funcionamiento del dispositivo, como los datos numéricos que se van a introducir en el software. De acuerdo a las propiedades de ambos materiales se han encontrado valores requeridos para utilizarlos en el simulador. Con el fin de tener una mejor observación de los parámetros de los materiales, en la tabla 4 se resumen los valores de ambos materiales para realizar la simulación.

Al analizar la tabla 4, un parámetro muy importante que no está incluido en esta, es el espesor de la capa, debido a que este valor va a variar en las simulaciones que se llevarán a cabo. Uno de los objetivos del trabajo es realizar simulaciones con varios espesores con la finalidad de encontrar los valores más adecuados para el diseño del dispositivo por lo cual no resulta en un valor constante.

Tabla 4. Resumen de las propiedades de los materiales de la heterounión n-TiO₂/p-NiO para la simulación en SCAPS.

Propiedades del material	n-TiO ₂	p-NiO
Banda de energía prohibida	2.26	3.8
Afinidad electrónica	4.20	1.46
Permitividad dieléctrica relativa	10.0	10.0
CB Densidad efectiva de estados (1/cm³)	2x10 ¹⁷	2.8x10 ¹⁹
VB Densidad efectiva de estados (1/cm³)	6x10 ¹⁷	1x10 ¹⁹
Movilidad del electrón (cm²/Vs)	100	12
Movilidad del hueco (cm²/Vs)	25	2.8
Densidad de impurezas donadoras (1/cm³)	1x10 ¹⁷	0
Densidad de impurezas aceptoras (1/cm³)	0	1x10 ¹⁹

CAPÍTULO 2

DESARROLLO EXPERIMENTAL

2.1 DESCRIPCIÓN DEL SIMULADOR

SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator), es un simulador unidimensional desarrollado por la Universidad de Gante (Bélgica), diseñado originalmente para la simulación de celdas solares de películas delgadas policristalinas de CdTe y CIGS. Las mediciones eléctricas AC y DC que pueden ser simuladas incluyen al voltaje de circuito abierto (V_{OC}), densidad de corriente de corto circuito (J_{SC}), factor de llenado (FF), eficiencia cuántica, estructura de bandas de energía de la heterounión, entre otras [2][3]. Estas mediciones pueden ser calculadas y obtenidas en condiciones de luz y oscuridad a diferentes temperaturas e iluminaciones. Se pueden agregar distintas capas a la estructura de la celda solar, mientras que las propiedades físicas y electrónicas de dichas capas son importadas.

Las ecuaciones y los parámetros que se requieren para el funcionamiento del software parten de las propiedades descritas en la sección 1.2, ya que se resuelven algunas de las ecuaciones más sencillas relacionadas con el funcionamiento del diodo, así como la resolución del circuito electrónico equivalente (figura 5) a partir del cual se genera el gráfico I-V (figura 6) mediante el cual se pueden encontrar parámetros importantes que describen el comportamiento del dispositivo. Además de resolver estas ecuaciones, se desarrolla el cálculo de otras ecuaciones relacionadas con las propiedades físicas del dispositivo, las cuales son descritas a continuación.

2.1.1 Ecuaciones utilizadas por SCAPS

El software utiliza métodos de diferencias finitas para la resolución de ecuaciones diferenciales, las cuales describen matemáticamente el comportamiento de la celda solar. Las ecuaciones que se resuelven son ecuaciones básicas de los semiconductores [32]:

- 1) Ecuación de Poisson para electrones y huecos (ecuación 8)

La ecuación 8, implementa las variables electrostáticas de un semiconductor, ya que es útil para la descripción del potencial electrostático que se genera a partir de diferentes concentraciones de portadores, tanto huecos como electrones en un dispositivo.

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx} = \frac{e}{\epsilon_0\epsilon_r}(p(x) - n(x) + N_D - N_A + \rho_p - \rho_n) \quad (8)$$

Donde φ es el potencial electrostático, e la carga eléctrica, ϵ_0 la permitividad en el vacío, ϵ_r la permitividad relativa, N_D la concentración de impurezas del donador, N_A la concentración de impurezas del aceptor, ρ_p la distribución de huecos y ρ_n la distribución de electrones.

2) Ecuaciones de continuidad para electrones y huecos (ecuaciones 9 y 10).

Las ecuaciones 9 y 10 incluyen mecanismos dependientes del tiempo, tales como la generación y la recombinación. Describen que en realidad el cambio en la concentración de portadores (electrones y huecos) es una diferencia entre la generación y la recombinación, más la corriente neta producida en la región.

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial J_n}{\partial x} + G - R \quad (9)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial J_p}{\partial x} + G - R \quad (10)$$

Donde $\frac{\partial n}{\partial t}$ $\frac{\partial p}{\partial t}$ es el cambio en la concentración de electrones y huecos (de forma correspondiente), J_n J_p se refiere a la corriente neta producida de electrones y huecos (de forma correspondiente) G representa al índice de generación y R el índice de recombinación.

3) Ecuaciones de densidad de corriente para electrones y huecos (ecuaciones 11 y 12).

La densidad de corriente se forma a partir de dos componentes, uno generado por el campo eléctrico conocido como componente de deriva y otro que se origina por el gradiente de concentración de los portadores tanto electrones como huecos que se expresa como un componente de difusión.

$$J_n = q\mu_n n E + D_n \frac{dn}{dx} \quad (11)$$

$$J_p = q\mu_p p \epsilon + D_p \frac{dp}{dx} \quad (12)$$

Donde J_n y J_p representan las densidades de corriente de los electrones y huecos (de manera correspondiente), $\mu_n \mu_p$ son las movilidades de electrones y huecos (de manera correspondiente), $D_n D_p$ es el coeficiente de difusión para electrones y huecos (de forma correspondiente)

2.1.2 Simulador SCAPS

En la figura 13 se aprecia la pantalla principal del software SCAPS. El usuario puede colocar valores en ciertos puntos de operación, con la finalidad de realizar simulaciones tan cercanas al funcionamiento ideal como se desee. Los parámetros que se pueden variar en esta ventana son: la **temperatura del sistema**, el **voltaje**, la **frecuencia**, **seleccionar las condiciones de iluminación** y la selección del gráfico que se desea obtener, son resaltados en la figura 13, de acuerdo al color de la palabra. La sección resaltada con color naranja está directamente vinculada con la sección 1.6.2 ya que en esta parte se define la transmisión de la luz configurada en la celda solar. Si se busca simular un modelo ideal se busca que la transmisión de la luz sea del 100%.

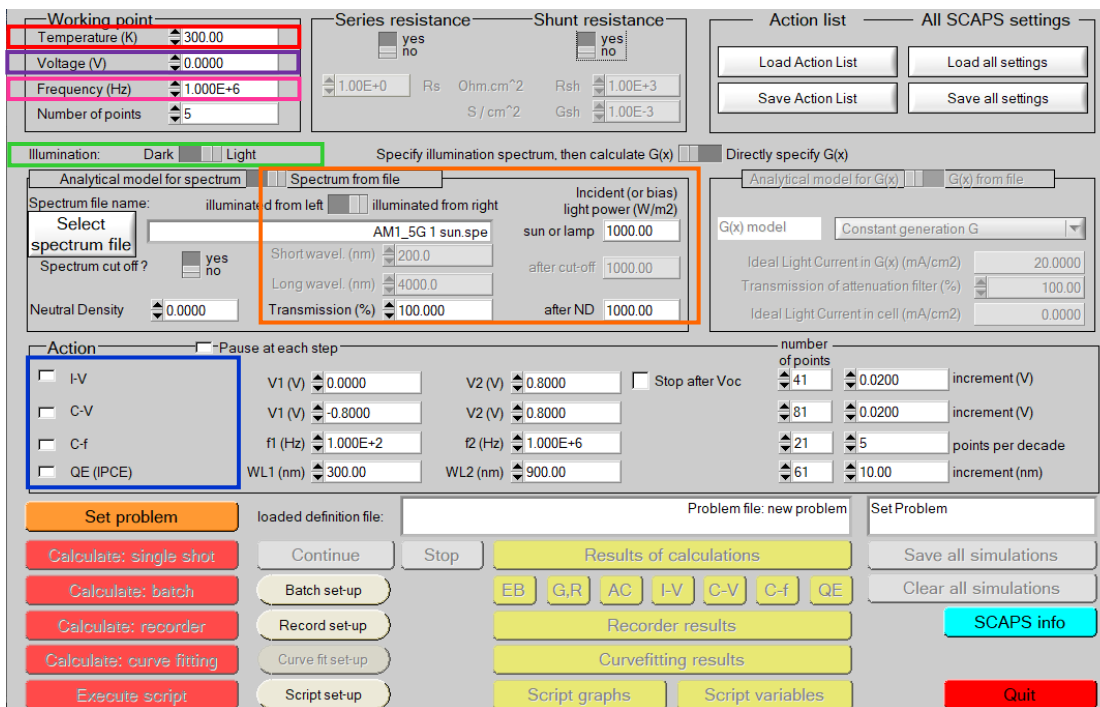


Figura 13. Pantalla principal de SCAPS; se resaltan los parámetros que se pueden modificar según la conveniencia y la necesidad del usuario.

La sección “set problem” permite configurar la celda solar en relación a las capas que la conforman. Cuando se agrega una capa al dispositivo, esta puede ser configurada de acuerdo a las necesidades del usuario, principalmente se requiere definir el material con las propiedades que lo caracterizan. La figura 14 ilustra la ventana donde se configura cada una de las capas que forman a la celda solar.

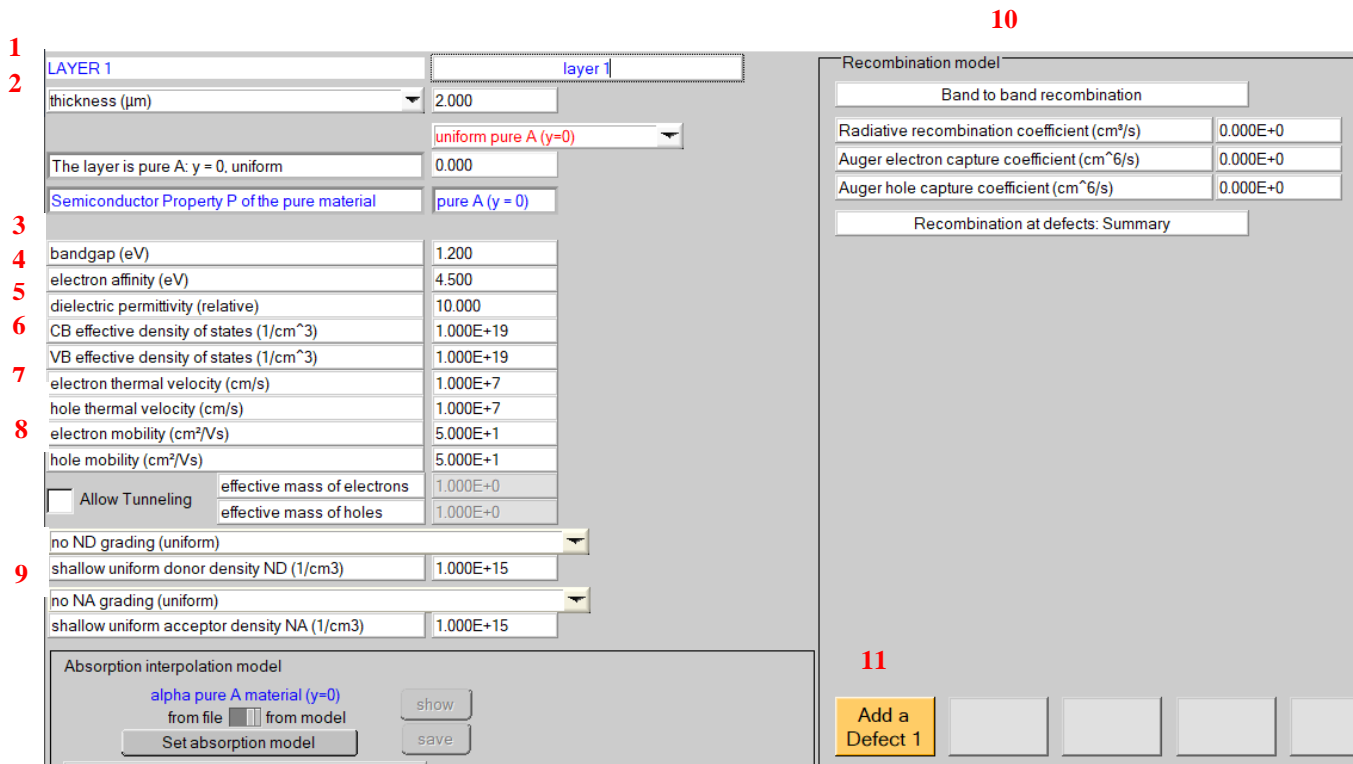


Figura 14. Se muestra la pantalla que debe ser llenada cuando se configura una nueva capa en la celda solar.

Los parámetros que se pueden modificar para la configuración de una capa de la celda solar están numerados en la figura 14 para ser explicados en orden de aparición:

1. **Layer (capa)**: este módulo es puramente lingüístico puesto que se modifica para agregarle un nombre a la celda solar con la finalidad de que cada una de las capas pueda ser diferenciada. Se sugiere que el nombre sea fácilmente comprensible e identificable.
2. **Thickness (grosor)**: este módulo se refiere al espesor de la capa; la medida está dada en micrómetros.
3. **Bandgap (banda de energía prohibida)**: se refiere a la energía que presenta la banda de energía prohibida.
4. **Electron affinity (Afinidad electrónica)**: definida como la energía requerida para remover un electrón localizado en el borde de la banda de conducción.

5. Dielectric permittivity (Permitividad dieléctrica): es un parámetro físico que describe cuanto es afectado un material por la presencia de un campo eléctrico.

Los parámetros 3, 4 y 5 resultan muy importantes ya que su principal función es identificar al material, puesto que cada uno cuenta con parámetros únicos.

6. CB/VB effective density of states (Densidad efectiva de estados): caracteriza el número existente de estados por cada intervalo de energía. CB (conduction band) se refiere a los estados de la banda de conducción y VB (valence band) a los estados en la banda de valencia

7. Electron/hole thermal velocity (Velocidad térmica): como se explicó en la sección 1.1 (Física de las celdas solares), es una forma de energía que existe derivada de la vibración de las partículas en la materia. Este parámetro tanto para electrones como para huecos es de aproximadamente 10^7 cm/seg

8. Electron/hole mobility (Movilidad): concepto revisado en la sección 1.1.1 (Difusión y arrastre), describe que tan bien se mueven las partículas debido al campo eléctrico. La movilidad se debe definir tanto por los electrones como por los huecos.

9. Shallow uniform donor/acceptor density ND/NA (Gradiente de concentración uniforme): parámetro relacionado con el dopamiento del material; ND se refiere a la concentración de átomos donadores relacionados con el material tipo **n** y NA se refiere a la concentración de átomos aceptores relacionados con el material tipo **p**.

10. Recombination model (Modelo de Recombinación): el software permite seleccionar el modelo de recombinación más conveniente, agregando el parámetro numérico del coeficiente de recombinación.

11. Add a defect (Añadir un defecto): es importante que en la simulación se tomen en cuenta los defectos, el software permite hacerlo mediante un gradiente de concentración de defectos que debe ser numéricamente especificado.

En el proceso de simulación de una celda solar se requiere construir capa por capa al dispositivo; es importante que se especifiquen los contactos que serán utilizados en la simulación ya que fungirán como los electrodos que permitirán la producción de la corriente en la celda. La figura 15 muestra la configuración de dos celdas solares en el software SCAPS; la capa **p** es señalada de color rojo y la capa **n** es señalada de color azul; la luz solar incidente es representada mediante flechas de colores, por lo tanto, la imagen de la izquierda muestra la configuración de iluminación desde la parte **n** de la unión y la imagen de la derecha muestra la configuración de iluminación desde la parte **p** de la unión.

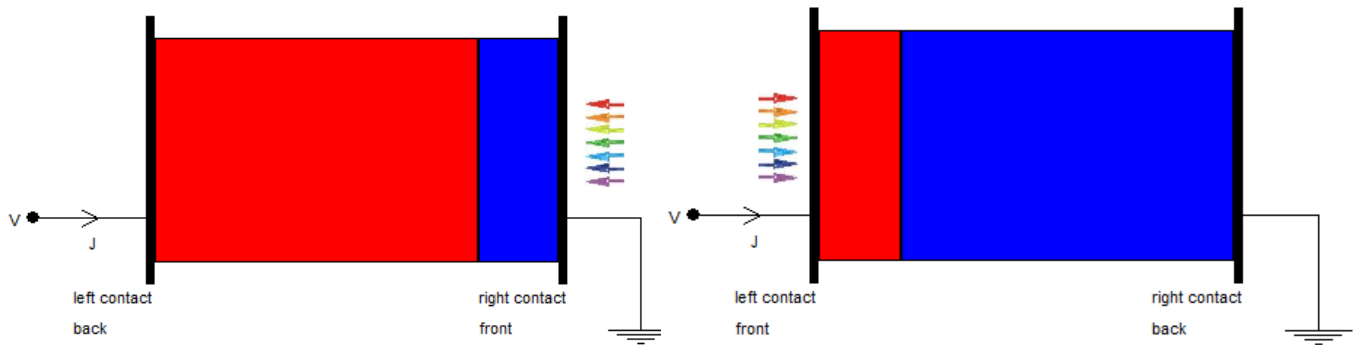


Figura 15. Configuración de una celda solar que se puede observar mediante un gráfico dibujado en el software SCAPS, a la izquierda iluminada desde la parte n de la unión, a la derecha, iluminada desde la parte p de la unión

2.2 DIAGRAMA DE BANDAS DE ENERGÍA PARA LA HETEROUNIÓN N-TiO₂/P-NiO

Retomando la idea de que una heterounión está formada por dos materiales que presentan diferentes valores en su banda de energía prohibida, se debe comprender que existe una discontinuidad en la interfase de la unión [7]. De acuerdo al estudio físico de la heterounión, se comprende que se produce una unión abrupta entre un material con un ancho de banda de energía angosto (E_g n-TiO₂=2.26 eV) y otro con un ancho de banda de energía amplio (E_g p-NiO=3.8 eV)

Para la comprensión de las características de la heterounión, es muy importante analizar el diagrama de bandas de energía. Para el diseño del mismo, se requiere en primer lugar, analizar el tipo de diagrama de bandas que se obtendrá, en este caso, el diagrama de bandas de energía corresponde al de una heterounión **nP**, donde la letra en mayúscula se refiere al material que tiene el ancho de banda de energía prohibida más amplio; por otro lado, se requiere del conocimiento de ciertos parámetros propios de los materiales y de algunos cálculos de propiedades para obtener un diagrama completo como el que se muestra en la figura 16.

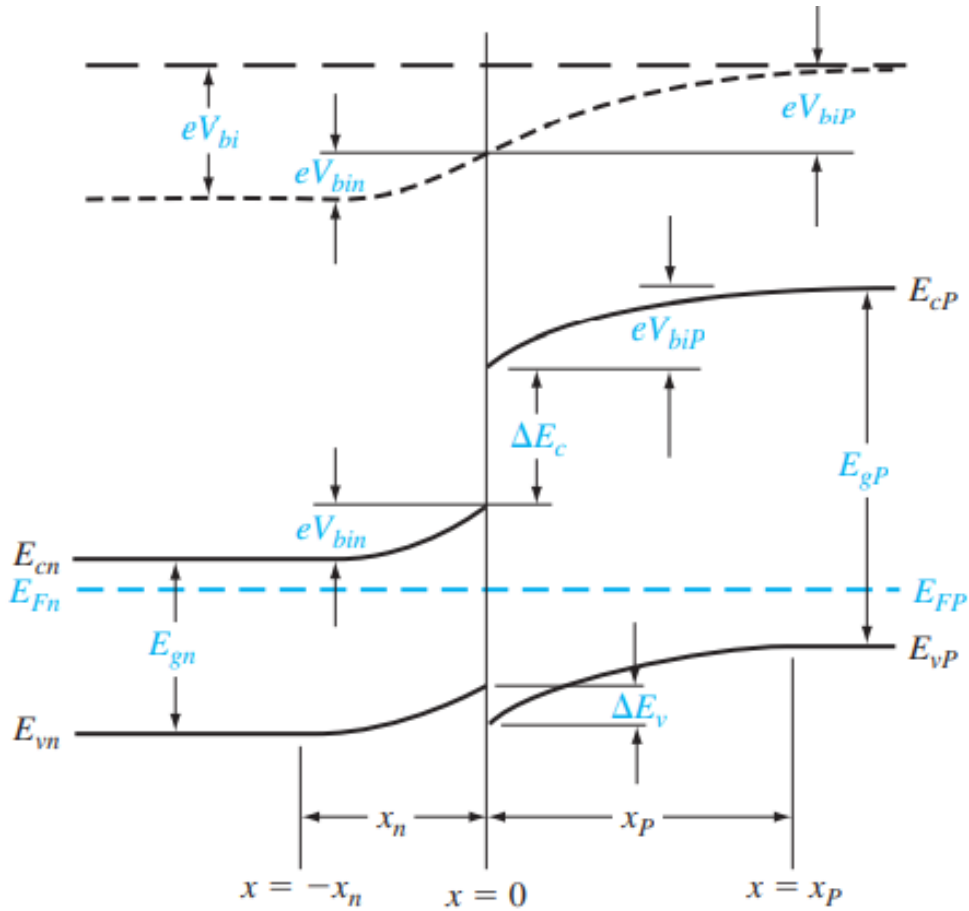


Figura 16. Diagrama de bandas de energía ideal para una heterounión nP en equilibrio térmico [7].

Como se observa en la figura 16, se requieren varios parámetros para tener diagrama de bandas de energía ideal, los cálculos pertinentes que se deben realizar son explicados a continuación.

- Se identifican los parámetros definidos como E_{gn} y E_{gp} referentes al valor de banda de energía prohibida del material n y P de manera correspondiente, por lo tanto: $E_{gn} = 2.26 \text{ eV}$ y $E_{gp} = 3.8 \text{ eV}$.

$$\bullet \Delta E_c = e(\chi_n - \chi_p)$$

(13)

En la ecuación 13, se hace uso de un parámetro denominado “afinidad electrónica” (χ), mismo que es requerido en los datos de la simulación como se observa en la tabla 4; la afinidad electrónica del material con la banda de energía más ancha debe ser menor que la del material con la banda de energía más estrecha; χ_n se refiere a la afinidad electrónica del material tipo n y χ_p a la del material tipo p. El resultado obtenido a partir de la ecuación 13 es la diferencia energética que existe entre las dos bandas de conducción:

Para n-TiO₂ $\chi_n = 4.2 \text{ eV}$ [2]

p-NiO $\chi_p = 1.46 \text{ eV}$ [27]

$$\Delta E_c = 2.74 \text{ eV}$$

$$\bullet \Delta E_c + \Delta E_v = E_{gp} - E_{gn} = \Delta E_g \quad (14)$$

Utilizando los parámetros descritos anteriormente, se puede encontrar la diferencia energética que hay entre las dos bandas de valencia, por medio de la ecuación 14. Despejando ΔE_v en la ecuación 14 se obtiene:

$$\Delta E_v = -E_{gp} + E_{gn} + \Delta E_c = 1.2 \text{ eV}$$

2.2.1 Niveles de energía de Fermi

El nivel de Fermi es un nivel de referencia que se encuentra entre la banda de valencia y la banda de conducción; una característica importante de este parámetro, es que antes de la formación de la unión, resulta en un valor independiente en cada una de estas partes, y depende directamente de las características del material que las compone, como la concentración de dopado y la temperatura.; cuando se forma la heterounión, el nivel de Fermi se vuelve uniforme y se nivela en un mismo rango que es representado en el diagrama de bandas de energía como un nivel energético único.

Debido a que se deben calcular las características de ambas partes de la unión, los cálculos se desarrollan tanto para la parte **n** como para la parte **P**.

Cálculos para la parte n de la unión (TiO₂)

Cuando un semiconductor está dopado, se determina si este corresponde a un material tipo **n** o tipo **P**, según sea el tipo de dopado que se utiliza; en primera instancia, los electrones se encuentran en la banda de valencia y mediante la excitación térmica, un portador puede pasar de la banda de valencia a la banda de conducción mediante la absorción, creando portadores libres en ambas bandas; cuando se trabaja con un material tipo **n**, se tiene una concentración de dopado de tipo donador, debido a que los portadores pasan fácilmente hacia la banda de conducción; la concentración de portadores libres en estas bandas se

conoce como concentración intrínseca de portadores cuyo valor se puede determinar mediante la ecuación 15.

$$n_i^2 = N_c N_v \exp \left[\frac{-E_g}{kT} \right] \quad (15)$$

Donde N_c se refiere a la densidad efectiva de estados en la banda de conducción y N_v en la banda de valencia, parámetros que se especifican en el software de simulación; E_g es el valor de la banda de energía prohibida; k representa a la constante de Boltzmann $8.62 \times 10^{-5} \frac{eV}{K}$ y T es la temperatura del sistema; de acuerdo a la fórmula se comprende que, a mayor temperatura del sistema, habrá un mayor número de electrones absorbidos.

A partir del cálculo de la concentración intrínseca de portadores, se puede determinar la cantidad de electrones y huecos en equilibrio térmico como se observa a continuación, sin embargo, cabe resaltar que para un material tipo **n** la concentración de electrones en equilibrio térmico será casi igual a la concentración de impurezas donadoras, ya que es la concentración dominante; por lo tanto, para un material tipo **n**, la concentración intrínseca de portadores resulta en un valor mucho más pequeño que la concentración de electrones en equilibrio térmico ($n_0 \gg n_i$) y la concentración de huecos en equilibrio térmico es mucho menor que la concentración intrínseca de portadores ($p_0 \ll n_i$)

Utilizando la ecuación 15, se realiza el cálculo de la concentración intrínseca de portadores utilizando los datos de la tabla 4 a temperatura ambiente (300 K):

$$n_i = 0.0365 \text{ cm}^{-3}$$

A partir de este parámetro se puede obtener la concentración de electrones y de huecos en equilibrio térmico n_0 y p_0 , utilizando las ecuaciones 16 y 17.

$$n_0 = \frac{(N_d - N_a)}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_d - N_a}{2}\right)^2 + n_i^2} \quad (16)$$

$$n_0 = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

De acuerdo a este resultado, se puede corroborar que la concentración de impurezas donadoras es igual a la concentración de electrones en equilibrio térmico, por lo que la concentración de huecos en equilibrio térmico debe resultar en un número aun más pequeño que el valor de la concentración intrínseca de

portadores, de acuerdo a los cálculos es un parámetro pequeño; esto se puede comprobar mediante la ecuación 17.

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = \frac{n_i^2}{N_d} \quad (17)$$

$$p_0 = 1.33 \times 10^{-20} \text{ cm}^{-3}$$

En efecto se cumple la regla propuesta anteriormente; estos valores pueden corroborarse de acuerdo a la ecuación 18.

$$n_i^2 = n_0 p_0 \quad (18)$$

$$n_i^2 = 1.3323 \times 10^{-3}$$

Por lo tanto $n_i = 0.0365 \text{ cm}^{-3}$ comprobando que los parámetros calculados corresponden a un material tipo n. A partir de los parámetros calculados con las ecuaciones 15 y 16 se puede encontrar el valor de la energía de Fermi, que, de acuerdo a la teoría, para un material tipo n, se debe encontrar cerca de la banda de conducción. Este parámetro se puede calcular mediante la ecuación 19 y la ecuación 20.

$$E_F - E_{Fi} = kT \ln \left(\frac{n_0}{n_i} \right) \quad (19)$$

$$E_{Fi} - E_F = kT \ln \left(\frac{p_0}{n_i} \right) \quad (20)$$

El valor del nivel de energía de Fermi intrínseco (E_{Fi}) corresponde a la mitad del valor de la banda de energía prohibida; el material tipo n tiene un valor para la banda de energía prohibida de 2.26, por lo tanto $E_{Fi} = 1.13 \text{ eV}$

De acuerdo a la ecuación 19, el nivel de Fermi tiene que estar por arriba del nivel de energía de Fermi intrínseco (E_{Fi}) si se utiliza la concentración de electrones en equilibrio, de no ser así, el resultado indicaría que el nivel de energía de Fermi intrínseco es mayor, por lo tanto, la energía de Fermi se encontraría por debajo de este ; la ecuación 20 indica que el nivel de Fermi intrínseco tiene que estar por arriba del nivel de energía del Fermi si se utiliza la concentración de huecos en equilibrio; al obtener un resultado negativo (resultado en color azul), este indicaría que el nivel de Fermi se encuentra por arriba del nivel de energía de Fermi intrínseco. Se puede deducir que al utilizar las ecuaciones 19 y 20 para un material tipo **n**, la

ecuación 19 daría un resultado positivo (resultado en color azul), indicando que efectivamente el nivel de Fermi se encuentra por arriba del nivel de energía de Fermi intrínseco, cerca de la banda de conducción, mientras que la ecuación 20 daría un resultado negativo (resultado en color rosa), apoyando que el nivel de Fermi supera al nivel de energía de Fermi intrínseco; realizando las operaciones se encuentra el nivel de energía de Fermi para el material tipo **n** a 300 K.

Utilizando la ecuación 19:

$$E_F - 1.13 = 0.0259 \ln\left(\frac{1 \times 10^{17}}{0.0365}\right)$$

$$E_F - 1.13 = 1.10$$

$$E_F = 1.10 + 1.13 = 2.23 \text{ eV}$$

Utilizando la ecuación 20:

$$1.13 - E_F = 0.0259 \ln\left(\frac{1.33 \times 10^{-20}}{0.0365}\right)$$

$$1.13 - E_F = -1.10$$

$$-E_F = -1.10 - 1.13 = -2.23 \text{ eV}$$

El nivel de energía de Fermi se encuentra en un valor de **2.23 eV** por encima de la banda de conducción, valor que además es mayor al valor de energía de Fermi intrínseco y muy cercano a la banda de conducción, ya que el valor de la banda de energía prohibida es de 2.26 eV.

Cálculos para la parte P de la unión (NiO)

Cuando se trabaja con un material tipo **P**, se tiene una concentración de dopado de tipo aceptor, debido a que los portadores se encuentran cerca de la banda de valencia, donde hay una concentración elevada de huecos; el cálculo para la concentración intrínseca de portadores se realiza mediante la ecuación 15.

$$n_i^2 = 4.26 \times 10^{-26}$$

$$n_i = 2.06 \times 10^{-13} \text{ cm}^{-3}$$

De igual manera, a partir del cálculo de la concentración intrínseca de portadores, se puede determinar la cantidad de electrones y huecos en equilibrio térmico; para un material tipo **P** la concentración de huecos en equilibrio térmico será casi igual a la concentración de impurezas aceptoras, ya que es la concentración dominante; por lo tanto, para un material tipo **P**, la concentración intrínseca de portadores resulta en un valor mucho más pequeño que la concentración de huecos en equilibrio ($p_0 \gg n_i$) y la concentración de electrones en equilibrio es mucho menor que la concentración intrínseca de portadores ($n_0 \ll n_i$).

Debido a que en este caso los portadores dominantes son los huecos, la fórmula para encontrar la concentración de huecos en equilibrio es similar a la ecuación 16, posicionando a la concentración de aceptores como los parámetros importantes en la ecuación 21.

$$p_0 = \frac{(N_a - N_d)}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_a - N_d}{2}\right)^2 + n_i^2} \quad (21)$$

$$p_0 = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

Nuevamente se comprueba que la concentración de impurezas aceptoras es igual a la concentración de huecos en equilibrio térmico, por lo que la concentración de electrones en equilibrio térmico debe resultar en un número muy pequeño, partiendo de la ecuación 17, se encuentra que la concentración de electrones en equilibrio se puede encontrar mediante la ecuación 22.

$$n_0 = \frac{n_i^2}{p_0} = \frac{n_i^2}{N_a} \quad (22)$$

$$p_0 = 4.263 \times 10^{-45} \text{ cm}^{-3}$$

De igual forma, estos valores pueden corroborarse de acuerdo a la ecuación 18.

$$n_i^2 = 4.263 \times 10^{-26}$$

Por lo tanto $n_i = 2.06 \times 10^{-13} \text{ cm}^{-3}$ comprobando que los parámetros calculados corresponden a un material tipo **P**. Con los parámetros calculados anteriormente, se puede encontrar el valor de la energía de Fermi, que, para un material tipo p, se debe encontrar cerca de la banda de valencia. Este parámetro se puede calcular mediante la ecuación 19 y la ecuación 20, donde el valor del nivel de energía de Fermi intrínseco (E_{Fi}) para el material tipo **P**, de acuerdo al valor de su banda de energía prohibida de 3.8 eV es de $E_{Fi} = 1.9 \text{ eV}$

Al utilizar las ecuaciones 19 y 20 para un material tipo **P**, la ecuación 19 arroja un resultado negativo (resultado en color azul), indicando que el nivel de Fermi se encuentra por debajo del nivel de energía de Fermi intrínseco, cerca de la banda de valencia, mientras que la ecuación 20 daría un resultado positivo (resultado en color rosa), apoyando que el nivel de Fermi se encuentra por debajo del nivel de energía de Fermi intrínseco; realizando las operaciones se encuentra el nivel de energía de Fermi para el material tipo **n** a 300 K.

Utilizando la ecuación 19:

$$E_F - 1.9 = 0.0259 \ln \left(\frac{4.263 \times 10^{-45}}{2.06 \times 10^{-13}} \right)$$

$$E_F - 1.9 = -1.89$$

$$E_F = -1.89 + 1.9 = \mathbf{0.01 \text{ eV}}$$

Utilizando la ecuación 20:

$$1.9 - E_F = 0.0259 \ln \left(\frac{1 \times 10^{19}}{2.06 \times 10^{-13}} \right)$$

$$1.9 - E_F = 1.89$$

$$-E_F = 1.89 - 1.9 = -\mathbf{0.01 \text{ eV}}$$

$$E_F = \mathbf{0.01 \text{ eV}}$$

El nivel de energía de Fermi se encuentra en un valor de **0.01 eV**, valor que está justo por encima de la banda de valencia, por lo que se corrobora que corresponde a un material tipo **P**; si bien es cierto que el nivel de energía está muy cerca de la banda de valencia, el resultado nos habla de un material que aún no está degenerado.

A pesar de que los parámetros de la energía de Fermi son valores de referencia, son útiles para calcular otro de los parámetros importantes del diagrama de bandas de energía, que es la función de trabajo (ϕ). La función de trabajo es un parámetro que no se especifica en los parámetros de la simulación, pero de acuerdo a las características del diagrama de bandas de energía, este debe ser mayor que la afinidad electrónica. Observando entonces el diagrama de bandas, se puede comprender que la función de trabajo

del material tipo n, se puede calcular con ayuda de los parámetros de la energía de Fermi, visualizando en primer lugar que existe una separación entre el nivel de energía prohibido del material tipo n y el nivel de energía de Fermi de dicho material, por lo tanto, se puede realizar el siguiente cálculo: $E_{gn} - E_{Fn} = 2.26 - 2.23 = \mathbf{0.03 eV}$.

Dado que la función de trabajo es un parámetro mayor que la afinidad electrónica, la función de trabajo del material tipo n, puede calcularse mediante la ecuación 23.

$$\phi_{sn} = 0.03 + \chi_n = 0.03 + 4.2 = \mathbf{4.23 eV} \quad (23)$$

De manera similar, la función de trabajo del material tipo P, puede ser calculada comprendiendo que existe una separación entre la banda de energía prohibida del material tipo P y el nivel de energía de Fermi del mismo material: $E_{gP} - E_{FP} = 3.8 - 0.01 = \mathbf{3.79 eV}$.

Realizando un cálculo similar al de la parte **n**, se calcula la función de trabajo del material tipo **P**, mediante la ecuación 24.

$$\phi_{sP} = 3.79 + \chi_P = 3.79 + 1.46 = \mathbf{5.25 eV} \quad (24)$$

La función de trabajo es útil para calcular otros parámetros importantes que caracterizan el diagrama de bandas de energía, como se observa en la ecuación 25.

$$\bullet V_{bi} = \phi_{sP} - \phi_{sn} \quad (25)$$

La barrera de potencial V_{bi} puede ser encontrada utilizando la ecuación 25 [7], comprendiendo que esta es igual a la diferencia entre las funciones de trabajo de los materiales, donde ϕ_{sP} representa a la función de trabajo del material tipo P y ϕ_{sn} a la del material tipo n, en relación a los cálculos realizados mediante las ecuaciones 23 y 24, se sabe que:

$$\phi_{sP} = 5.25 eV$$

$$\phi_{sn} = 4.23 eV$$

$$V_{bi} = \phi_{sP} - \phi_{sn} = \mathbf{1.02 V}$$

• En la sección 1.1.1 se menciona la generación de un campo eléctrico que va en contra de la corriente de difusión; este campo eléctrico y el potencial de la unión se puede determinar mediante la ecuación de Poisson de la misma forma que en una homounión [14]. El potencial eléctrico puede encontrarse integrando el campo eléctrico a través de la región de carga espacial, por lo tanto, se puede determinar la diferencia de potencial que atraviesa cada región, encontrando así las ecuaciones 26 y 27:

$$V_{bin} = \frac{eN_{dn}X_n^2}{2\epsilon_n} \quad (26)$$

$$V_{biP} = \frac{eN_{aP}X_P^2}{2\epsilon_P} \quad (27)$$

De acuerdo a las ecuaciones 26 y 27, se requiere el cálculo de la longitud de la región de transición en cada lado de la unión X_n para la región del material tipo n y X_P para el material tipo P; es en estos detalles en donde surge la primera observación sobre las características apropiadas para el diseño de la celda solar: al tener una celda solar de heterounión nP, debido a que la banda de energía prohibida del material tipo P es mayor, la diferencia de potencial se calcula utilizando la concentración de los portadores correspondientes en cada región, es decir, la concentración de huecos con naturaleza aceptora en el lado P (N_{aP}) y la de electrones con naturaleza donadora en el lado n de la unión (N_{dn}); recordando que los parámetros de la tabla 4 contemplan ambos materiales con valores que resultan constantes por ser experimentalmente comprobados, se puede observar que en los parámetros $N_{aP} = 1 \times 10^{19} \text{ 1/cm}^3$ y $N_{dn} = 1 \times 10^{17} \text{ 1/cm}^3$ tienen una congruencia con el funcionamiento de la celda, iluminándola desde la parte P de la unión, ya que la concentración de átomos aceptores resulta mayor que la de donadores.

La parte iluminada siempre tiene una concentración de portadores mayor con la finalidad del aprovechamiento de los mismos, pues entre mayor sea su concentración, existirá una mayor posibilidad de producir pares electrón-hueco [7] y de esta forma, el campo eléctrico los impulsa fuera de la región de agotamiento, hacia su región correspondiente, por lo cual, un primer indicio de la efectividad de iluminar la celda desde la región P de la unión recae en la alta concentración de átomos aceptores del NiO que se refleja también en la longitud de la región de transición de acuerdo a las ecuaciones 28 y 29.

$$x_n = \left[\frac{2 \epsilon_n \epsilon_P N_{aP} V_{bi}}{e N_{dn} (\epsilon_n N_{dn} + \epsilon_P N_{aP})} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (28)$$

$$x_p = \left[\frac{2 \epsilon_n \epsilon_p N_{dn} V_{bi}}{e N_{ap} (\epsilon_n N_{dn} + \epsilon_p N_{ap})} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (29)$$

Se puede observar que, en ambas ecuaciones, la concentración de portadores juega un papel importante para el cálculo de la longitud de la región de transición. El cálculo inicia en primera instancia, con la definición de los parámetros faltantes para realizarlo: ϵ_n se refiere a la permitividad dieléctrica del material tipo **n** y ϵ_p a la del material tipo **P**.

Cabe resaltar que en la tabla 4 aparece un parámetro para ambos materiales denominado “permitividad dieléctrica relativa” el cual es igual a 10 para ambos materiales; este valor requiere ser multiplicado por la permitividad en el vacío para obtener un valor absoluto en términos de energía; realizando los cálculos se obtiene:

$$\begin{aligned} \epsilon_0 &= 8.85 \times 10^{-14} \text{ F/cm} \\ \epsilon_n &= 10 * \epsilon_0 = 10 * 8.85 \times 10^{-14} = 8.85 \times 10^{-13} \text{ F/cm} \\ \epsilon_p &= 10 * \epsilon_0 = 10 * 8.85 \times 10^{-14} = 8.85 \times 10^{-13} \text{ F/cm} \end{aligned}$$

$$x_n = \mathbf{105.7 \text{ nm}}$$

$$x_p = \mathbf{1.057 \text{ nm}}$$

De acuerdo a los cálculos de la longitud de la región de transición, se observa que existe una diferencia sustancial en la longitud en ambas partes de la unión, favoreciendo la construcción de dicha región en la parte **n** de la unión. Al analizar estos resultados se comprende que, en realidad, existe una tendencia a favorecer la formación de la región de transición en la parte **n** de la unión, debido a que el dopamiento de la misma es menor, lo que nuevamente confirma que la iluminación de la celda solar desde la región del material tipo **P** es factible. Esto es comprobable desde el punto de vista físico de la heterounión ya que, de acuerdo a las características adecuadas para el funcionamiento de la celda solar, la parte de la unión que funge como capa absorbadora, debe tener un mayor espesor, precisamente para favorecer la construcción de la región de transición en esta capa, y de esta forma, tener una absorción adecuada para fomentar el aprovechamiento de los portadores y disminuir la recombinación.

De acuerdo a la comprobación numérica, es ideal que la región de absorción sea la capa del material tipo **n** debido a que la longitud de la región de transición es mayor; a pesar de que los portadores que se difunden desde la región **P** son huecos, la presencia de los electrones en la región del material tipo **n**, y la

amplitud de la región de transición que se forma en esta, lograría que una buena cantidad de los huecos que se difunden, se absorban en la región **n**, disminuyendo el fenómeno recombinante y aumentando el aprovechamiento de los portadores, que se refleja a su vez, en un aumento en la eficiencia del dispositivo. Retomando los cálculos de la diferencia de potencial que atraviesa cada región en las ecuaciones 26 y 27, donde la longitud de la región de transición que se forma en cada parte de la unión era necesaria, se encuentran los siguientes valores de voltaje.

$$V_{bin} = \mathbf{1.01 V}$$

$$V_{biP} = \mathbf{0.01 V}$$

Se puede comprobar que al sumar los valores del potencial interconstruido en cada uno de los lados de la unión se obtiene un resultado de 1.02 V, mismo resultado que la barrera de potencial antes calculada. Para calcular la longitud total de la región de transición, se suman las longitudes de ambas regiones, de manera que para su obtención se utiliza la ecuación 20.

$$W = x_n + x_p$$

(30)

$$W = 105.7 + 1.057 = \mathbf{106.757 nm \approx 0.1068 \mu m}$$

Encontrando todos los parámetros anteriores, se cuenta con la información completa para realizar el diagrama de bandas de energía ideal para la heterounión n-TiO₂/p-NiO, el cual se observa en la figura 17.

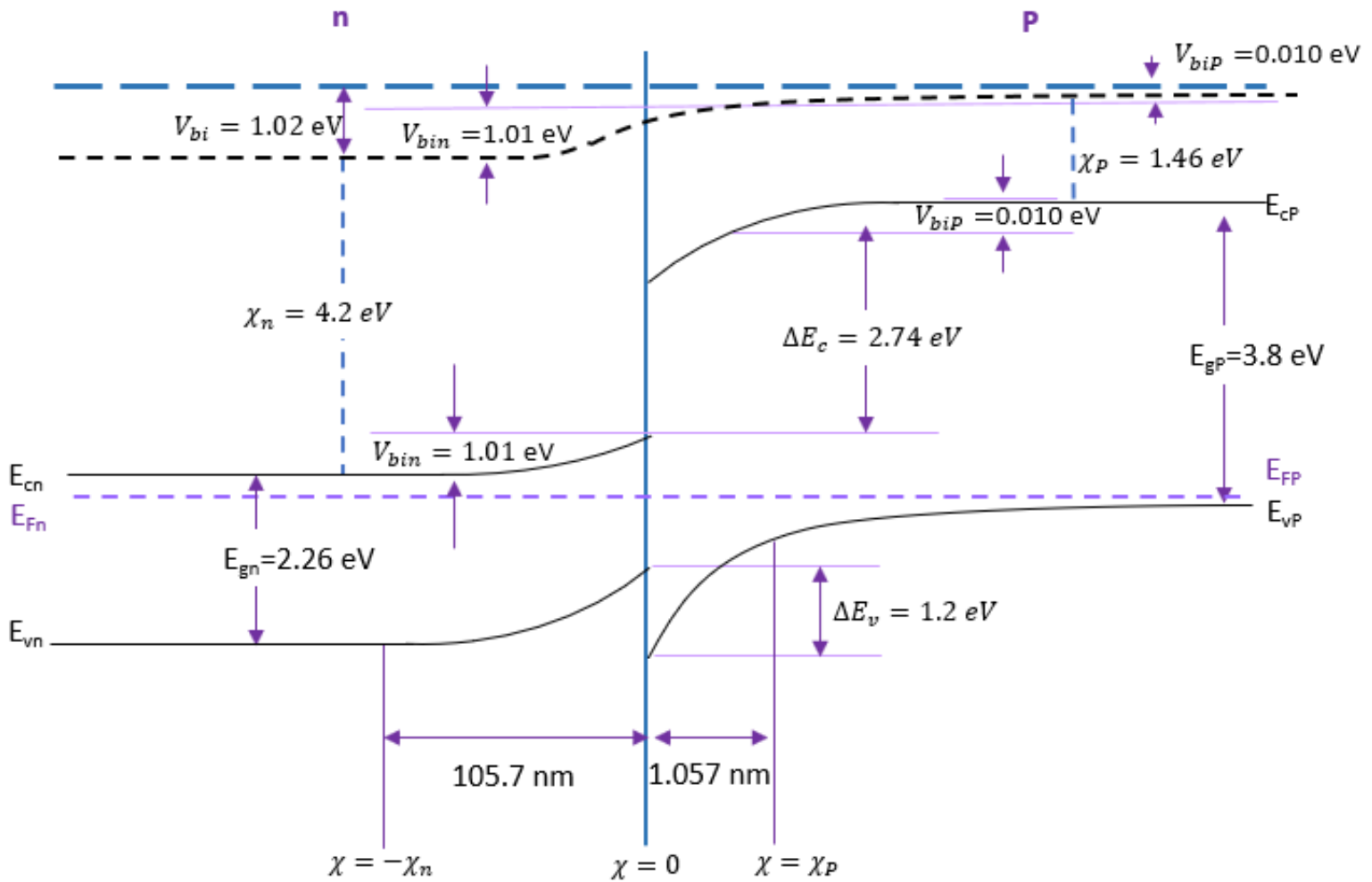


Figura 17. Diagrama de bandas de energía ideal para la heterounión n-TiO₂/P-NiO en equilibrio térmico [7][23]

De acuerdo a los resultados obtenidos en SCAPS en relación a las propiedades del diagrama de bandas de energía, se pueden corroborar los datos obtenidos, tomando en cuenta las características de la heterounión; para realizar el análisis de los resultados se debe tomar en cuenta que al realizar la simulación, el software necesita parámetros que determinen las propiedades de cada uno de los materiales, así como de características físicas que las describan; tal es el caso del espesor de cada una de las capas.

Al especificar el espesor de las capas que forman a la heterounión, inicia la construcción de la celda solar y en relación a los parámetros reportados y a la física del dispositivo, se puede comprender que la región de agotamiento se construye justo cuando se unen las capas y los resultados obtenidos del software para el diagrama de bandas de energía, se reportan desde la parte de la celda que es iluminada, es decir, si el espesor de la capa n es de 2000 nm, el de la capa P es de 100 nm y la celda se ilumina desde la parte P de

la unión, los resultados de la simulación específicamente para el diagrama de bandas de energía, se reportan en los parámetros referentes al espesor de la capa **P** a partir del momento en el que se forma la unión; La figura 18 resalta los valores obtenidos de la simulación, relacionados con los parámetros de la diferencia en la banda de conducción y la banda de valencia para la heterounión

1	2	3	4	5	6	7
i	x(um)	y	Ec(eV)	Fn(eV)	Fp(eV)	Ev(eV)
101	0.099901	0.00000000	3.92336883	3.20951744	-0.00000000	0.12336883
102	0.100000	0.00000000	3.96594810	3.20949039	-0.00000000	0.16594810
103	0.100000	0.00000000	1.22594810	1.50000112	-0.46484213	-1.03405190
104	0.100012	0.00000000	1.23570498	1.50000112	-0.46525507	-1.02429502
105	0.100025	0.00000000	1.24393387	1.50000112	-0.46554196	-1.01606613

Figura 18. Parámetros obtenidos de la simulación, resaltando los que son utilizados para cálculos referentes al diagrama de bandas de energía (los números superiores se refieren al número de columna en la que se encuentran).

En la segunda columna se observan los parámetros referentes al espesor de la capa iluminada. Es notable que el espesor resaltado (espesor especificado en los parámetros de las capas de material) se repite dos veces; esto sucede debido a que, en este punto, el software empieza a simular la formación de la región de agotamiento y es justamente en estos parámetros resaltados, donde se puede encontrar la información referente al diagrama de bandas de energía.

En primer lugar, para calcular la diferencia entre las bandas de conducción, se puede utilizar la información de la columna 4, encontrando los parámetros que corresponden al espesor especificado, se realiza la siguiente operación:

$$\Delta E_c = 3.96594810 - 1.22594810 = 2.74 \text{ eV}$$

En la ecuación 13, referente al cálculo de la diferencia entre las bandas de conducción, se utiliza la diferencia de afinidades electrónicas para calcularla, obteniendo el mismo resultado.

Posteriormente para calcular la diferencia entre las bandas de valencia, se utiliza la información de la columna 7, señalando que uno de los valores resaltados es negativo; el signo indica que el nivel energético en el que se está realizando la medición se encuentra por debajo del nivel de referencia, por lo tanto, la operación a realizar es realmente una suma, ya que se tiene que contemplar todo el espacio que existe entre las bandas, realizando la siguiente operación:

$$\Delta E_v = 1.03405190 + 0.16594810 = 1.2 \text{ eV}$$

El resultado obtenido también concuerda con el que se obtiene mediante la ecuación 14.

Finalmente, para el ancho de la barrera de potencial, se utilizan los resultados obtenidos en la información de la simulación para el gráfico capacitancia-voltaje (C-V), dado que en la medición de los parámetros a 0 V se pueden analizar los resultados del ancho de la región de agotamiento “W”. La figura 19 muestra los parámetros obtenidos mediante la simulación de los parámetros C-V de la heterounión.

v (V)	C (nF/cm ²)	G (S/cm ²)	W (μm)	N _{app} (/cm ³)
-0.040000	8.18215830e+01	1.75692853e-04	1.08211057e-01	9.89278345e+16
-0.020000	8.26011580e+01	1.78177814e-04	1.07189781e-01	1.00802124e+17
0.000000	8.33984956e+01	1.80768251e-04	1.06164985e-01	1.00657845e+17
0.020000	8.42268750e+01	1.83459718e-04	1.05120842e-01	1.00179390e+17
0.040000	8.50809518e+01	1.86247675e-04	1.04065597e-01	1.00122565e+17

Figura 19. Parámetros obtenidos de la simulación C-V, resaltando los que son utilizados para cálculos referentes a la longitud de la región de transición

La columna referente a W a 0 V arroja un resultado de $1.06164985 \times 10^{-1} \mu m$ que corresponde a 106.165 nm ; en relación al resultado obtenido mediante la ecuación 30 que es de 106.757 nm , el resultado realmente es muy cercano, corroborando de igual manera el parámetro calculado.

2.3 CELDA SOLAR PARA LA HETEROUNIÓN N-TiO₂/P-NiO ILUMINADA DESDE LA PARTE n DE LA UNIÓN.

Como se ha mencionado en la sección 1.6.1, de acuerdo a los parámetros que presentan los materiales con los que se realiza el proceso de simulación, resulta conveniente iluminar la celda solar planteada, desde la parte **P** de la unión; sin embargo, debido a que en diversos artículos se menciona la posibilidad de diseñar esta celda solar e iluminarla desde la parte **n** de la unión [28][29][30] se genera la necesidad de comprobar la viabilidad de la misma.

De acuerdo a la figura 16 que muestra el diagrama de bandas de energía para la heterounión, es notable que el comportamiento del dispositivo cambia drásticamente si es iluminado desde la parte tipo **n** o desde la parte tipo **p** de la unión. Teóricamente, si la iluminación es inducida desde la parte **n** de la unión, el funcionamiento interno de la celda solar se puede describir de la siguiente manera: la luz es inducida a través de la región del material tipo **n**, cuando esto sucede, se busca que la energía fotónica pase a través

del material, sin ser absorbida, sin embargo, en este caso particular, debido a que el valor de la banda de energía prohibida es menor que el de la parte contraria de la unión, muchas de las partículas fotónicas se aprovechan en la misma región donde la luz es inducida, es decir, se lleva a cabo el proceso de absorción en la misma capa de material que es iluminado, comportamiento que no resulta ser el ideal, ya que se genera un gran número de pares electrón-hueco; si aunado a esto, se toma en cuenta que la longitud de la región de agotamiento del material tipo **n** es mayor, muchos de estos pares electrón-hueco generados, tenderán a recombinarse antes de poder ser aprovechados.

Si se observa también, que el dopamiento de la capa del material tipo **n** es menor que la del tipo **P**, se comprende que muchos portadores se perderán en la recombinación y que, en realidad, el resultado de la eficiencia de la celda, se obtiene de los fotones que pudieron atravesar la región del material tipo **n** y de los electrones que durante la difusión llegaron hasta la región del material tipo **P** y pudieron generar un par electrón-hueco debido al impulso energético del fotón, que en realidad no son la mayoría.

Hipotéticamente y de acuerdo a los cálculos de la heterounión n-TiO₂/P-NiO y a las características de los materiales, la eficiencia de una celda solar iluminada desde la parte tipo **n** resultará en un valor pequeño en comparación con la eficiencia que se puede obtener iluminándola desde la parte del material tipo **P**. Una celda solar de la heterounión n-TiO₂/P-NiO con esta modalidad de iluminación, ha sido fabricada y ha arrojado valores de eficiencia de aproximadamente 2.3% [30] que en realidad, resulta ser una eficiencia pequeña que en teoría puede aumentar si se aprovechan mejor las características de los materiales que la forman; si bien es cierto que se han explicado las razones por las cuales la iluminación de la celda solar es muy importante y que la iluminación desde la región del material tipo **P** resulta favorable, es necesario desmentir esta idea y realizar el análisis experimental para el diseño de la celda solar de heterounión iluminada desde la región **n** de la unión.

2.3.1 Simulación de la heterounión n-TiO₂/P-NiO iluminada desde la parte **n** de la unión.

2.3.1a Selección del espesor de la capa ventana y la capa absorbidora de la heterounión.

En el simulador, la configuración de la celda solar iluminada desde la parte **n** de la unión, es introducida con los valores de la tabla 4; como se menciona en la sección 1.6.2, el espesor de las capas no está incluido debido a que se deben evaluar los mejores parámetros para el espesor de cada uno de los materiales. Tomando en cuenta que el espesor de la capa ventana, que en este caso es el material tipo **n**, debe ser menor que el de la capa absorbidora.

Se realizan distintas simulaciones para evaluar el comportamiento del dispositivo, utilizando para los contactos trasero y delantero, las propiedades eléctricas sugeridas por el simulador, donde el valor que determina al material que los conforma, de acuerdo a la función de trabajo del metal, es seleccionado como el valor que tendría en un funcionamiento de voltaje de bandas planas para que los materiales se compenetren adecuadamente y sean afines en sus propiedades, y así obtener un comportamiento cercano a la idealidad; estos valores, de acuerdo al simulador son, para el contacto trasero 5.26 eV y 4.218 eV para el delantero.

Posterior a la determinación de los parámetros de los materiales, se busca encontrar los espesores adecuados para cada una de las capas, por lo que, en primera instancia, se fija el valor de la capa ventana (TiO_2), y se realiza un aumento paulatino del espesor de la capa del material absorbedor (NiO), iniciando con un valor de 100 nm ($0.1 \mu\text{m}$), hasta 5000 nm ($5 \mu\text{m}$).

Los parámetros seleccionados en relación al espesor de la capa ventana referente al TiO_2 se determinan tomando en cuenta que al modificar el bandgap del compuesto original, absorbe en un mayor rango de la región de luz visible [8], por lo tanto, el valor determinado para la capa ventana inicia con un valor de 25 nm ($0.05 \mu\text{m}$) y concluye con un espesor de 500 nm ($0.5 \mu\text{m}$).

2.3.1b Efecto de la temperatura en el comportamiento de los parámetros de la heterounión.

Una vez encontrados los valores para el espesor de la capa ventana y la capa absorbidora, se procede a realizar la simulación a diferentes temperaturas para observar el cambio en los parámetros principales; de acuerdo al comportamiento típico de una celda solar, el aumento de la temperatura en el sistema origina una disminución en la eficiencia; esto se debe a que la eficiencia depende directamente del factor de llenado, la corriente de corto circuito y el voltaje de circuito abierto (ecuación 7). Al aumentar la temperatura del sistema, se espera que el factor de llenado disminuya debido a un ligero aumento en la corriente y una disminución en el voltaje de circuito abierto como se observa en la figura 20.

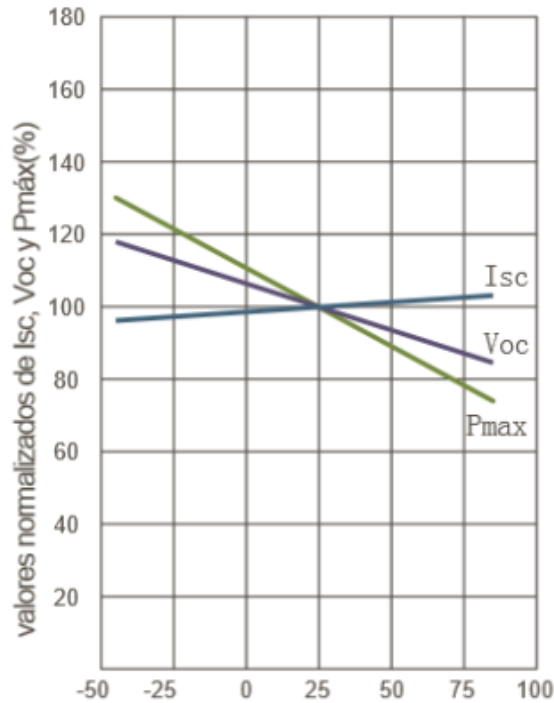


Figura 20. Comportamiento de una celda solar típica, con la variación de temperatura [33].

La figura 20 es útil para comparar el comportamiento de la celda solar simulada, ya que será un indicativo para comprender si el dispositivo propuesto, cumple con el comportamiento normal de una celda solar y de esta manera evaluar su efectividad y la viabilidad de las propiedades que la componen.

2.3.1c Efecto de la función de trabajo del metal en el comportamiento de los parámetros de la heterounión.

Al encontrar el valor de los espesores de la capa ventana y la capa absorbidora, y analizar el efecto de la temperatura en el comportamiento del dispositivo, se procede a analizar el impacto de la función de trabajo del metal en el comportamiento de los parámetros que caracterizan a la heterounión. La función de trabajo se puede definir como la cantidad mínima de energía que necesita el fotón para expulsar al electrón de la superficie de un metal. La tabla 5 muestra diferentes valores de función de trabajo de metales, que son utilizados como contactos frontales y traseros. Los valores de la tabla 5 son valores cercanos a los utilizados en las simulaciones realizadas que son, para el contacto trasero 5.26 eV y para el frontal 4.218 eV, a fin de no tener cambios drásticos en las características originales de la simulación.

Tabla 5. Valores de la función de trabajo para distintos materiales de contacto [34].

Material de contacto		Función de trabajo del metal
Manganeso	Mn	4.1
Aluminio	Al	4.2
Cromo	Cr	4.5
Cobre	Cu	4.6
Plata	Ag	4.7
Hierro	Fe	4.8
Niobio	Nb	4.9
Aleación de cobre-grafito	Cu-graphite alloy	5.0
Oro	Au	5.1
Niquel	Ni	5.5
Platino	Pt	5.7

De acuerdo a los parámetros utilizados en la simulación, el contacto trasero necesita una función de trabajo del metal más alta, es decir, una mayor cantidad de energía para la expulsión del electrón de la superficie del metal que funge como contacto. De esta forma, en la simulación se cambiarán los valores de la función de trabajo de ambos contactos, de manera que se tenga un valor más alto en la función de trabajo del contacto trasero y uno más bajo en el contacto delantero, y de esta forma observar el cambio en los parámetros que caracterizan a la heterounión, para poder seleccionar los contactos que favorezcan a la misma.

Primero se cambiará el valor de la función de trabajo del contacto trasero, dejando fijo el del contacto delantero para estudiar si se obtiene un mejor funcionamiento al disminuir o aumentar el valor de la función de trabajo. Al encontrar el valor con el que se obtenga la mejor eficiencia en el dispositivo, se cambia el valor de la función de trabajo del contacto delantero para que, de igual forma, se estudie si se obtiene una mayor eficiencia del dispositivo al aumentar o disminuir el valor de la misma.

Al concluir estas simulaciones, se habrán encontrado los materiales adecuados para el contacto trasero y delantero de la heterounión, los cuales son también importantes, debido a que, en algunos dispositivos fotovoltaicos, el uso de materiales específicos como contactos, ayudan a que se potencie el funcionamiento de las celdas solares, obteniendo mejoras en su funcionamiento, así como aumento en las capacidades de la misma, reflejadas en el aumento de la eficiencia.

2.3.1d Interfaz de la heterounión.

Al trabajar con una heterounión, se comprende que existen discontinuidades al unir los dos materiales, la sección donde ambos materiales se unen, se denomina interfaz. Estas discontinuidades se presentan debido a la diferencia en los valores de la banda de energía prohibida y la afinidad electrónica. Es importante tomar en cuenta este efecto debido a que, como se observa en el diagrama de bandas de energía de la heterounión (figura 17), hay una barrera que impide que los electrones fluyan de la zona **P** a la zona **n**, dificultando que la región **P** contribuya en la fotocorriente; este efecto puede ser controlado mediante una apropiada combinación de afinidades electrónicas y dopajes. De acuerdo a los cálculos realizados para el diagrama de bandas de energía, existen parámetros importantes que definen el comportamiento de la heterounión, los cuales son: la función de trabajo, la afinidad electrónica y el nivel de la banda de energía prohibida.

Debido a que la heterounión se forma con dos materiales diferentes, es comprensible que sus características físicas y químicas son diferentes; la estructura cristalina de ambos materiales difiere, ya que el TiO_2 , en su forma anatasa, presenta una estructura tetragonal centrada en el cuerpo, mientras que el NiO tiene una estructura cubica centrada en las caras, lo cual origina un desajuste entre las constantes de las dos redes, es decir, en las dimensiones básicas de la construcción de un cristal. Estas dimensiones dependen del arreglo y del tamaño de los átomos; en relación a los radios atómicos de los elementos que forman las estructuras cristalinas, se asume que también existe una diferencia en los valores que las caracterizan, puesto que el radio atómico del Niquel es de 1.62 \AA , mientras que el del Titanio es de 2 \AA [35]. La diferencia entre los radios atómicos de ambos elementos no es muy grande, lo cual presenta una ventaja para acoplar los materiales en la heteroestructura, sin embargo, esta diferencia es suficiente para originar un desajuste al unir ambos materiales, mismos que son observados como defectos, que, al introducirse en el nivel de energía prohibida, pueden actuar como centros de recombinación. En la simulación se puede tomar en cuenta este tipo de fenómenos en la interfaz de la unión de ambos materiales, como una densidad de estados en el nivel de energía prohibida, provocados por el desajuste.

De acuerdo con algunos estudios realizados, estos dos materiales se adaptan de una manera favorable al unirse, ya que, en la interfaz de la heterounión, se genera un campo eléctrico debido a la diferencia en la función de trabajo de los materiales, la cual actúa como una barrera de potencial que minimiza el proceso de recombinación y mejora la separación de las cargas, lo cual favorece a la construcción de la región de agotamiento, en la cual se lleva a cabo el proceso de absorción [23].

Para observar la influencia de la densidad de estados en la interfaz, se cambian los valores de dicho parámetro, agregando la información pertinente en la interfaz de la simulación de la heteroestructura, utilizando los siguientes valores para la densidad de estados en la interfaz: 10^{10} , 10^{11} , 10^{12} , 5×10^{12} , 10^{13} y 5×10^{13} $1/\text{cm}^2$ de acuerdo a la literatura [36]. Para realizar estas simulaciones, se dejan algunos parámetros constantes como la sección transversal de captura de electrones y huecos en $1 \times 10^{-19} \text{cm}^2$ en ambos casos, energía con respecto a la referencia (por encima del nivel de energía prohibida más alto) en 0.6 eV.

Otro tipo de defecto que puede presentarse en la interface, es una sección transversal de captura de electrones y huecos, esto quiere decir, que es probable que las trampas que hay en la interfaz, capturen a los portadores libres. En base a la literatura, se ha encontrado que la repulsión Coulombica disminuye la sección transversal de captura, mientras que la atracción Coulombica entre la trampa y el portador de energía la aumenta. Para observar el cambio que produce la modificación de los parámetros de la sección transversal de captura de electrones y huecos en la simulación se dejan algunos parámetros constantes como la densidad de estados en la interfase en 5×10^{13} $1/\text{cm}^2$, energía con respecto a la referencia (por encima del nivel de energía prohibida más alto) en 0.6 eV, cambiando los parámetros de la sección transversal de captura de electrones y huecos de un rango desde 10^{-17} hasta 10^{-19}cm^2 .

El último parámetro que se puede modificar en los defectos de la interfaz, es el nivel energético de referencia de los defectos; los defectos de nivel profundo se sitúan en la banda de energía prohibida; estos se pueden presentar como impurezas, vacancias, intersticiales, entre otras. En el caso de los óxidos es común que se presenten las vacancias de oxígeno, las cuales son imperfecciones de la red donde se saca a un ion de oxígeno; los átomos vecinos a esta vacancia se deben ajustar a nuevas posiciones de equilibrio por la ausencia de carga negativa y debido a esto, la región de la vacancia se convierte en una región de carga positiva [37]. Es importante tomar en cuenta este tipo de defectos, ya que ambos materiales de la heterounión n-TiO₂/P-NiO, al ser óxidos, tienden a generar vacancias de oxígeno. Con la finalidad de observar el cambio que produce el nivel de referencia de los defectos en la interfaz, se realizan modificaciones de los parámetros en la simulación, dejando constantes los parámetros de la densidad de estados en la interfase en 5×10^{13} $1/\text{cm}^2$, sección transversal de captura de electrones y huecos de un rango desde 10^{-17}cm^2 y de cambia la energía con respecto a la referencia (por encima del nivel de energía prohibida más alto) en un rango desde 0.1 hasta 1.7 eV.

2.4 CELDA SOLAR PARA LA HETEROUNIÓN N-TiO₂/P-NiO ILUMINADA DESDE LA PARTE P DE LA UNIÓN.

A lo largo del desarrollo del estudio de los materiales que conforman a la heterounión, se ha inferido que, al cambiar la forma de iluminación de la celda solar convencional, se obtendrían mejores resultados para el funcionamiento de la heterounión simulada. Conforme a los parámetros de los materiales, la iluminación desde la parte p de la unión, presentaría las características ideales para el funcionamiento de una celda solar, puesto que, en la simulación, la concentración de impurezas en el material tipo P es mayor, así como el nivel de energía prohibida del material, aspectos que se buscan en el material que se ilumina en el dispositivo. Al inducir la iluminación desde la parte **P** de la unión, el funcionamiento interno de la celda solar se puede describir de la siguiente manera: la luz es inducida a través de la región del material tipo P, buscando que la energía fotónica pase a través del material, sin ser absorbida, lo cual es posible, debido a que el valor de la banda de energía prohibida es mayor que el de la parte **n** de la unión. Además, debido a que la concentración de impurezas aceptoras es mayor que la de donadoras, el campo eléctrico se forma prácticamente en el lado del material tipo **n**, lo cual favorece que las partículas fotónicas al difundirse hasta la región **n** de la unión, sean aprovechadas. Este fenómeno también se puede explicar desde el ancho de la región de transición, ya que, al ser más ancha en el material tipo **n**, origina que la longitud de difusión de los portadores sea mayor, disminuyendo la recombinación de los portadores ya que el proceso de absorción se lleva a cabo en un área mayor con una cantidad controlada de portadores, los cuales se pueden absorber de una manera más eficiente.

Acorde a este análisis, la eficiencia de una celda solar iluminada desde la parte tipo **P** debe resultar en un valor de eficiencia mayor que los obtenidos a partir de la iluminación de la celda solar desde el material tipo **n**.

2.4.1 Simulación de la heterounión n-TiO₂/P-NiO iluminada desde la parte **P** de la unión.

2.4.1a Selección del espesor de la capa ventana y la capa absorbidora de la heterounión.

En el simulador, la configuración de la celda solar iluminada desde la parte **P** de la unión, es introducida con los valores de la tabla 4; se debe tomar en cuenta que el espesor de la capa ventana debe ser menor que el de la capa absorbidora, por lo tanto, la capa del material tipo **P** debe ser más delgada que la de tipo **n**.

Con la finalidad de realizar una comparación de los dispositivos, en relación a la forma de iluminación que se trabaja, se parte de la comparación de la celda solar iluminada desde la parte del material tipo **P**, con los espesores en los cuales se encontró el mejor funcionamiento de la celda solar iluminada desde la parte del material tipo **n**; estos espesores son: para la capa ventana 275 nm y para la capa absorbidora 1400 nm. Al comparar los resultados de ambas simulaciones, se podrá observar la diferencia que existe en el funcionamiento de la celda solar, para encontrar la forma más adecuada de iluminación. En estas simulaciones, se utilizan para los contactos trasero y delantero, las propiedades eléctricas sugeridas por el simulador, el cual es seleccionado como el valor que tendría en un funcionamiento de voltaje de bandas planas para que los materiales se acoplen de manera favorable; estos valores, de acuerdo al simulador son, para el contacto trasero 5.26 eV y 4.218 eV para el delantero, es decir, se tienen los mismos parámetros que en la iluminación desde la parte **n** de la unión, antes de la selección de los materiales de contacto.

Posteriormente, se buscan los espesores adecuados para cada una de las capas que forman a la celda solar, por lo que se procede, en primera instancia, en fijar el valor de la capa ventana (NiO), realizar un aumento paulatino del espesor de la capa del material absorbedor (TiO₂), iniciando con un valor de 100 nm (0.1 μm), hasta 5000 nm (5 μm).

Los parámetros seleccionados en relación al espesor de la capa ventana referente al NiO se determinan tomando en cuenta que esta capa debe tener un menor espesor, por lo tanto, al encontrar el valor ideal para el espesor de la capa absorbidora, se busca el valor adecuado de la capa ventana, realizando simulaciones que inician con un valor de 25 nm (0.025 μm) y concluyen con un espesor de 500 nm (0.5 μm).

2.4.1b Efecto de la temperatura en el comportamiento de los parámetros de la heterounión

Una vez encontrados los valores para el espesor de la capa ventana y la capa absorbidora, se realizan simulaciones a diferentes temperaturas para observar el cambio en los parámetros principales; en base a la figura 20, al aumentar la temperatura en el sistema, se genera una disminución en la eficiencia y en el factor de llenado. Al igual que se realizó con la celda solar iluminada desde la parte **n** de la unión, los resultados de los cambios de la celda solar bajo diferentes temperaturas de trabajo, serán comparadas con la figura 20, para comprender si el dispositivo cumple con el comportamiento normal de una celda solar, a fin de evaluar su efectividad y la viabilidad del diseño de la propuesta de una celda solar iluminada desde la parte **P** de la unión.

2.4.1c Efecto de la función de trabajo del metal en el comportamiento de los parámetros de la heterounión.

Como se explicó anteriormente, es importante analizar el impacto de la función de trabajo del metal en el comportamiento de los parámetros que caracterizan a la heterounión, para esto, se utilizan los valores de la tabla 5, a fin de encontrar los materiales que potencialicen el funcionamiento de la celda solar. Dado que, los valores de la función de trabajo para el contacto delantero y trasero que se han utilizado son 5.26 y 4.218 eV de forma correspondiente, se buscan factores cercanos a estos valores para tener ligeros cambios en las características originales de la simulación.

Debido al cambio en la inducción de la luz, para la celda solar iluminada desde la parte del material tipo **P**, el contacto frontal necesita una función de trabajo del metal más alta. De esta forma, en la simulación se cambiarán los valores de la función de trabajo de ambos contactos, para observar el cambio en los parámetros que caracterizan a la heterounión y seleccionar adecuadamente el material de los contactos.

Para la realización de las simulaciones, se cambiará el valor de la función de trabajo del contacto frontal, dejando fijo el del contacto trasero para estudiar si la disminución o el aumento del valor de la función de trabajo favorece al dispositivo. Al encontrar el valor con el que se obtenga la mejor eficiencia, se procede a cambiar el valor de la función de trabajo del contacto trasero para que, de igual forma, se estudie si se obtiene una mayor eficiencia al aumentar o disminuir el valor de la misma.

Al concluir estas simulaciones, se habrán encontrado los materiales adecuados para el contacto trasero y delantero de la heterounión, para favorecer el funcionamiento de la celda solar al mejorar su funcionamiento.

2.4.1d Interfaz de la heterounión.

Debido a las discontinuidades al unir los dos materiales, es importante tomar en cuenta este efecto como se realizó para el material tipo **n**, ya que es comprensible que las características físicas y químicas de los materiales de la heterounión son diferentes;

Para observar la influencia de la densidad de estados en la interfaz, se cambian los valores de dicho parámetro, agregando la información pertinente en la interfaz de la simulación de la heteroestructura, utilizando los siguientes valores para la densidad de estados en la interfaz: 10^{10} , 10^{11} , 10^{12} , 5×10^{12} , 10^{13} y 5×10^{13} $1/\text{cm}^2$. Para realizar estas simulaciones, se dejan algunos parámetros constantes como la sección

transversal de captura de electrones y huecos en $1 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$ en ambos casos, energía con respecto a la referencia (por encima del nivel de energía prohibida más alto) en 0.6 eV.

Posteriormente se toman en cuenta los defectos que pueden presentarse en una sección transversal de captura de electrones y huecos, esto quiere decir, que es probable que las trampas que hay en la interfaz, capturen a los portadores libres. Para observar el cambio que produce la modificación de los parámetros de la sección transversal de captura de electrones y huecos en la simulación se dejan algunos parámetros constantes como la densidad de estados en la interfase en $5 \times 10^{13} \text{ 1/cm}^2$, energía con respecto a la referencia (por encima del nivel de energía prohibida más alto) en 0.6 eV, cambiando los parámetros de la sección transversal de captura de electrones y huecos de un rango desde 10^{-17} hasta 10^{-19} cm^2 .

El último parámetro que se puede modificar en los defectos de la interfaz, es el nivel energético de referencia de los defectos; con la finalidad de observar el cambio que produce el nivel de referencia de los defectos en la interfaz, se realizan modificaciones de los parámetros en la simulación, dejando constantes los parámetros de la densidad de estados en la interfase en $5 \times 10^{13} \text{ 1/cm}^2$, sección transversal de captura de electrones y huecos de un rango desde 10^{-17} cm^2 y de cambia la energía con respecto a la referencia (por encima del nivel de energía prohibida más alto) en un rango desde 0.1 hasta 1.7 eV.

CAPÍTULO 3

RESULTADOS

3.1 Resultados de la simulación de la heterounión n-TiO₂/P-NiO iluminada desde la parte n de la unión.

3.1a Resultados de la modificación del espesor de la capa ventana y la capa absorbadora y los efectos que se producen en los parámetros que caracterizan a la heterounión.

En la figura 21 se observa el comportamiento de la eficiencia al mantener valores fijos de la capa ventana (TiO₂), variando el espesor de la capa absorbadora (NiO). Se observa en primera instancia que, a pesar de que el planteamiento original fue realizar simulaciones donde el espesor de la capa absorbadora (NiO) tuviera una variación desde 100 nm hasta 5000 nm, no fue posible obtener todos los resultados, ya que, en ninguna de las simulaciones realizadas, se pudo utilizar un espesor para la película absorbadora que rebasara los 3000 nm (3 μ m); es por esto que tanto en la figura 21 los parámetros del espesor de la película absorbadora llegan hasta este valor.

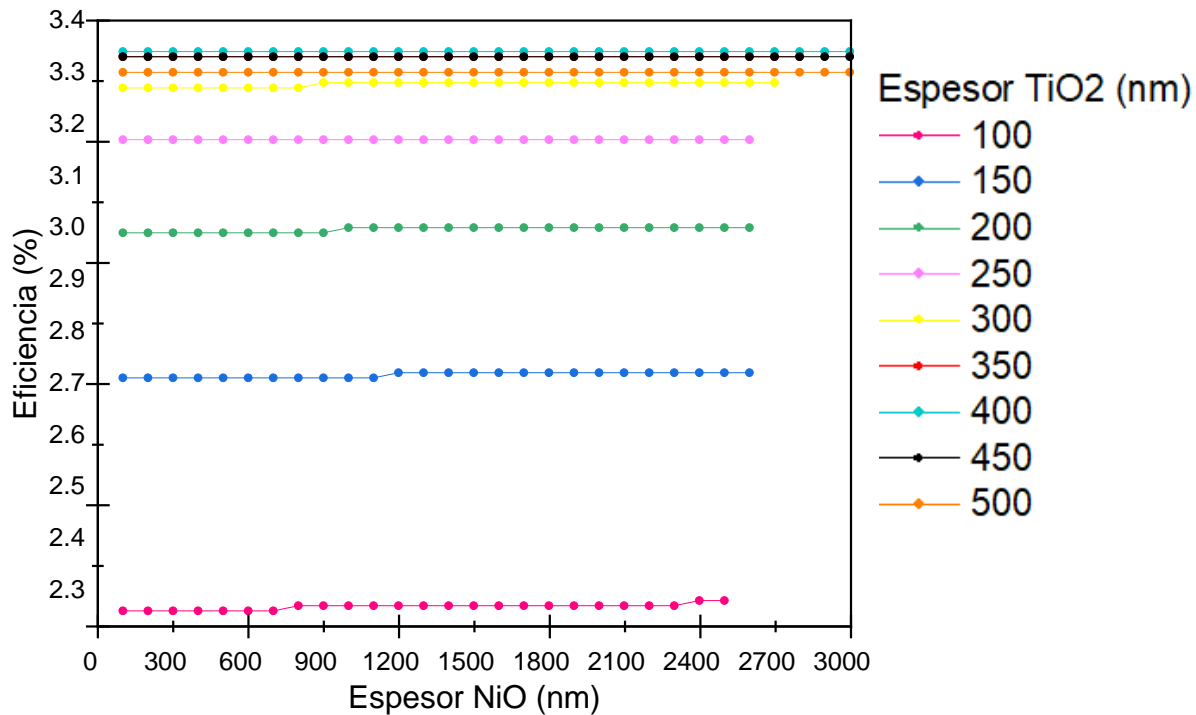


Figura 21. Comportamiento de la eficiencia de la celda solar de heterounión n-TiO₂/P-NiO, iluminada desde la parte n de la unión, manteniendo un espesor fijo de la capa ventana, variando el espesor de la capa absorbadora.

En la figura 21 aparecen en la parte derecha los espesores de la capa ventana, y se observa el cambio de la eficiencia en cada uno, al aumentar el espesor de la capa absorbedora; de acuerdo a los resultados obtenidos en la simulación, el estudio inicia en un parámetro de 25 nm, sin embargo, es hasta un espesor de 100 nm cuando la simulación arroja resultados factibles y se puede realizar el estudio adecuadamente al aumentar el espesor de la capa absorbedora, de manera que, cuando el espesor de la capa ventana es menor a 100 nm, el espesor de la capa absorbedora no puede rebasar los 2000 nm, lo cual convierte a los parámetros menores a este espesor para la capa ventana, en opciones poco viables para ser seleccionados como parámetros efectivos, además de que presenta una eficiencia muy baja en comparación con los otros espesores analizados.

A partir de 100 nm de espesor de la capa ventana, la eficiencia prácticamente se duplica. Esto se puede relacionar con los parámetros calculados en la sección 2.1, ya que de acuerdo al cálculo del ancho de la región de transición, se obtiene un resultado de 100 nm aproximadamente, y se observa que precisamente a partir de este parámetro de espesor de la capa ventana, se obtiene una mejor eficiencia con ligeros aumentos en simulaciones posteriores donde se aumenta el espesor de dicha capa, comprendiendo que el fenómeno de absorción se realiza adecuadamente en valores de espesor desde 100 hasta 400 nm, parámetro a partir de cual se observa una disminución en la eficiencia del dispositivo.

De acuerdo a la literatura, como se menciona en la sección 2.2, una celda solar fabricada a partir de esta heterounión, ha arrojado una eficiencia de 2.3% [30], que si bien es cierto, no es un valor tan relevante, si puede servir para analizar los resultados obtenidos en la simulación, ya que se encuentra que uno de los valores de la eficiencia para una celda solar, con un espesor de la capa ventana (TiO_2) de 100 nm y de la capa absorbedora (NiO) de 2500 nm es de 2.28%, parámetro que es muy cercano al resultado obtenido en la celda solar fabricada, lo cual refleja que en efecto, a partir de este parámetro de espesor, la simulación arroja valores viables para el diseño de la misma.

En base a la simulación de una capa ventana de 250 nm, la eficiencia de la celda aumenta muy poco, ya que pasa de un valor de eficiencia de 3.17 a 3.34; en tres espesores diferentes que son 375, 400 y 425 nm, la eficiencia tiene un comportamiento constante y es precisamente en estos valores, donde se presenta el máximo valor de eficiencia de 3.34%. Cuando el espesor de la capa ventana es de 400 nm, la celda solar empieza a presentar discontinuidades en su comportamiento, ya que la eficiencia para los valores de espesor subsecuentes, disminuye gradualmente como se observa en la figura 21; por lo tanto, en estos valores de espesor, la celda solar se vuelve inestable, comprobando que, cuando la región del material tipo n es ancha, la longitud de difusión de los portadores aumenta, lo que ocasiona que muchos portadores

no logren llegar hasta la región **P** de la unión, recombinándose en la región **n**; además, si se toma en cuenta que el máximo de absorción del material TiO_2 es de 500 nm, se comprende que a partir de un valor de 400 nm de espesor, la celda solar presente deficiencias para aprovechar a los portadores, lo cual ocasiona una disminución en la eficiencia del dispositivo.

Si bien es cierto que en la simulación de los tres espesores, se obtiene la misma eficiencia, observar los cambios de los valores de la densidad de corriente de corto circuito, es de suma importancia, ya que representa la corriente máxima que puede producir una celda solar y está directamente relacionada con la generación y la recolección de portadores de carga que se generan en el dispositivo, por lo tanto, se espera que el dispositivo diseñado tenga un aumento gradual de dicha corriente para tener la mayor potencia en la celda solar.

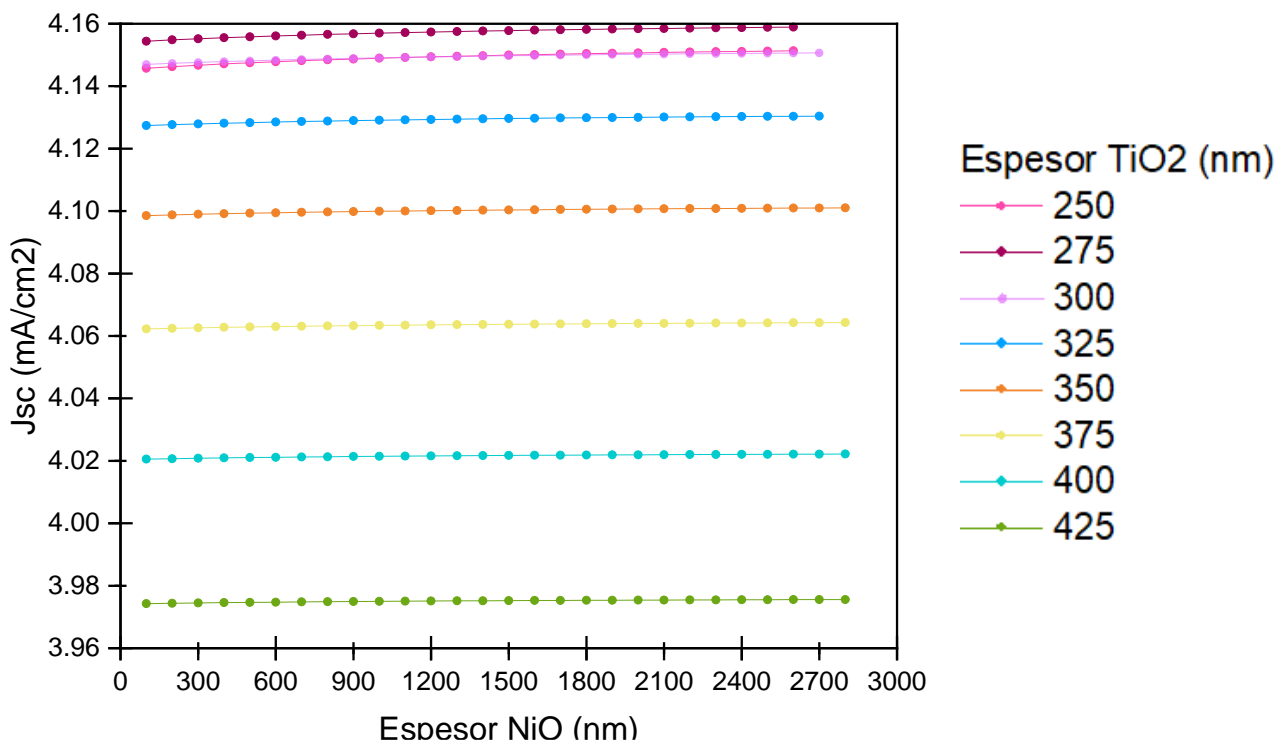


Figura 22. Comportamiento de la densidad de corriente de corto circuito de la celda solar de heterounión n- TiO_2 /p-NiO, iluminada desde la parte n de la unión, presentando diferentes valores de espesor de TiO_2 .

La figura 22 muestra la densidad de corriente de corto circuito para los espesores de la capa ventana que resultan factibles para el diseño de la celda solar. De acuerdo al funcionamiento de la celda, se busca un valor alto de la densidad de corriente de corto circuito para tener una mayor potencia en el dispositivo; los valores que aparecen en la figura 22 que reflejan la mayor eficiencia son los referentes a un espesor

de la capa ventana de 375, 400 y 425 nm, sin embargo, al observar el comportamiento de la densidad de corriente de corto circuito, no resultan del todo adecuados, ya que a partir del espesor de la capa ventana de 300 nm, este parámetro empieza a disminuir gradualmente hasta tener el menor valor en un parámetro de 500 nm de espesor, donde también se refleja una disminución en la eficiencia de acuerdo a la figura 22; debido a esto se puede asumir que el espesor adecuado de la capa ventana tiene un valor máximo de 300 nm.

Con el factor de llenado sucede algo relacionado con los parámetros descartados anteriormente para el espesor de la capa ventana, ya que el valor de FF muestra una disminución al aumentar paulatinamente el espesor de la capa ventana desde 25 nm, hasta un espesor de 100 nm, empieza a aumentar al mismo tiempo que se realiza el aumento del espesor de la capa ventana, demostrado que la relación entre la corriente y el voltaje a valores de espesor menores a 100 nm, no es adecuada, debido a que los parámetros de corriente-voltaje juegan un papel importante para determinar también la efectividad de la celda solar; realizando un enfoque a los cambios del FF a partir de un espesor para la capa ventana de 100 nm, de acuerdo a los resultados de las simulaciones. Se puede observar que el Factor de llenado disminuye al aumentar el espesor de la capa absorbadora, hasta que se estableció en la simulación un espesor de la capa ventana de 175 nm, donde el FF empieza a mostrar pocos cambios, es decir, los parámetros resultantes de FF al aumentar el espesor de la capa absorbadora, no cambian, o aumentan en cantidad mínima; por lo tanto, se estima que el parámetro más adecuado para la capa ventana, tiene un valor de entre 175 y 300 nm.

Cabe resaltar que, en todas las simulaciones realizadas, el cambio de la eficiencia en relación al aumento en el espesor de la capa absorbadora (NiO) fue muy poco notable, lo cual refleja a un material muy estable donde no es necesario realizar un aumento drástico en el espesor de la capa absorbadora (material P- NiO); en este sentido, de acuerdo a la figura 23, se puede observar que el aumento paulatino del espesor de dicha capa no presenta cambios drásticos en el comportamiento del sistema; por el contrario, a pesar del aumento del espesor de la capa absorbadora, el material mantiene su eficiencia, que es más bien determinada por el espesor de la capa ventana debido a que la región de agotamiento, de acuerdo a los cálculos, predomina en esta; los parámetros que aparecen en la figura 23, relacionados con el espesor de NiO (capa absorbadora), señalan que a partir de un espesor de 1900 nm, las simulaciones empiezan a arrojar errores con distintos espesores de la capa ventana. Debido a los resultados, se determina que en la región p de la unión, la longitud de difusión de los portadores a valores mayores a 1900 nm es tan grande, que al tener un espesor de la capa ventana mucho menor, los portadores se recombinan antes de poder ser aprovechados; por lo tanto, se debe seleccionar un espesor para la capa absorbadora, donde el fenómeno

de absorción se lleve a cabo de manera adecuada; prueba de este fenómeno es que, al tener un espesor para la capa absorbidora de 3000 nm, la simulación no se lleva a cabo a menos que el espesor de la capa absorbidora sea mayor o igual a 375 nm, aun cuando la eficiencia de esta muestra una disminución.

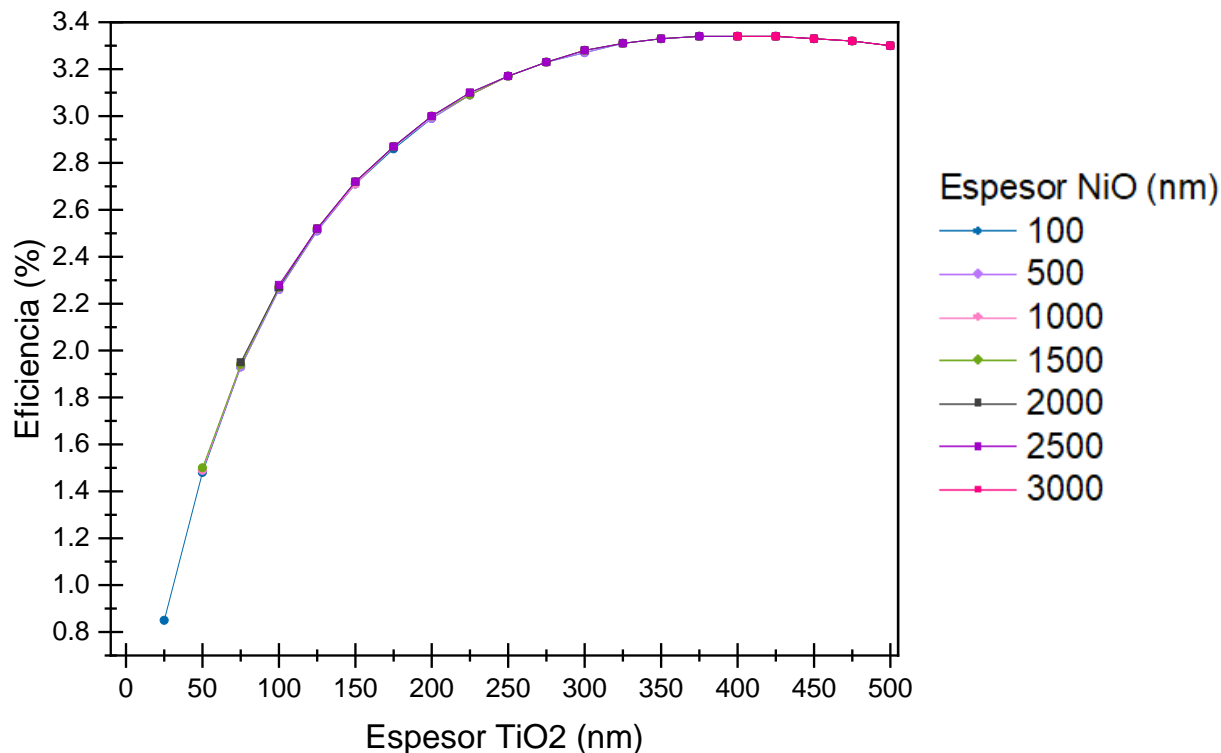


Figura 23. Comportamiento de la eficiencia de la celda solar de heterounión n-TiO₂/P-NiO, iluminada desde la parte n de la unión, en relación al aumento del espesor de la capa absorbidora.

Debido a los resultados obtenidos, se determina que el espesor más importante a tomar en cuenta para el diseño de la celda solar, es el de la capa ventana de la heterounión n-TiO₂/P-NiO, el cual corresponde a un valor de 275 nm (ver figura 21), donde si bien es cierto no se registra la mayor eficiencia de acuerdo a la simulación, si mantiene un aumento adecuado de la densidad de corriente de corto circuito y de factor de llenado; además, la eficiencia no se encuentra muy por debajo de la eficiencia máxima registrada, ya que en promedio, se obtiene una eficiencia de 3.23%, que es mayor al de la celda fabricada [3]. Para determinar el espesor de la capa absorbidora, se debe tomar en cuenta que a partir de valores de 1900 nm, la celda solar necesita de espesores mayores en la capa ventana, lo cual permite que el fenómeno de absorción se lleve a cabo, sin embargo muestra una disminución en la eficiencia del dispositivo; tomando en cuenta que la capa a través de la cual incide la luz, debe ser más delgada y en teoría, debería tener un mayor dopamiento, habiendo seleccionado un espesor de la capa ventana de 275 nm, el espesor de la capa

absorbedora debe tener un espesor de por lo menos 300 nm y de acuerdo a la simulación, el dispositivo puede funcionar adecuadamente hasta un valor de 1900 nm.

Con la finalidad de analizar adecuadamente los cambios que ocurren en los parámetros de la celda solar fijando el espesor de la capa ventana en 275 nm, aumentando paulatinamente el espesor de la capa absorbadora, para seleccionar el espesor adecuado de dicha capa, se observan los resultados de la simulación con el valor mencionado para el espesor de la capa ventana y espesores de la capa absorbadora con un rango de valores de entre 300 y 1900 nm, los cuales son muy estables y tienen variaciones mínimas en relación a los parámetros de la eficiencia; de igual forma, los parámetros de la densidad de corriente muestran valores un poco más altos, al aumentar el espesor de la capa absorbadora; sin embargo el factor de llenado disminuye, lo cual señala un problema que puede afectar negativamente la relación entre la corriente y el voltaje de la celda solar al aumentar el espesor de la capa absorbadora. Los valores obtenidos en la simulación con un espesor fijo de 275 nm para la capa ventana, variando el espesor de la capa absorbadora, se observan en la tabla .6

Tabla 6. Resultados de las simulaciones realizadas para la heterounión n-TiO₂/p-NiO con un espesor fijo para la capa ventana (TiO₂) de 275 nm, variando el espesor de la capa absorbadora (NiO).

Espesor NiO (nm)	Voc (V)	Jsc (mA/cm²)	FF (%)	η (%)
300	1.3341	4.1552	58.00	3.22
400	1.3341	4.1555	58.00	3.22
500	1.3396	4.1558	58.01	3.22
600	1.3396	4.1561	58.01	3.22
700	1.3396	4.1563	58.01	3.22
800	1.3397	4.1566	58.01	3.22
900	1.3397	4.1568	58.01	3.22
1000	1.3397	4.1570	58.01	3.22
1100	1.3397	4.1572	58.01	3.22
1200	1.3397	4.1574	58.01	3.23
1300	1.3397	4.1575	58.01	3.23
1400	1.3398	4.1577	58.01	3.23
1500	1.3398	4.1578	58.02	3.23
1600	1.3398	4.1579	58.02	3.23
1700	1.3398	4.1581	58.02	3.23
1800	1.3398	4.1582	58.02	3.23
1900	1.3398	4.1583	58.02	3.23

Como se observa en la tabla 6, el valor del voltaje de circuito abierto y el de la densidad de corriente en corto circuito, aumentan paulatinamente; de igual forma, el factor de llenado aumenta de manera mínima. Si bien es cierto que la eficiencia muestra un ligero aumento, el hecho de que el factor de llenado tenga un ligero aumento, plantea que la relación es adecuada entre los parámetros de corriente-voltaje, lo cual indica que el funcionamiento del dispositivo es bueno a mayores valores de espesor para la capa absorbedora; a partir de un espesor de 1200 nm, la eficiencia de la celda solar, aumenta ligeramente y se mantiene constante en el dispositivo hasta valores de mayor espesor para la capa absorbedora. En el valor de espesor de 1400 nm para la capa absorbedora, el factor de llenado aumenta de forma mínima al igual que el voltaje de circuito abierto y la densidad de corriente de corto circuito, además el valor de la eficiencia se encuentra en un punto de estabilidad, por lo que, en realidad, si se busca llevar esta celda de heterounión a la forma práctica, se comprende que no es necesario tener un mayor espesor para la capa absorbedora; por lo tanto, un espesor de 1400 nm para la capa absorbedora es suficiente para aprovechar adecuadamente los factores de simulación, de manera que se tiene un punto adecuado de factor de llenado, con la eficiencia más alta posible cuando la capa ventana tiene un espesor de 275 nm.

En relación al análisis realizado, se plantea que los espesores adecuados para la capa ventana ($n\text{-TiO}_2$) y para la capa absorbedora ($P\text{-NiO}$) son de 275 y 1400 nm de manera correspondiente; mediante los espesores seleccionados, se obtiene el gráfico que se observa en la figura 24, de la curva J-V para la celda solar, así como los parámetros importantes obtenidos a partir de esta que se encuentran en la tabla 7.

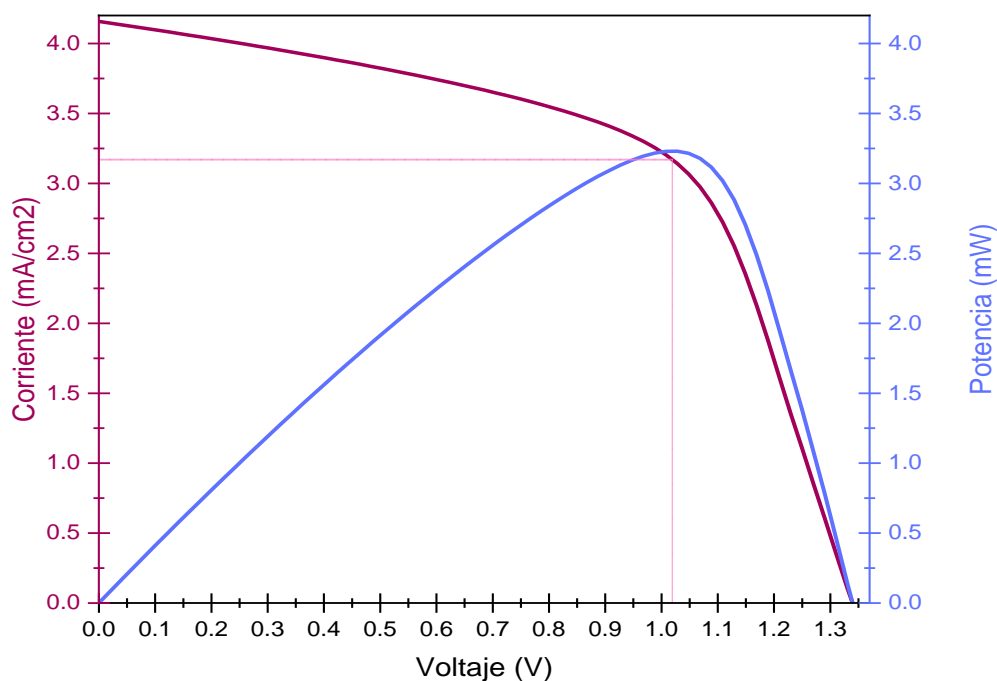


Figura 24. Curva característica J-V y V-P para los espesores adecuados obtenidos.

Tabla 7. Resumen de parámetros obtenidos

Parámetros obtenidos de la curva J-V	
V_{oc}	1.34 V
J_{sc}	4.16 mA/cm ²
FF	58.01 %
η	3.23 %
V_M	1.02 V
J_M	3.17 mA/cm ²
P	3.23 mW

Con los mismos parámetros de espesor, se obtuvo la figura 25, que ilustra a la curva en la oscuridad; en dicha figura, se observa que el comportamiento que tiene el dispositivo en la oscuridad corresponde al de un diodo, carácter distintivo en los dispositivos fotovoltaicos.

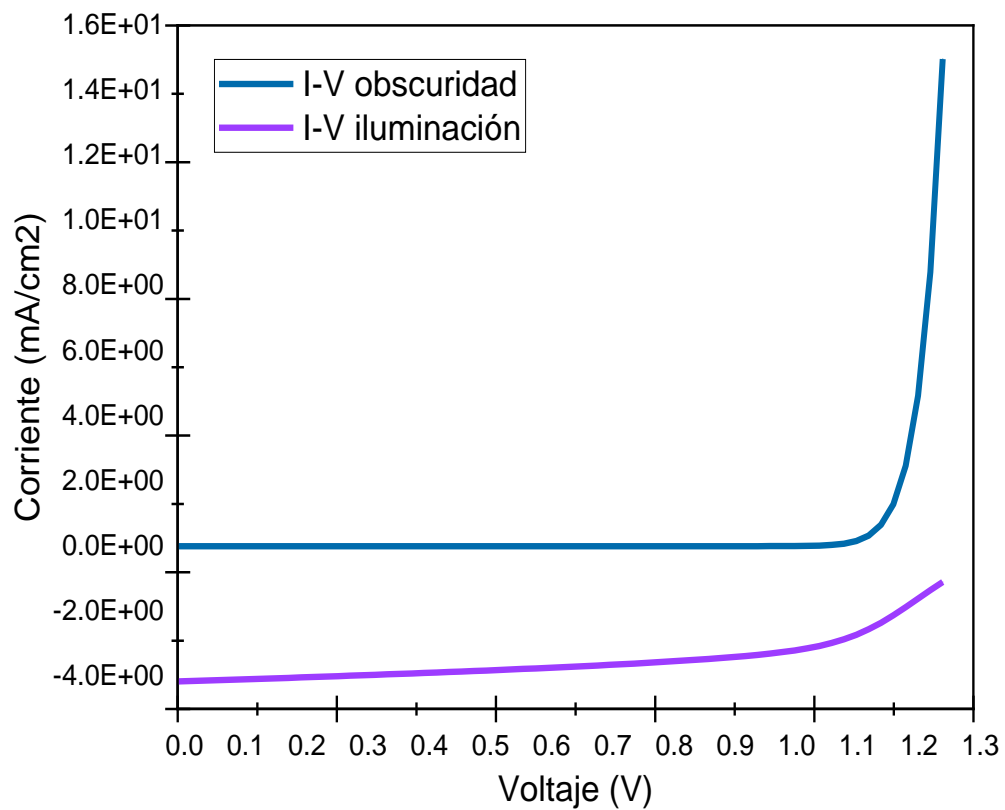


Figura 25. Curva característica J-V en oscuridad (azul) y en iluminación (morado)

3.1b Resultados de la modificación de la temperatura y sus efectos en los parámetros que caracterizan a la heterounión.

El cambio del comportamiento de los parámetros del dispositivo cuando se modifica la temperatura, se puede observar en las figuras 26 y 26.A. Los resultados obtenidos a partir de la simulación del dispositivo al modificar la temperatura, se reportan en la tabla 8.

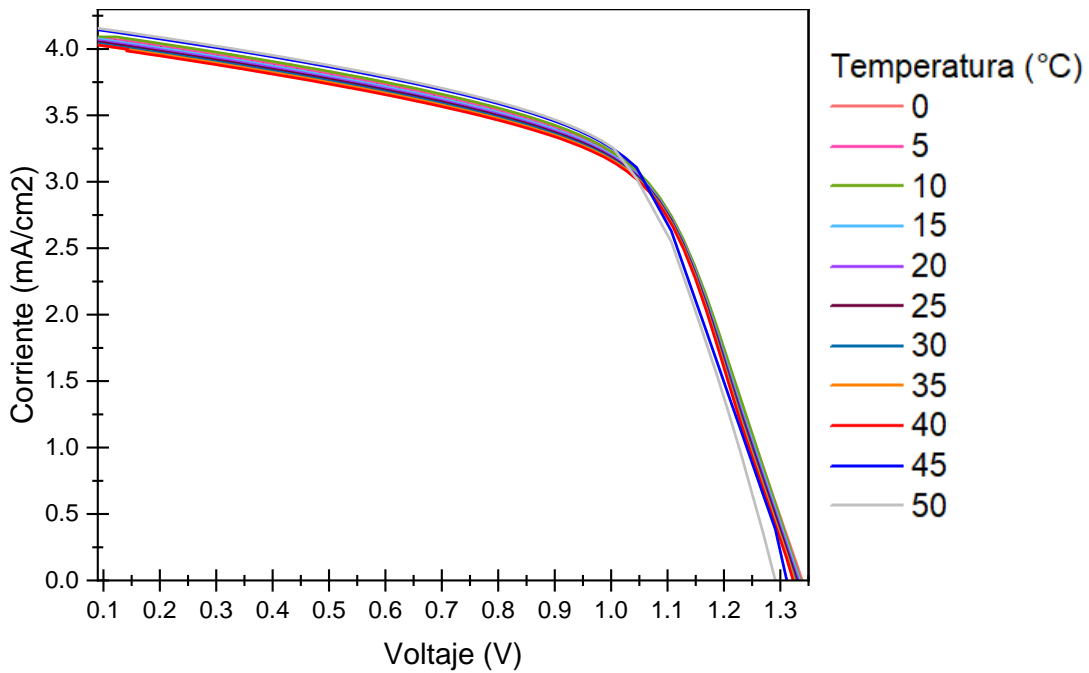


Figura 26. Curvas características J-V a diferentes parámetros de temperatura

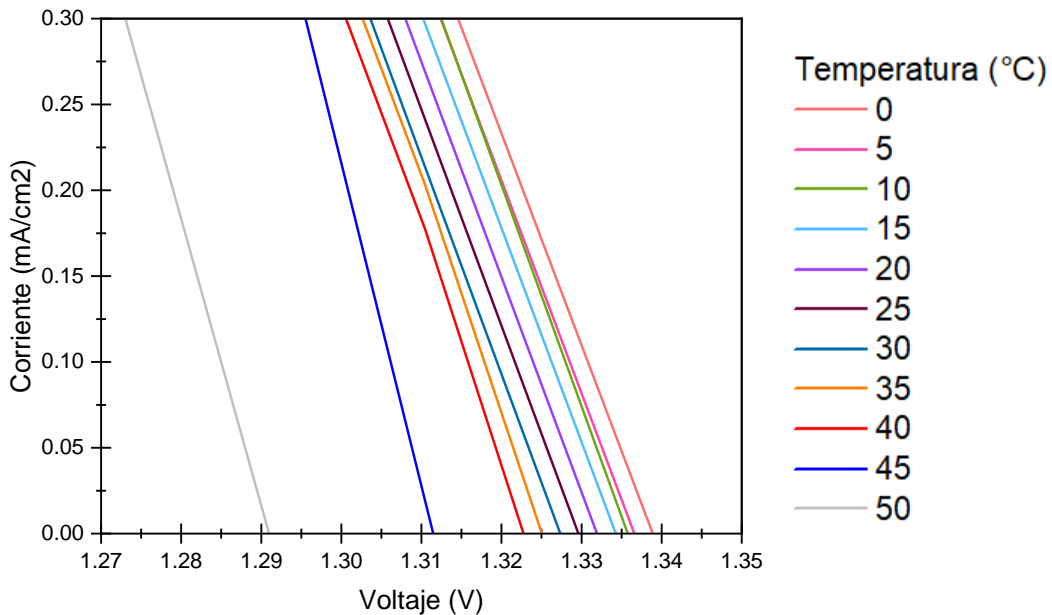


Figura 26.A. Acercamiento de las curvas características J-V referente al voltaje de circuito abierto a diferentes parámetros de temperatura.

Tabla 8. Resumen de parámetros obtenidos al modificar la temperatura del dispositivo

Resultados obtenidos de las curvas J-V al modificar la temperatura					
Temperatura (°C)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm²)	FF (%)	η (%)	P_{max} (mW)
0	1.3389	4.0717	59.22	3.27	3.27
5	1.3366	4.0835	58.99	3.27	3.27
10	1.3358	4.0953	58.75	3.26	3.26
15	1.3343	4.1072	58.59	3.25	3.25
20	1.3319	4.1189	58.37	3.25	3.25
25	1.3296	4.1305	58.26	3.24	3.24
30	1.3274	4.1420	57.92	3.22	3.22
35	1.3250	4.1535	57.70	3.21	3.21
40	1.3227	4.1648	57.47	3.20	3.20
45	1.3115	4.1761	57.43	3.19	3.19
50	1.2910	4.1874	57.42	3.18	3.18

De acuerdo a la figura 20, el comportamiento típico de una celda solar cuando se modifica la temperatura es regido en relación al aumento de temperatura, ya que, a mayor temperatura, hay una disminución en el voltaje de circuito abierto, un pequeño aumento en la corriente de corto circuito, esto se debe a que el voltaje de circuito abierto es inversamente proporcional a la corriente de corto circuito o corriente de saturación, la cual sufre un aumento debido a que al aumentar la temperatura, aumenta la concentración intrínseca de portadores ya que esta depende de la temperatura como se observa en la ecuación 2, por otro lado, el aumento de temperatura también origina una disminución gradual de la potencia máxima. Si se observa la figura 26.A, es notable que cuando aumenta la temperatura, efectivamente el voltaje de circuito abierto disminuye; de acuerdo a la tabla 9, al aumentar la temperatura hay un ligero aumento de la corriente de corto circuito así como una disminución gradual de la potencia máxima; por lo tanto, si se compara el comportamiento de la celda solar simulada, con una celda solar típica, se puede inferir que el comportamiento que tiene al aumentar la temperatura, es un comportamiento normal, que convierte al dispositivo simulado, en un dispositivo factible, con parámetros adecuados de diseño que se rigen bajo la física típica de una celda solar.

3.1c Resultados de la modificación de la función de trabajo de los contactos trasero y delantero y sus efectos en los parámetros que caracterizan a la heterounión.

En la tabla 9, se muestran los resultados obtenidos en la simulación al fijar el valor de la función de trabajo del contacto delantero, en 4.218 eV (función de bandas planas), el cual se utilizó para las simulaciones anteriores, cambiando el valor de la función de trabajo del contacto trasero, el cual, para simulaciones anteriores, tenía un valor de 5.26 eV.

Tabla 9. Resumen de los valores obtenidos al modificar la función de trabajo del contacto trasero, dejando como constante una función de trabajo del contacto delantero en 4.128 eV.

Material de contacto	Función de trabajo del metal (eV)	Voc (V)	Jsc (mA/cm²)	FF (%)	η (%)
Cobre	4.6	1.2988	4.0839	54.09	2.87
Plata	4.7	1.3467	4.1390	56.46	3.15
Hierro	4.8	1.3398	4.1568	57.96	3.23
Nb	4.9	1.3397	4.1576	58.01	3.23
Cu-graphite alloy	5.0	1.3397	4.1576	58.01	3.23
Au	5.1	1.3397	4.1576	58.01	3.23

Al modificar los valores de la función de trabajo del contacto trasero, se encontraron resultados al aumentar dicho valor hasta 5.3 eV; a partir de este valor, la simulación arroja automáticamente un error, y no fue posible aumentar el valor del contacto trasero para simular Níquel o Platino. Al tener un valor de 4.6 y 4.7 eV, la eficiencia se encuentra en su valor más bajo, por lo tanto, un valor de función de trabajo que es en general menor en comparación con el valor original no es lo más adecuado. A partir de una función de trabajo de 4.8 eV, la eficiencia en el sistema se comporta de manera estable, y realmente los valores de los resultados que caracterizan a la heterounión no aumentaron de forma drástica, en relación a los valores obtenidos originalmente, ya que si se realiza una comparación con la tabla 8, los valores se mantuvieron estables; por lo tanto, se puede comprender que no se necesita utilizar un metal como el oro para el contacto trasero, que si se utiliza en la fabricación real, resultaría en un valor económico más elevado y en realidad no se obtendría ningún beneficio adicional; debido a esto, se utilizará al Hierro como contacto trasero con una función de trabajo de 4.8 eV.

A partir de la modificación del valor de la función de trabajo del contacto trasero, se fija como un valor constante, y se modifica la función de trabajo del contacto frontal, obteniendo los resultados de la tabla 10.

Tabla 10. Resumen de los valores obtenidos al modificar la función de trabajo del contacto frontal, dejando como constante una función de trabajo del contacto trasero de 4.8 eV, perteneciente al Hierro.

Material de contacto	Función de trabajo del metal (eV)	Voc (V)	Jsc (mA/cm²)	FF (%)	η (%)
Manganeso	4.1	1.7764	5.956730	63.98	6.77
Aluminio	4.2	1.3481	4.593477	60.66	3.76
Cromo	4.5	1.3467	2.740858	51.46	1.90

En los resultados se puede observar que, al disminuir la función de trabajo del material, la eficiencia aumenta, mientras que cuando aumenta el valor de la función de trabajo del metal, la eficiencia disminuye. Cuando el valor de la función de trabajo para el contacto frontal es de 4.1 eV la eficiencia aumenta significativamente, al igual que el voltaje de circuito abierto y la corriente de corto circuito; este comportamiento es cuestionable, ya que el voltaje de circuito abierto es inversamente proporcional a la corriente de corto circuito o corriente de saturación, por lo tanto, el aumento de ambas no es un comportamiento normal del dispositivo; por otro lado, al realizar la simulación con este valor, los resultados para la corriente son valores muy altos que no tienen una disminución gradual ya que arrojan valores aproximados desde 5.95 mA/cm² que es el valor de la corriente de saturación, disminuyendo únicamente hasta 5 mA/cm², valor en el cual no se puede encontrar el voltaje de circuito abierto. Estas inconsistencias en los resultados demuestran que la simulación con este parámetro si puede ser realizada, pero los resultados no son factibles y por lo tanto se deben descartar.

Cuando la función de trabajo para el contacto frontal es de 4.2 eV, es decir, que ha disminuido muy poco en realidad, en relación a la función de trabajo con la que se realizaron las simulaciones anteriores (4.218 eV), los resultados son mucho más factibles y adecuados, además de que reflejan un aumento en la eficiencia del dispositivo; esta función de trabajo corresponde al aluminio y al analizar la relación I-V, el comportamiento es adecuado y los valores resultantes permiten la determinación de todos los parámetros que determinan a la celda solar.

En relación a los resultados de las simulaciones, se determina efectivamente el material de los contactos de la celda solar, el contacto trasero es de Hierro con una función de trabajo de 4.8 eV y el frontal es de Aluminio, con una función de trabajo de 4.2 eV. A partir de la determinación del material de los contactos de la celda solar, se genera una nueva gráfica I-V mostrada en la figura 27, en la cual se pueden determinar los parámetros característicos más importantes de la celda solar, los cuales se muestran en la tabla 11.

Al analizar los resultados de la simulación, se puede inferir que el material de los contactos si tiene un efecto importante en la eficiencia del dispositivo, ya que, al cambiar los valores de la función de trabajo, el dispositivo reportó una mayor eficiencia; también la relación que existe entre los parámetros de corriente-voltaje es mejor, puesto que el factor de llenado aumentó y con este aumentó también la potencia, por lo tanto, es importante tomar en cuenta los contactos en la realización de la simulación de celdas solares en general.

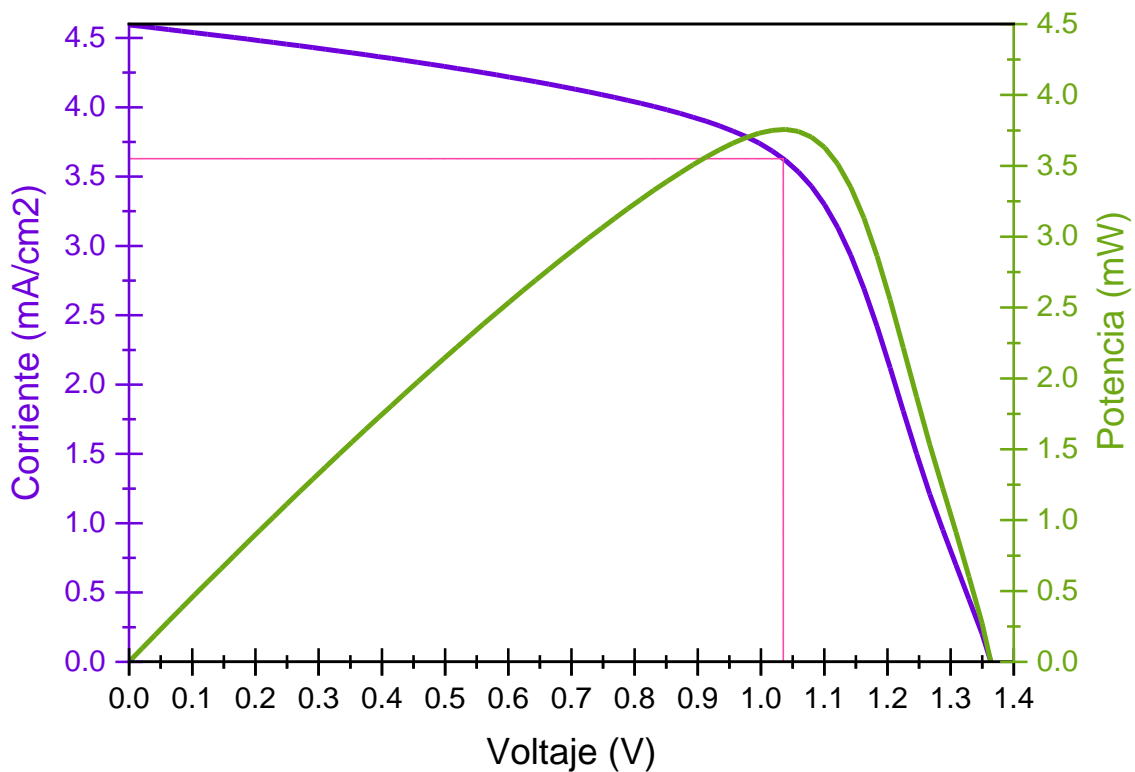


Figura 27. Curva característica J-V y V-P determinando el material de los contactos trasero y frontal del dispositivo.

Tabla 11. Resumen de los valores obtenidos para la celda solar con la determinación de los materiales de los contactos trasero y frontal

Resultados obtenidos de la curva J-V	
V_{oc}	1.36 V
J_{sc}	4.59 mA/cm ²
FF	60.14 %
η	3.76 %
V_M	1.04 V
J_M	3.63 mA/cm ²
P	3.76 mW

3.1d Resultados de la variación de la densidad de estados en la interfaz de la heterounión y su impacto en los parámetros que caracterizan a la heterounión.

En la tabla 12, se muestra el efecto de la densidad de estados en la interface en las características de la gráfica J-V. La figura 28 representa las curvas J-V para la heterounión n-TiO₂/p-NiO con varias densidades de estado en la interfaz.

Tabla 12. Resumen de parámetros obtenidos al modificar la densidad de estados en la interfaz.

Parámetros obtenidos de la curva J-V cambiando la densidad de estados en la interfaz.				
Densidad de estados en la interfaz (1/cm²)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm²)	FF (%)	η (%)
10¹⁰	1.07	4.59	73.37	3.59
10¹¹	1.00	4.59	74.87	3.44
10¹²	0.94	4.59	75.86	3.27
5x10¹²	0.90	4.59	76.35	3.14
10¹³	0.88	4.59	76.52	3.08
5x10¹³	0.83	4.59	76.84	2.95

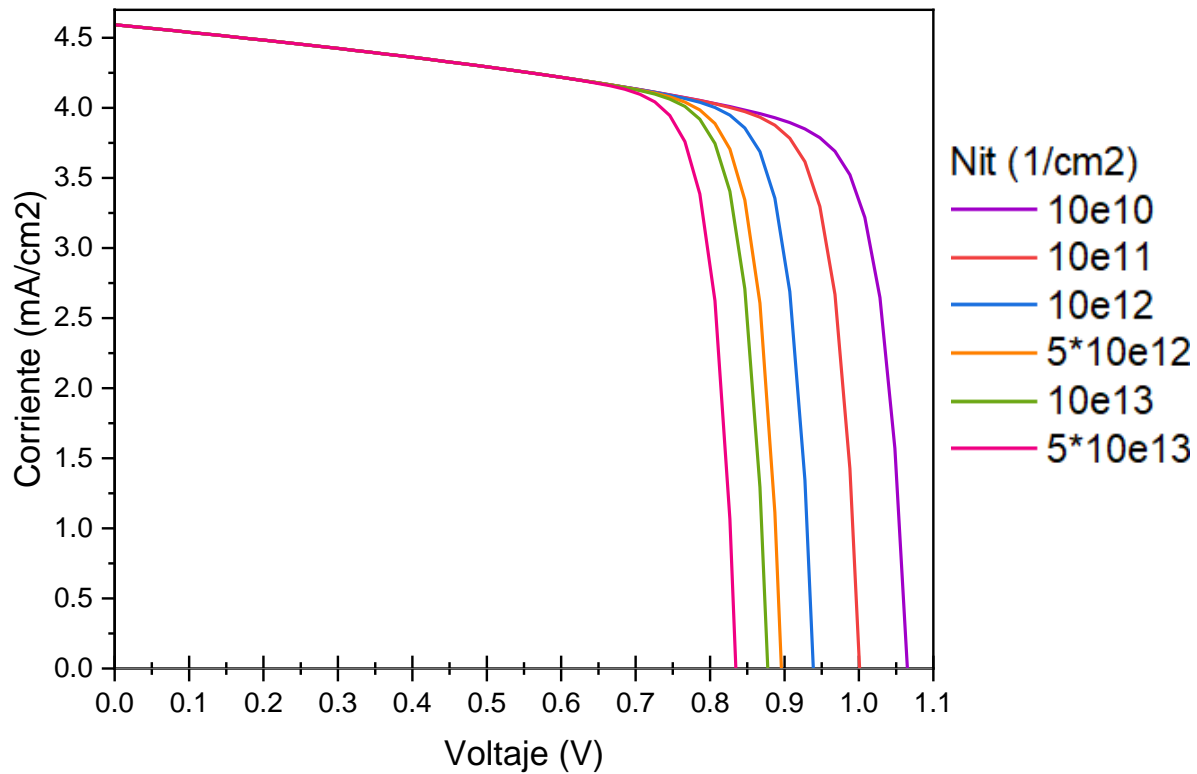


Figura 28. Curvas características J-V cambiando la densidad de estados en la interfaz.

De acuerdo a los resultados reportados en la tabla 12 y a la figura 28, se observa que al aumentar la densidad de estados en la interfaz entre la heterounión n-TiO₂/P-NiO, se presenta una disminución en los parámetros del voltaje de circuito abierto y la eficiencia, mientras que la relación que existe entre el voltaje y la corriente mejora, por lo que se presenta un aumento en el factor de llenado; el parámetro que permaneció constante fue la corriente de saturación. En relación a estos resultados, se asume que, cuando la densidad de estados en la interfase aumenta, es más probable que los electrones sean capturados por la gran cantidad de defectos que existe, lo cual es observable en la disminución en los parámetros del voltaje de circuito abierto y la eficiencia. El aumento en la densidad de estados se debe al desorden de los materiales que pueden afectar el transporte de carga y por consecuencia, las propiedades de la celda solar; por lo tanto, es importante controlar la densidad de estados en la interfaz, debido a que los resultados reflejaron una disminución en la eficiencia de trabajo del dispositivo.

En relación a la modificación de la sección transversal de captura de electrones y huecos, la figura 29 y la tabla 13, muestran las características de las gráficas J-V para diferentes valores de los defectos en la sección transversal.

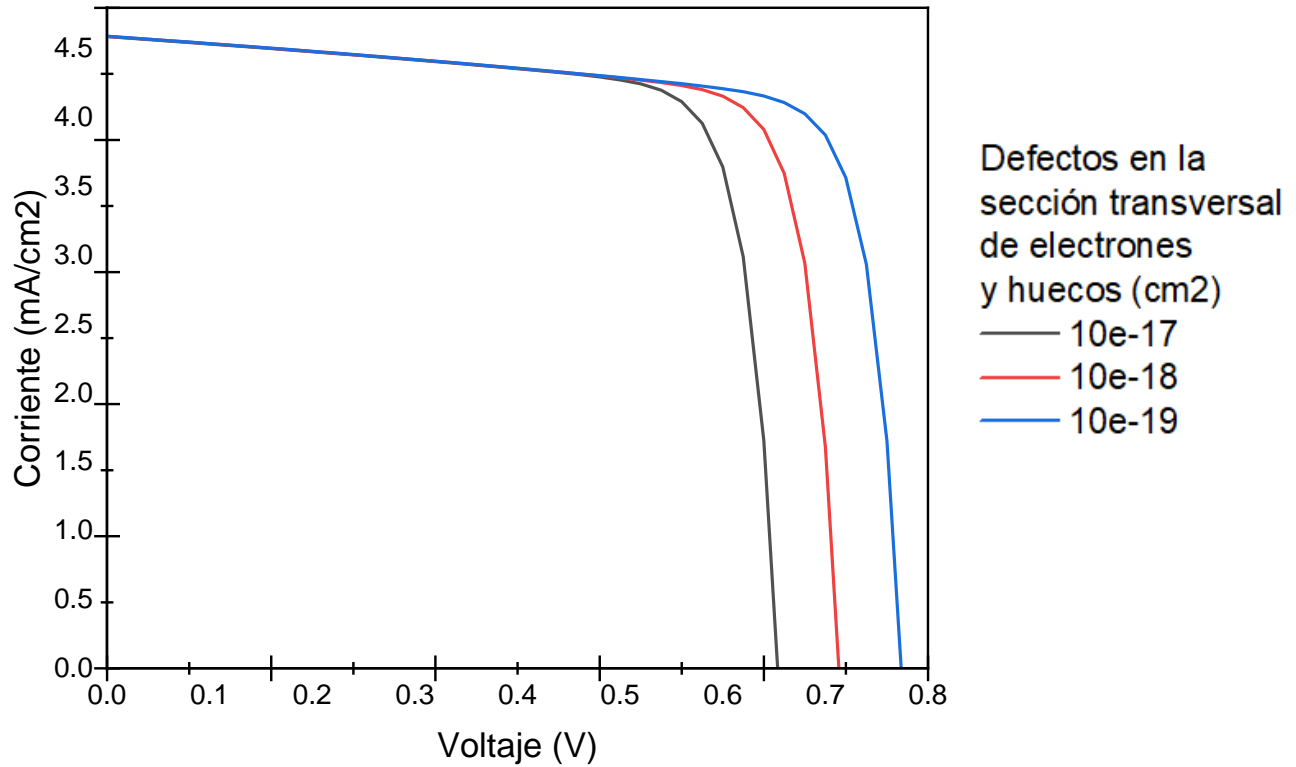


Figura 29. Curvas características J-V modificando los defectos en la sección transversal de electrones y huecos

Tabla 13. Resultados obtenidos al modificar los defectos en la sección transversal de electrones y huecos.

Resultados de la curva J-V cambiando los defectos en la sección transversal de electrones y huecos				
Defectos en la sección transversal de electrones y huecos (cm²)	Voc (V)	Jsc (mA/cm²)	FF (%)	η (%)
10⁻¹⁷	0.65	4.59	77.02	2.31
10⁻¹⁸	0.71	4.59	77.17	2.53
10⁻¹⁹	0.77	4.59	77.10	2.74

Los resultados de la tabla 13 y de acuerdo a la figura 29, al aumentar los defectos en la sección transversal de electrones y huecos, los valores del voltaje de circuito abierto y de la eficiencia, aumentan; de acuerdo

a la literatura, esto puede deberse a que es menos probable que los portadores libres sean capturados por trampas individuales.

Cuando se realiza la modificación en el nivel energético de referencia de los defectos, se obtienen los resultados de la tabla 14 y la figura 30, en la cual se observa el cambio de la eficiencia al cambiar nivel energético de referencia

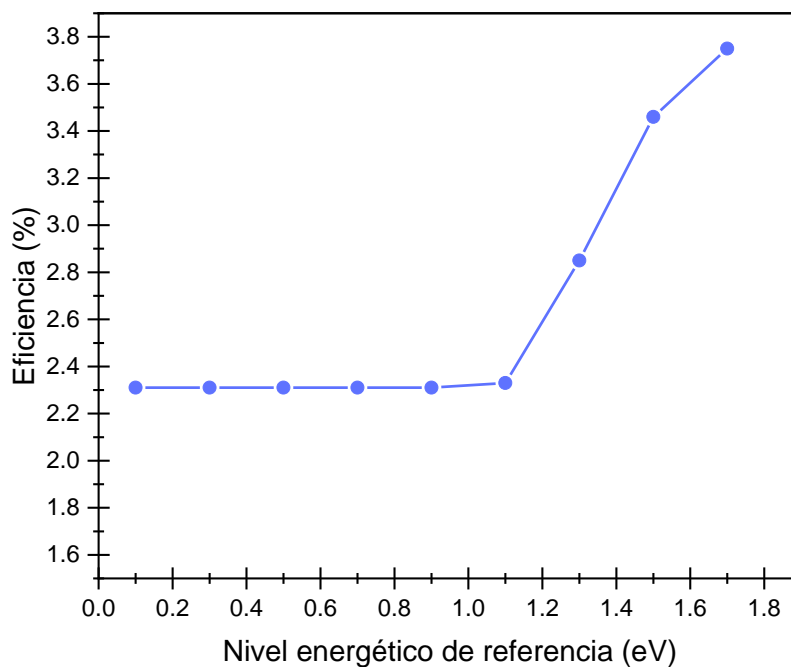


Figura 30. Cambio en la eficiencia del dispositivo, al cambiar el nivel energético de referencia de los defectos en la interfaz.

Tabla 14. Resumen de parámetros obtenidos al modificar el nivel energético de los defectos

Parámetros obtenidos de la curva J-V cambiando el nivel energético de referencia de los defectos				
Nivel energético de referencia de los defectos (eV)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm²)	FF (%)	η (%)
0.1	0.65	4.59	77.02	2.31
0.3	0.65	4.59	77.02	2.31
0.5	0.65	4.59	77.02	2.31
0.7	0.65	4.59	77.02	2.31
0.9	0.65	4.59	77.02	2.31
1.1	0.66	4.59	77.06	2.33

1.3	0.80	4.59	77.21	2.85
1.5	1.00	4.59	75.11	3.46
1.7	1.19	4.59	68.59	3.75

En relación con los resultados obtenidos al modificar el nivel energético de referencia, se puede observar en la figura 30, que, al aumentar el nivel energético de referencia, la eficiencia no tuvo una disminución paulatina; por el contrario, los valores de eficiencia desde 0.1 eV, se mantuvieron constantes hasta llegar a un nivel de referencia de 1.1 eV, donde la eficiencia tuvo un ligero aumento, que continuó para valores energéticos de referencia mayores. Los resultados pueden mostrar que los defectos localizados en un rango desde 0.1 hasta 0.9 eV aproximadamente, se pueden catalogar como niveles de defectos profundos, ya que tienen un mayor impacto en los resultados que caracterizan al dispositivo.

3.2 Resultados de la simulación de la heterounión n-TiO₂/P-NiO iluminada desde la parte **P** de la unión.

3.2a Resultados de la modificación del espesor de la capa ventana y la capa absorbadora y los efectos que se producen en los parámetros que caracterizan a la heterounión.

Con la finalidad de comparar el funcionamiento de los dispositivos simulados, en relación a la iluminación de la celda solar, se toma como punto de partida la figura 24 y la tabla 8, donde se simula una celda solar iluminada desde la región del material tipo n como un espesor para la capa ventana de 275 nm y para la capa absorbadora de 1400 nm. Tomando los mismos parámetros y la misma información de los contactos trasero y frontal se obtiene la figura 31 y la tabla 15, donde se muestran los resultados de la simulación de una celda solar iluminada desde la parte tipo P con las mismas características antes mencionadas.

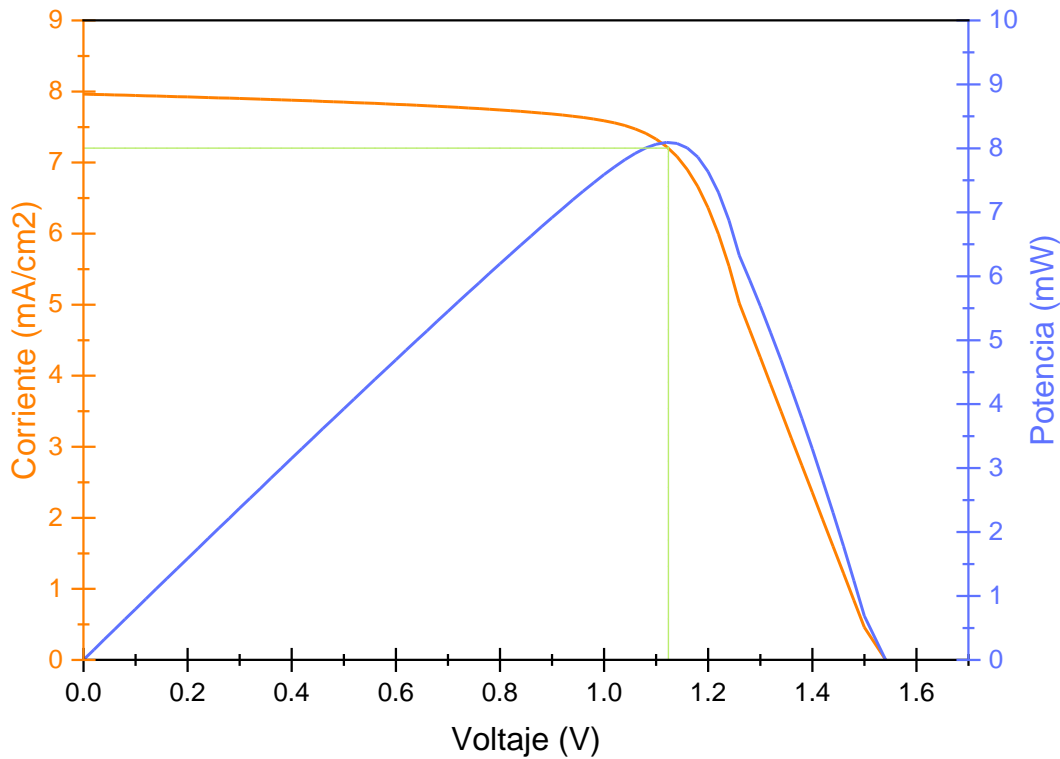


Figura 31. Curva característica J-V y V-P con una capa ventana de 275 nm y una capa absorbedora de 1400 nm, iluminada desde la parte P de la unión.

Tabla 15. Resumen de los valores obtenidos a partir de la figura 31.

Valores obtenidos de la curva J-V	
V_{oc}	1.54 V
J_{sc}	7.96 mA/cm ²
FF	65.96 %
η	8.09 %
V_M	1.12 V
J_M	7.20 mA/cm ²
P	8.09 mW

Realizando una comparativa de los resultados obtenidos a partir de la figura 24, se observa que los parámetros se modificaron y aumentaron de forma considerable; el aumento más notable es el de la corriente de corto circuito, ya que este parámetro prácticamente se duplicó, lo cual originó un aumento en

la eficiencia del dispositivo; el factor de llenado también aumentó, de manera que la relación que existe entre la corriente y el voltaje para este modelo de iluminación es mejor, y se pueden obtener mejores resultados de funcionamiento de acuerdo a las características obtenidas, ya que la potencia también aumentó de forma favorable. Esta comparativa se puede analizar en la figura 32, donde se puede observar claramente la diferencia entre ambos dispositivos y se puede comprobar que al iluminar la celda solar desde la parte P de la unión, el dispositivo tiene una mejor respuesta.

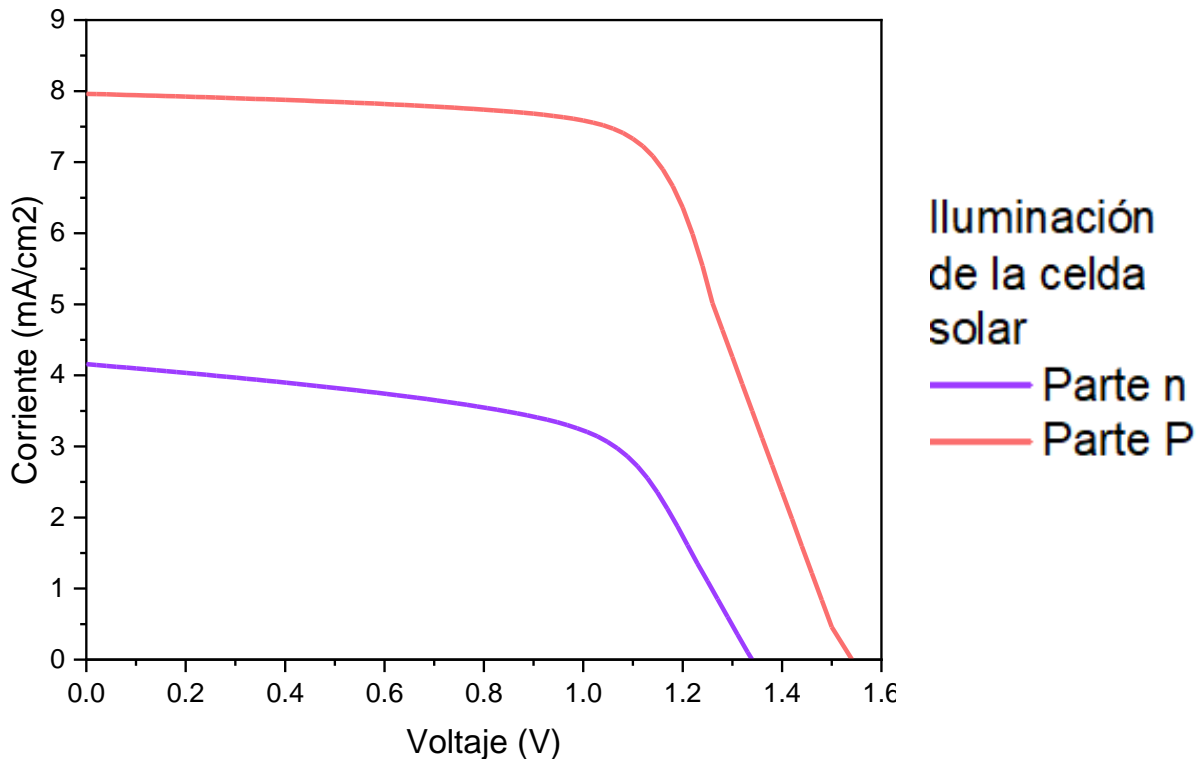


Figura 32. Comparativa de las curvas característica J-V con una capa ventana de 275 nm y una capa absorbedora de 1400 nm, iluminadas desde la parte tipo n (morado) y la parte tipo P (rosa).

El hecho de que la eficiencia prácticamente se duplicara, presenta una gran ventaja en las características del dispositivo y permite comprobar que, de acuerdo a las propiedades de los materiales, la celda solar se debe iluminar desde la parte del material que tenga el mayor nivel de energía, así como también, el mayor dopamiento. Si bien es cierto que el voltaje de circuito abierto no tuvo un aumento considerable, la corriente de saturación aumento casi al doble de su valor, este parámetro es de suma importancia, ya que representa la corriente máxima que puede producir una celda solar.

A pesar de que los resultados de la figura 31 fueron favorables, es necesario determinar el espesor de cada una de las capas que forman al dispositivo iluminado desde la parte P de la unión. En la figura 33 se

observa el comportamiento de la eficiencia al mantener valores fijos de la capa ventana (NiO), variando el espesor de la capa absorbadora (TiO₂). A diferencia de la celda iluminada desde la parte **n** de la unión, fue posible realizar las simulaciones variando el espesor de la capa absorbadora hasta 5000 nm, sin embargo, la eficiencia no tuvo un cambio relevante al modificar el espesor de la capa ventana.

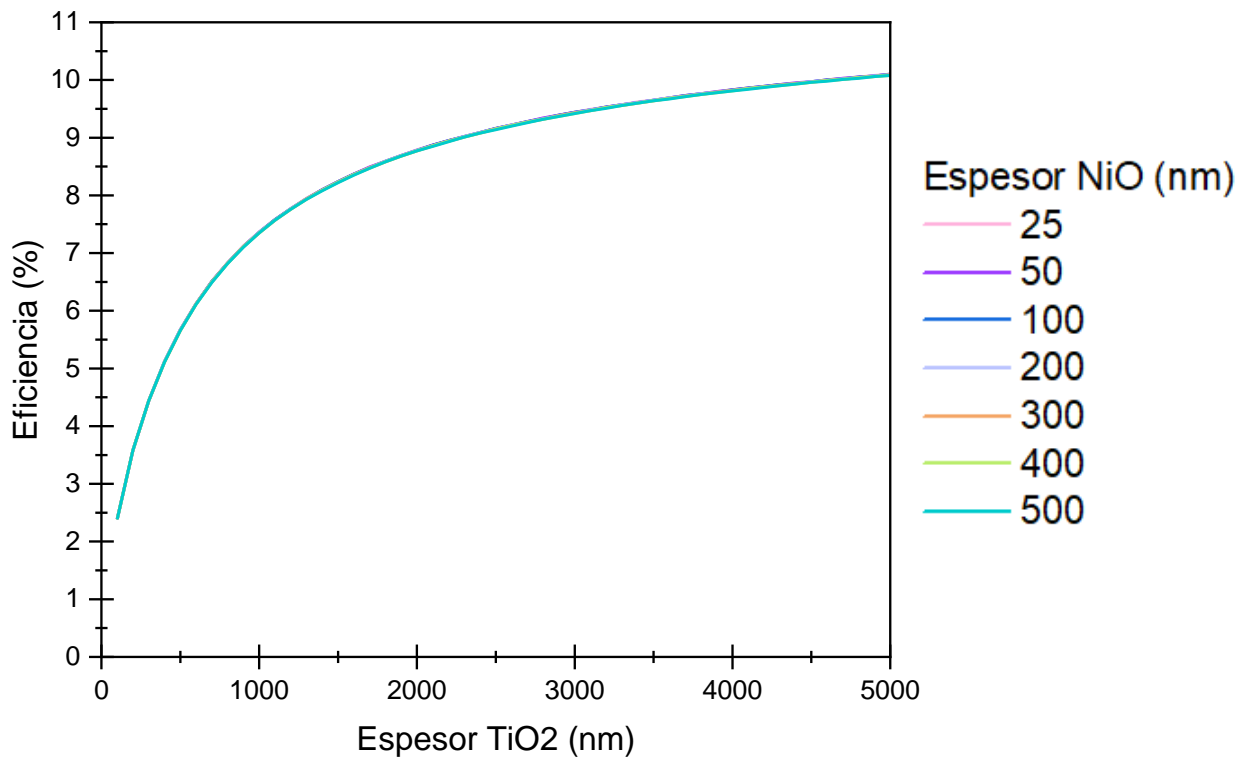


Figura 33. Comportamiento de la eficiencia de la celda solar de heterounión n-TiO₂/P-NiO, iluminada desde la parte **P** de la unión, manteniendo un espesor fijo de la capa ventana, variando el espesor de la capa absorbadora.

En la figura 33 aparecen en la parte derecha los espesores de la capa ventana, sin embargo, en realidad no es observable el efecto que produce la modificación que se produce al aumentar el espesor de esta capa puesto que el gráfico parece contemplar únicamente un espesor; esto se debe a que los cambios en la eficiencia del dispositivo se mantuvieron constantes. Al contrario de los resultados obtenidos en la simulación de la celda solar iluminada desde la parte **n** de la unión, el espesor de la capa ventana no parece tener un impacto notable en el funcionamiento de la celda solar, sin embargo, al aumentar el espesor de la capa absorbadora si se puede observar un aumento gradual en la eficiencia del dispositivo. Debido a los resultados obtenidos, se puede asumir que cuando la celda solar es iluminada desde la parte **P** de la unión, la capa absorbadora determina el funcionamiento de la celda solar, pues es en esta parte, en donde se forma el campo eléctrico y donde el ancho de la región de agotamiento es mayor, factor que determina la correcta absorción de los portadores libres, ya que al tener las características ideales en la región del

material tipo **n**, se puede disminuir la recombinación de los portadores para aprovechar mejor la energía fotónica incidente.

Si bien es cierto que en la simulación, se obtiene la misma eficiencia al modificar los espesores de la capa ventana, se deben analizar los cambios que se producen en los otros parámetros que caracterizan a la celda solar, tal es el caso de la corriente de corto circuito y el factor de llenado; como se ha mencionado anteriormente, el valor de la corriente de saturación refleja la corriente máxima que puede producir una celda solar, por lo que se busca que el dispositivo tenga un aumento gradual de dicha corriente para tener la mayor potencia en la celda solar. Al observar los resultados de la simulación en los parámetros de la corriente de corto circuito, se encuentra una ligera disminución en este parámetro al aumentar el espesor de la capa ventana; sin embargo, cuando se deja constante el espesor de la capa ventana y se aumenta el espesor de la capa absorbadora, la corriente de corto circuito muestra un aumento paulatino.

Dado que con el análisis de los parámetros de la corriente de corto circuito no se puede generar una conclusión sobre el comportamiento de la celda solar en relación al espesor de las capas que la conforman, se procede a analizar el parámetro del factor de llenado.

En general, al observar el comportamiento del Factor de llenado, se puede asumir que el comportamiento de este parámetro es muy estable, sin embargo, hay espesores que, al ser simulados, muestran una disminución paulatina de este parámetro, al aumentar el espesor de la capa ventana, como se observa en la tabla 18.

En la tabla 16, se muestran valores de espesor de la capa ventana desde 25 hasta 400 nm, debido a que se toma en cuenta, que el funcionamiento adecuado de una celda solar se genera, cuando la capa absorbadora tiene un mayor espesor que la capa ventana; seleccionar los valores de espesor para la capa absorbadora a partir de 400 nm, también se fundamenta en que, de acuerdo a la figura 32, cuando la capa absorbadora tiene un espesor menor a 400 nm, se presentan los menores resultados de eficiencia del dispositivo.

A partir de espesores de 2800 nm para la capa absorbadora, el decaimiento en el factor de llenado de algunas de las simulaciones realizadas con diferentes valores de espesor para la capa ventana, disminuyeron notablemente. Si bien es cierto que en estos parámetros se obtiene la mayor eficiencia, se debe tomar en cuenta que el factor de llenado también es un indicador válido para analizar la viabilidad del dispositivo, ya que nos muestra que tan bueno puede ser el funcionamiento de la celda solar.

Tabla 16. Resultados del factor de llenado para la simulación de la celda solar con diferentes valores de espesor para la capa ventana (NiO) y la capa absorbedora (TiO₂)

Espesor TiO ₂ (nm)	Espesor NiO (nm)											
	25	75	125	200	225	250	275	300	325	350	375	400
400	64.09	64.82	64.69	64.36	56.98	56.98	56.98	63.87	63.87	63.87	56.98	56.98
500	64.88	66.18	66.24	66.03	58.74	58.74	58.74	65.63	65.63	65.63	58.75	58.75
600	65.25	67.12	67.35	67.27	67.27	60.15	60.15	66.96	66.96	66.96	66.96	60.15
700	65.33	67.75	68.17	68.22	68.22	61.29	61.3	68	68	68	68	61.3
800	65.21	68.17	68.77	68.96	68.96	62.26	62.26	68.84	68.83	68.84	68.84	62.26
900	64.96	68.42	69.21	69.53	69.53	63.08	63.08	69.51	69.51	69.51	69.51	63.08
1000	64.6	68.56	69.52	69.98	69.98	63.8	63.8	70.05	70.06	70.06	70.06	63.8
1100	64.17	68.61	69.74	70.33	70.33	64.43	64.43	70.51	70.51	70.51	70.51	64.43
1200	63.68	68.58	69.88	70.61	70.61	64.99	64.99	70.88	70.88	70.88	70.88	64.99
1300	63.16	68.49	69.96	70.82	70.82	65.5	65.5	71.19	71.19	71.19	71.19	65.5
1400	62.61	68.35	69.99	70.97	70.97	65.95	65.96	71.44	71.44	71.44	71.44	65.96
1500	62.03	68.18	69.97	71.09	71.09	66.37	66.37	71.65	71.65	71.65	71.65	66.37
1600	61.45	67.97	69.92	71.16	71.16	66.75	66.75	71.82	71.83	71.82	71.83	66.76
1700	60.85	67.74	69.84	71.2	71.2	67.11	67.11	71.96	71.96	71.96	71.96	67.11
1800	60.25	67.48	69.74	71.22	71.22	67.44	67.44	72.08	72.08	72.08	72.08	67.44
1900	59.65	67.21	69.61	71.21	71.21	67.74	67.74	72.16	72.16	72.16	72.16	72.16
2000	59.04	66.93	69.46	71.18	71.19	68.03	68.03	72.23	72.23	72.23	72.23	72.23
2100	58.44	66.63	69.3	71.14	71.14	68.3	68.3	72.27	72.27	72.27	72.27	72.28
2200	57.84	66.32	69.12	71.08	71.08	68.55	68.55	72.3	72.3	72.3	72.3	72.3
2300	57.25	66	68.94	71	71	68.79	68.79	72.32	72.32	72.32	72.32	72.32
2400	56.66	65.67	68.74	70.91	70.91	69.02	69.02	72.32	72.32	72.32	72.32	72.32
2500	56.08	65.34	68.53	70.81	70.81	69.23	69.23	72.31	72.31	72.31	72.31	72.31
2600	55.51	65.01	68.32	70.7	70.7	69.43	69.43	72.28	72.28	72.28	72.28	72.28
2700	54.94	64.67	68.09	70.58	70.58	69.63	69.63	72.25	72.25	72.25	72.25	72.25
2800	54.38	64.33	67.87	70.46	70.46	69.81	69.81	72.21	72.21	72.21	72.21	72.21

Al observar la tabla 16, es notable que en los espesores de la capa ventana de 250 y 275 nm, el factor de llenado tiene un aumento constante y paulatino; a valores mayores y menores que estos espesores para la capa ventana, si hay decaimientos en el factor de llenado, sin embargo, al tener un comportamiento muy similar para ambos parámetros, resulta adecuado seleccionar uno de ambos, como el espesor de la capa ventana. Debido al análisis realizado, se asume que un espesor adecuado para la capa ventana de una heterounión n-TiO₂/P-NiO, iluminada desde la parte **P** de la unión es de 250 nm. Para seleccionar el espesor de la capa absorbedora, se observa que al haber seleccionado un espesor para la capa ventana de 250 nm, existen parámetros en simulaciones de mayor y menor valor de espesor para la capa ventana, donde el factor de llenado muestra valores discontinuos en el funcionamiento del dispositivo, ya que, a valores aproximados a 1900 nm para el espesor de la capa absorbedora en valores de espesor menores a 250 nm para la capa ventana, el factor de llenado disminuye, mientras que, para parámetros de espesor mayores a 250 nm para la capa ventana, las discontinuidades se presentan en espesores aproximados a 2500 nm de espesor para la capa absorbedora, por lo que, si se busca obtener un comportamiento favorable de la celda solar, se puede asumir que en un valor de espesor para la capa absorbedora de 1800 nm, la

celda solar mantendrá un comportamiento constante, donde la relación de los parámetros que caracterizan al dispositivo, favorecerá el aprovechamiento de las mismas.

En resumen, de acuerdo a los resultados de la simulación, se encuentra que los espesores ideales para una celda solar de la heterounión n-TiO₂/P-NiO, iluminada desde la parte P de la unión son de 250 nm para la capa ventana (TiO₂) y 1800 nm para la capa absorbedora (NiO), valores que son relativamente similares a los que se encontraron para la celda solar iluminada desde la parte n de la unión. Al haber seleccionado los espesores adecuados para la capa ventana y la capa absorbedora, se obtiene el gráfico que se observa en la figura 34, de la curva J-V para la celda solar, así como la tabla 17, referente a los parámetros obtenidos a partir de la figura 34.

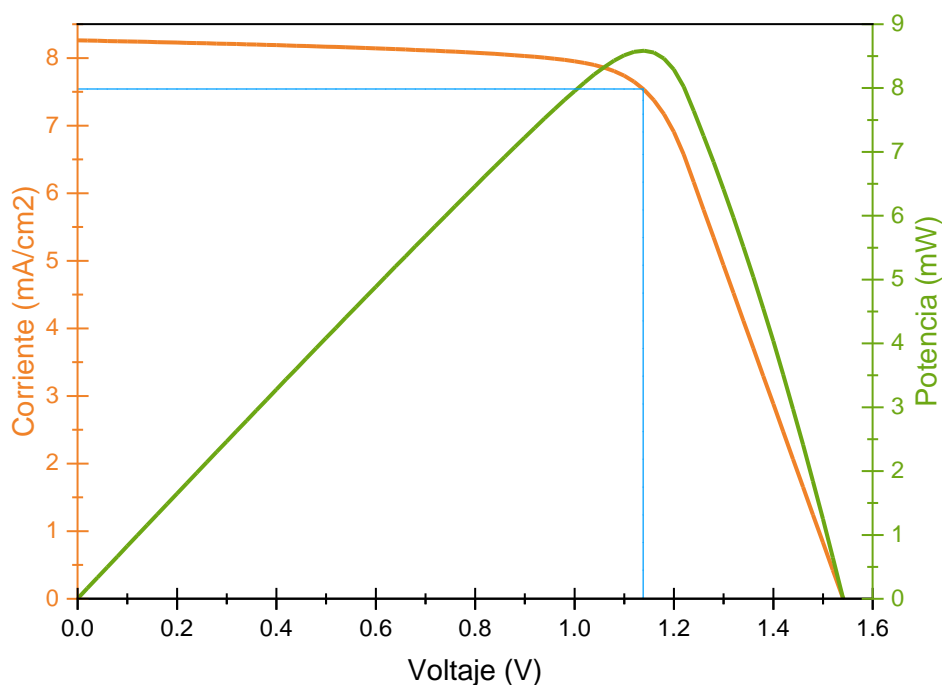


Figura 34. Curva característica J-V y V-P con una capa ventana de 250 nm y una capa absorbedora de 1800 nm, iluminada desde la parte P de la unión.

Tabla 17. Resumen de parámetros obtenidos a partir de la figura 34.

Parámetros obtenidos de la curva J-V	
Voc	1.54 V
Jsc	8.26 mA/cm ²
FF	67.44 %
η	8.58 %

V_M	1.14 V
J_M	7.54 mA/cm ²
P	8.58 mW

Es notable que los resultados reportados en la tabla 17, en comparación con los reportados en la tabla 8, aumentaron considerablemente, lo cual es un buen indicio para comprobar que al iluminar la celda solar de la heterounión n-TiO₂/P-NiO desde la parte **P** de la unión, se tiene un mejor funcionamiento en el dispositivo. La relación de los parámetros obtenidos es adecuada y la eficiencia casi se triplico; esto comprueba que, de acuerdo a la física del dispositivo, la iluminación de la celda solar desde la parte P de la unión, marca una diferencia notable en el mejoramiento de la caracterización del dispositivo.

3.2b Resultados de la modificación de la temperatura y sus efectos en los parámetros que caracterizan a la heterounión.

El cambio del comportamiento de los parámetros del dispositivo cuando se modifica la temperatura, se puede observar en la figura 35. Los resultados de la simulación del dispositivo al modificar la temperatura, son reportados en la tabla 18.

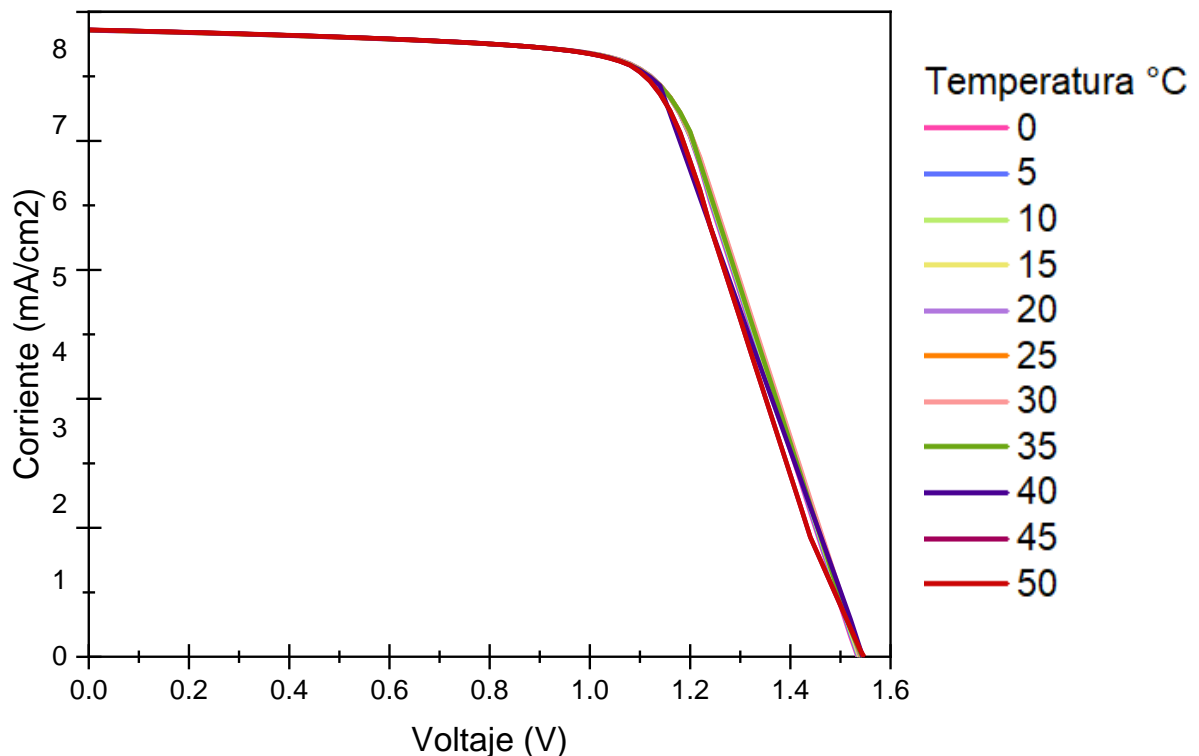


Figura 35. Curvas características J-V a diferentes parámetros de temperatura.

Tabla 18. Resumen de los valores obtenidos al modificar la temperatura del dispositivo

Valores obtenidos de las curvas J-V al modificar la temperatura					
Temperatura (°C)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm²)	FF (%)	η (%)	P_{max} (mW)
0	1.5345	8.2564	67.83	8.5938	8.59
5	1.5358	8.2570	67.76	8.5924	8.59
10	1.5372	8.2576	67.68	8.5908	8.59
15	1.5383	8.2582	67.61	8.5891	8.59
20	1.5397	8.2587	67.53	8.5874	8.59
25	1.5408	8.2593	67.47	8.5856	8.59
30	1.5418	8.2599	67.40	8.5836	8.58
35	1.5431	8.2605	67.32	8.5816	8.58
40	1.5444	8.2611	67.24	8.5794	8.58
45	1.5458	8.2617	65.93	8.4202	8.42
50	1.5473	8.2623	64.16	8.2031	8.20

Al analizar los resultados reportados en la tabla 18, se puede observar que hay un ligero aumento en el voltaje de circuito abierto, parámetro que, de acuerdo a la figura 20 debería disminuir; en relación a los parámetros de la corriente de corto circuito, se observa un ligero aumento en los valores al aumentar la temperatura, que en base a la figura 20, es el comportamiento adecuado de una celda solar. Vale la pena observar que el factor de llenado también tiene una disminución por el aumento de temperatura, que también impacta en la disminución de la eficiencia, comportamiento típico en una celda solar. Al comparar el comportamiento al aumentar la temperatura en una celda solar iluminada desde la parte **n** de la unión, como se reporta en la tabla 9, se observa que los parámetros del factor de llenado son mayores al iluminar la celda solar desde la parte **P** de la unión, lo cual refleja que en esta modalidad de iluminación la relación que existe entre los parámetros de voltaje y corriente tienen una mejor correspondencia y reflejan un mejor funcionamiento del dispositivo. A pesar de que en la tabla 18, se observa un ligero aumento en el voltaje de circuito abierto, se puede inferir que el comportamiento de la celda solar al aumentar la temperatura, es un comportamiento normal, debido a que los parámetros del factor de llenado y de la eficiencia disminuyen gradualmente, lo cual demuestra que el aumento de la temperatura, afecta al dispositivo de la forma esperada, corroborando que el diseño de la celda solar iluminada desde la parte **P** de la unión es factible y obedece el comportamiento de una celda solar común.

3.2c Resultados de la modificación de la función de trabajo de los contactos trasero y delantero y sus efectos en los parámetros que caracterizan a la heterounión.

En la tabla 19, se muestran los resultados obtenidos en la simulación al fijar el valor de la función de trabajo del contacto trasero, en 4.218 eV (función de bandas planas), el cual se utilizó para las simulaciones anteriores, cambiando el valor de la función de trabajo del contacto frontal, el cual, para simulaciones anteriores, tenía un valor de 5.26 eV.

Tabla 19. Resumen de parámetros obtenidos al modificar la función de trabajo del contacto frontal, dejando como constante una función de trabajo del contacto trasero en 4.128 eV.

Material de contacto	Función de trabajo del metal (eV)	Voc (V)	Jsc (mA/cm²)	FF (%)	η (%)
Cobre	4.6	1.3490	8.2359	67.93	7.55
Plata	4.7	1.4464	8.2511	69.18	8.26
Hierro	4.8	1.4574	8.2577	71.17	8.57
Nb	4.9	1.4593	8.2581	71.22	8.58
Cu-graphite alloy	5.0	1.4594	8.2582	71.22	8.58
Au	5.1	1.4594	8.2582	71.22	8.58

Al modificar los valores de la función de trabajo del contacto frontal, se encontraron resultados al modificar dicho valor hasta 5.3 eV; como sucedió en la simulación de la iluminación desde la parte **n** de la unión, a partir de este valor, la simulación arrojó automáticamente un error, y no fue posible aumentar el valor del contacto frontal para simular Niquel o Platino. Al tener un valor de 4.6 y 4.7 eV, la eficiencia tuvo una disminución en los parámetros de la celda solar, por lo que se observa que, cuando hay un valor de función de trabajo menor al del valor reportado para bandas planas, la eficiencia es afectada negativamente, por lo que estos valores se pueden descartar. A partir de una función de trabajo de 4.8 eV, la eficiencia en el sistema se comporta de manera estable, y los valores de los parámetros que caracterizan a la heterounión no aumentan de forma drástica, de hecho los cambios reportados en todos los parámetros son poco observables al compararlos con los resultados de la tabla 20, por lo tanto, se puede llegar a la misma conclusión que cuando se ilumina la celda solar desde la parte **n** de la unión, donde no se necesita utilizar un metal como el oro para el contacto frontal, ya que no se obtendría ningún beneficio adicional; debido a esto, también se utilizará al Hierro como contacto frontal, el cual tiene una función de trabajo de

4.8 eV, debido a que, de acuerdo a la literatura, es viable realizar contactos de este material, mientras algunos de los que se presentan en la tabla 5 son caros y poco utilizados.

A partir de la modificación del valor de la función de trabajo del contacto frontal, se deja este parámetro constante, y se modifica la función de trabajo del contacto trasero, obteniendo los resultados de la tabla 20.

Tabla 20. Resumen de parámetros obtenidos al modificar la función de trabajo del contacto trasero, dejando como constante una función de trabajo del contacto frontal de 4.8 eV, perteneciente al Hierro.

Material de contacto	Función de trabajo del metal (eV)	Voc (V)	Jsc (mA/cm²)	FF (%)	η (%)
Manganeso	4.1	1.8678	9.0566	61.64	10.43
Aluminio	4.2	1.4623	8.2990	71.18	8.64
Cromo	4.5	1.4492	8.1842	71.14	8.44

En los resultados se puede observar que, al disminuir la función de trabajo del material del contacto trasero, la eficiencia aumenta, mientras que cuando aumenta, la eficiencia disminuye. Cuando el valor de la función de trabajo para el contacto trasero es de 4.1 eV la eficiencia aumenta significativamente, al igual que el voltaje de circuito abierto y la corriente de corto circuito, sin embargo, los resultados convergen con los obtenidos para la celda solar iluminada desde la parte **n** de la unión ya que la simulación arroja resultados muy altos para la corriente que no tienen una disminución gradual y no se puede encontrar adecuadamente el valor del voltaje de circuito abierto. Estas mismas inconsistencias que se han presentado bajo las dos modalidades de iluminación demuestran que si bien la simulación con este parámetro si se puede realizar, los resultados no son fiables y por lo tanto se deben descartar.

Cuando el parámetro de la función de trabajo para el contacto frontal es de 4.2 eV, los resultados son mucho más factibles y adecuados, ya que se observa un aumento en la eficiencia del dispositivo; esta función de trabajo corresponde al aluminio y al analizar la relación I-V, el comportamiento es adecuado y los valores resultantes permiten la determinación de todos los parámetros que determinan a la celda solar.

En relación a los resultados de las simulaciones, se corrobora que el comportamiento de la celda solar se potencia cuando se tiene como materiales de contacto al Hierro y al Aluminio; para el caso de la celda

solar iluminada desde la parte **P** de la unión, el contacto frontal corresponde al Hierro con una función de trabajo de 4.8 eV y el contacto trasero al Aluminio, con una función de trabajo de 4.2 eV. A partir de la determinación del material de los contactos de la celda solar, se genera una nueva gráfica I-V mostrada en la figura 36, en la cual se pueden determinar los parámetros característicos más importantes de la celda solar, los cuales se encuentran en la tabla 21.

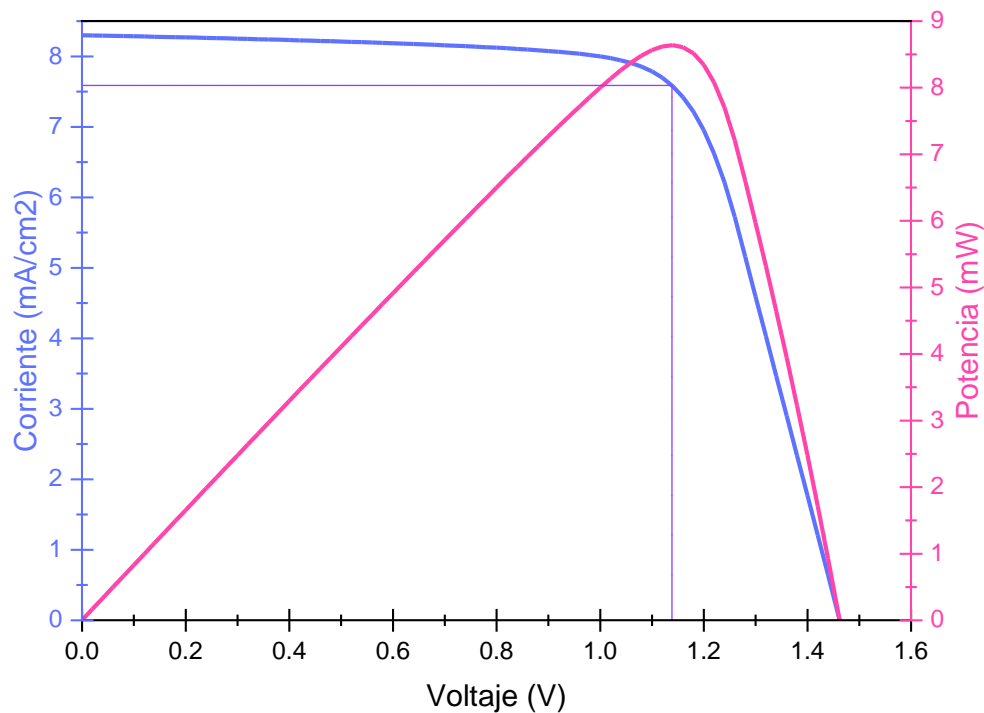


Figura 36. Curva característica J-V y V-P al determinar el material de los contactos trasero y frontal del dispositivo.

Tabla 21. Resumen de parámetros obtenidos para la celda solar con la determinación de los materiales de los contactos trasero y frontal

Parámetros obtenidos de la curva J-V	
V_{oc}	1.46 V
J_{sc}	8.30 mA/cm ²
FF	71.18 %
η	8.64 %
V_M	1.14 V
J_M	7.59 mA/cm ²
P	8.64 mW

Es posible comparar los resultados obtenidos a partir de la figura 27 y la tabla 12 en los que se muestra el comportamiento de una celda solar iluminada desde la parte **n** de la unión con los espesores ideales de la capa ventana y absorbedora así como los contactos que favorecen el funcionamiento del dispositivo, y los resultados obtenidos a partir de la figura 36 y la tabla 21, que de igual forma muestran el comportamiento de la celda solar, con las características ideales cuando se realiza la iluminación desde la parte **P** de la unión, debido a que en ambas se buscaron los factores ideales de funcionamiento. La figura 37 muestra una comparativa de ambos resultados.

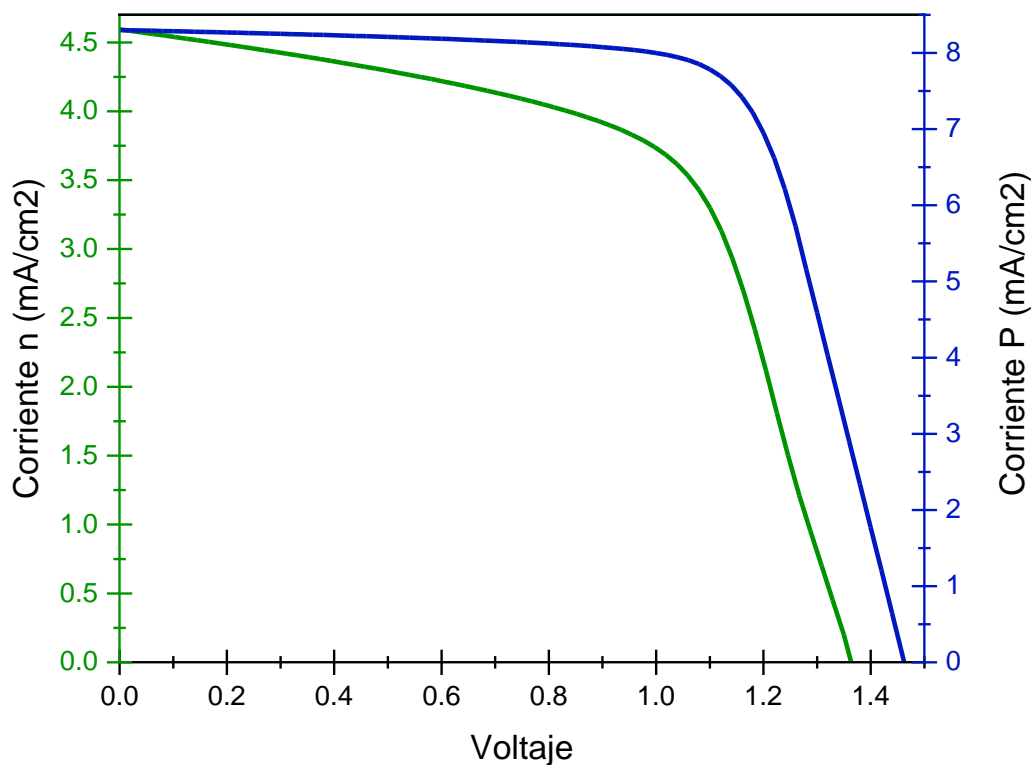


Figura 37. Curvas característica J-V con iluminación desde la parte **n** (verde) y desde la parte **P** (azul) de la unión, con las características ideales de funcionamiento.

Al analizar las curvas de la figura 37, es notable la diferencia que existe entre ellas en relación al parámetro de la corriente de corto circuito; la relación que existe entre este parámetro y la eficiencia señala que, a mayor valor de corriente de corto circuito, mayor será la eficiencia del dispositivo. Otro factor que resulta notable es que claramente, el factor de llenado de la curva J-V para la celda solar iluminada desde la parte **P** de la unión es mayor, lo cual también señala que la relación entre los parámetros J-V es mejor para el dispositivo iluminado desde la región **P** de la unión. En la realidad este funcionamiento es posible debido a que los materiales de ambas capas de la unión son prácticamente transparentes, por lo que los fotones

incidentes son igualmente aprovechados, sin embargo, el análisis estructural de los materiales, señala que el material tipo P funciona mejor como capa ventana.

En relación a las simulaciones realizadas, es notable que efectivamente, el dispositivo iluminado desde la parte P de la unión, muestra un mejor funcionamiento debido a las características físicas de los materiales. El hecho de que el espesor de la película del material tipo **n** (TiO_2) es mayor en comparación con el espesor del material tipo **p** (NiO), favorece el aumento del área de la región de agotamiento que deriva en un menor parámetro de recombinación; esto a su vez beneficia el aprovechamiento de los portadores y se comprueba que aumenta la eficiencia del dispositivo.

La capa **p** tiene un mayor dopamiento que el lado **n**, lo cual, de acuerdo a los cálculos de la sección 2.2, logra que la región de agotamiento se forme prácticamente solo en la región del material tipo **n**, lo cual favorece la absorción en el TiO_2 . Al tener un espesor de la capa **p** más delgado, los fotones incidentes serán mejor aprovechados y cuando la luz solar llegue hasta la región de agotamiento, habrá un mayor número de portadores que a su vez tendrán una mayor área de movimiento para producir los pares electrón-hueco.

De acuerdo a los análisis realizados, se comprueba que matemáticamente, físicamente y de acuerdo a la simulación, la iluminación que favorece el funcionamiento de la celda solar de la heterounión n- TiO_2 /P-NiO se genera desde la región del material tipo P de la unión.

Conclusiones

- De acuerdo a las características físicas y químicas de los materiales semitransparentes de la heterounión n-TiO₂/P-NiO y a los cálculos realizados en el diagrama de bandas de energía, es posible realizar una celda solar con estos materiales, debido a que se logró llevar a cabo la simulación mediante SCAPS1D.
- En relación a las características de los materiales, y de acuerdo a las observaciones realizadas sobre el funcionamiento del dispositivo, en las celdas solares de la heterounión de materiales semitransparentes se puede iluminar realizar de dos formas, ya sea desde el lado **n** de la unión o desde el lado **P**.
- De acuerdo a la simulación de una celda solar de la heterounión n-TiO₂/P-NiO, iluminada desde la parte **n** de la unión, se encontró que los espesores ideales son de 275 nm para la capa ventana (TiO₂) y 1400 nm para la capa absorbadora (NiO).
- De acuerdo a la simulación de una celda solar de la heterounión n-TiO₂/P-NiO, iluminada desde la parte **P** de la unión, se encontró que los espesores ideales son de 250 nm para la capa ventana (NiO) y 1800 nm para la capa absorbadora (TiO₂).
- En ambos tipos de iluminación se encontró el Hierro y el Aluminio se pueden utilizar como contactos, cambiando únicamente la ubicación de los mismos, en relación a la función de trabajo del material iluminado.
- Para ambos tipos de iluminación, se encontró que al aumentar la temperatura disminuye la eficiencia y el factor de llenado, proceso natural del funcionamiento de una celda solar convencional.
- Se obtuvo para una celda solar, iluminada desde la parte **n** de la unión, una eficiencia de 3.76%, mientras que para la celda solar iluminada desde la parte **P** de la unión, una eficiencia de 8.64%. Por lo cual, se puede concluir que para esta heteroestructura, es mejor iluminar a la celda, desde la parte **P** de la unión.
- En el caso de la heterounión n-TiO₂/P-NiO, se obtienen mejores resultados cuando se ilumina por la región tipo **P** de la unión, ya que tiene el nivel de energía prohibida más alto, lo cual permite el aprovechamiento fotónico adecuado, además, de acuerdo al diagrama de bandas de energía, la región de agotamiento de la región **n** es mucho mayor que la de la región **P**, lo cual propicia el aprovechamiento de los portadores en la región **n**, al reducir la absorción en la región del material tipo **P**.
- La capa **P** tiene un mayor dopamiento que el lado **n**, lo cual, de acuerdo a los cálculos de la sección 2.2, logra que la región de agotamiento se forme prácticamente solo en la región del material tipo **n**, lo cual favorece la absorción en el TiO₂. Al tener un espesor de la capa **P** más delgado, los fotones incidentes serán mejor aprovechados y cuando la luz solar llegue hasta la región de agotamiento, habrá un mayor

número de portadores que a su vez tendrán una mayor área de movimiento para producir los pares electrón-hueco.

REFERENCIAS

- [1] A. Green, M. (1982). 9.3 Semiconductor Heterojunctions. In M. A. Green, *Solar Cells* (pp. 172-174). United States of America: Prentice Hall.
- [2] Mouchou, R. (2020). Numerical Simulation and optimization of p-NiO/nTiO₂ solar cell system using SCAPS. *ELSEVIER*, 835-841.
- [3] Ukoba, K. O. (2018). Modeling of fabricated NiO/TiO₂ P-N Heterojunction Solar Cells. *International Journal of Applied Engineering Research*, 9701-9705.
- [4] A. Green, M. (1982). Solar Cells and Sunlight. In M. A. Green, *Solar Cells* (pp. 1-8). United States of America: Prentice Hall.
- [5] Neamen, D. A. (2003). 14.2 Solar Cells . In D. A. Neamen, *Semiconductor Physics and Devices* (pp. 624-628). New York: McGraw Hill.
- [6] Neamen, D. A. (2003). The pn Junction. In D. A. Neamen, *Semiconductor Physics and Devices* (pp. 241-253). New York: McGraw Hill.
- [7] Neamen, D. A. (2003). Heterojunctions. In D. A. Neamen, *Semiconductor Physics and Devices* (pp. 354-363). New York: McGraw Hill.
- [8] A. Green, M. (1982). Design of Silicon Solar Cells. In M. A. Green, *Solar Cells* (pp. 138-149). United States of America: Prentice Hall.
- [9] Basilio, J. d. (2011). Desarrollo de celdas solares de heterounión. *Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica*.
- [10] Espinosa, E. C. (2014, Diciembre 5). Caracterización de películas policristalinas de CdTe, obtenidas por erosión catódica para su aplicación en celdas solares. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.
- [11] Garza, Á. S. (2018). Desarrollo de celdas solares utilizando el CuSbS₂ como capa absorbidora por la técnica de depósito por baño químico. *Universidad Autónoma de Nuevo León*.
- [12] Ohta, H. (2004). Transparent Oxide Optoelectronics. *Materials Today*.
- [13] Vázquez y Parraguirre, S. (2016). Fabricación y caracterización de óxidos conductores transparentes depositados por medio de Sputtering para aplicaciones en dispositivos fotovoltaicos. *INAOE*.

- [14] Stadler, A. (2012). Transparent Conducting Oxides-An Up-To-Date Overview. *Materials*.
- [15] Zambrana, L. J. (2014). Obtención de Óxido de Titanio a partir de Titanatrano por medio de procesos Hidrotermales. *Universidad Mayor de San Andrés*.
- [16] Reyes, L. G. (2009). Síntesis Sonoquímica de TiO₂ y estudio de sus propiedades Optoelectrónicas. *Instituto Politécnico Nacional*.
- [17] S, D. P. (2013). Estudio DFT de propiedades estructurales y electrónicas del óxido de Titanio en sus fases: rutilo, anatasa y brookita. *Revista Colombiana de Materiales*, 179-185.
- [18] Rodriguez, L. A. (2017). Determinacion de las propiedades ácidas en materiales de Al₂O₃ y TiO₂ sulfatadas. *Instituto Politécnico Nacional*.
- [19] Ochoa, Y. (2010). Síntesis de TiO₂, fase anatasa, por el método sol-gel: estudio de la presencia de AcacH en el sistema. *Rev. Fac. Ing. Univ. Antioquia*, 29-40.
- [20] Urbano, M. A. (2011). Nanopartículas de tio₂, fase anatasa, sintetizadas por métodos químicos. *Ingeniería y Desarrollo*.
- [21] Hong, Y. C. (2005). Band gap narrowing of TiO₂ by nitrogen doping in atmospheric microwave plasma. *Science Direct*, 454-457.
- [22] Mendoza, M. A. (2019). Análisis de las Propiedades Ópticas de TiO₂ Anatasa Dopado con N y F con base a cálculos de primeros principios. *Revista de Física*.
- [23] Pansri S, e. a. (2019). Band offset determination of p-NiO/n-TiO₂ heterojunctions for applications in high-performance UV photodetectors. *Electronic Materials*, 4332-4344.
- [24] Vigil, M. D. (2009). Estudios de Óxidos de Niquel Nanoestructurados para la descomposición catalítica de H₂O₂. *XI Congreso Mexicano de Catalisis*.
- [25] Hassan, A. J. (2014). Study of Optical and Electrical Properties of Nickel Oxide (NiO) Thin Films Deposited by Using a Spray Pyrolysis Technique. *Journal of Modern Physics*.
- [26] Irwin, M. D. (2007). p-Type semiconducting nickel oxide as an efficiency-enhancing anode interfacial layer in polymer bulk-heterojunction solar cells. *PNAS*.
- [27] Shamim, A. (2020). A numerical simulation of high efficiency CdS/CdTe based solar cell using NiO HTL and ZnO TCO. *Optik*.

- [28] Kumar, N. (2021). Effect of TiO₂ layer thickness of TiO₂/NiO transparent photovoltaics. *Progress in Photovoltaics*.
- [29] Nguyen, T. T. (2021). Transparent photovoltaic cells and self-powered photodetectors by TiO₂/NiO heterojunction. *Journal of Power Sources*.
- [30] Ukoba, K. O. (2018). Fabrication of Affordable and Sustainable Solar Cells Using NiO/TiO₂ P-N Heterojunction. *International Journal of Photoenergy*.
- [31] Z.H.Ibupoto. (2014). The Synthesis of NiO/TiO₂ Heterostructures and Their Valence Band Offset Determination. *Hindawi*.
- [32] Bulgerman, M. (2020). SCAPS Manual.
- [33] Centro energético. (2017, Agosto 24). ¿Cómo influye la temperatura en el rendimiento de una placa solar? Retrieved from <https://www.cambioenergetico.com/blog/influye-la-temperatura-rendimiento-placa-solar/>
- [34] Riviere J, C. (1969). Work Function: Measurements and Results, in Solid State Surface Science, Vol. 1. In M. Green. New York: Princeton University.
- [35] ChemGlobe. (2021). *Tabla Periódica de los Elementos*. Retrieved from Titanio: <https://chemglobe.org/tabla-periodica/elemento/titanio/>
- [36] P. S.-C et al. (2019). Simulation of TiO₂/CuO solar cells with SCAPS-1D software. *Materials Research Express*.
- [37] A. S. et al (2020). Estudio químico-cuántico de los defectos producidos por las vacancias de oxígeno en los cristales de Titanato de Plomo PbTiO₃. *Ingenius*, 34-39.

