



Revista Mexicana de Física

ISSN: 0035-001X

rmf@ciencias.unam.mx

Sociedad Mexicana de Física A.C.

México

Hernández, L.; Rimada, J.C.; Courel, M.; Cabrera, C.I.

Nanotecnología para la energía fotovoltaica

Revista Mexicana de Física, vol. 59, núm. 2, octubre-, 2013, pp. 66-74

Sociedad Mexicana de Física A.C.

Distrito Federal, México

Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=57030971009>

- ▶ Cómo citar el artículo
- ▶ Número completo
- ▶ Más información del artículo
- ▶ Página de la revista en redalyc.org

 redalyc.org

Sistema de Información Científica

Red de Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal
Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto

Nanotecnología para la energía fotovoltaica

L. Hernández, J.C. Rimada, M. Courel y C.I. Cabrera

*IMRE- Facultad de Física, Universidad de La Habana,
Colina Universitaria, 10400, La Habana, Cuba.*

Received 25 February 2013; accepted 6 March 2013

Variadas son las vías para lograr una reducción de los costos de la energía fotovoltaica. Una de las más promisorias es el incremento de la eficiencia de conversión de la energía solar en eléctrica mediante el uso de la nano-tecnología. Celdas fotovoltaicas que permiten una mayor absorción de fotones del espectro solar funcionan en base a pozos cuánticos, superredes y puntos cuánticos. Estos novedosos dispositivos se encuentran en pleno desarrollo, tanto desde el punto de vista tecnológico como científico. En el trabajo se mostrarán los resultados de celdas solares con confinamiento cuántico de InGaAs/GaAsP/GaAs con múltiples pozos cuánticos tensionados e InGaNAs/GaAs con múltiples pozos cuánticos y superredes, evidenciando las potencialidades de estos dispositivos.

Descriptores: Pozos cuánticos, tensión en sólidos, celdas solares, superredes.

Here, we discuss how one can increase the efficiency of photovoltaic processes for the production of energy by means of nanotechnology. Solar cells based on quantum wells, quantum points, and superlattices show a greater photon absorption within the solar spectrum. These novel devices are still in the technological development phase and a full theoretical understanding. We show results for the multi-well quantum, and superlattices, confined systems InGaAs/GaAsP/GaAs and InGaNAs/GaAs, under stress; with promising applications.

Keywords: Quantum well device; strains in solids; solar cells and arrays; superlattice.

PACS: 85.35 Be; 62.20.-x; 84.60.Jt; 66.65.Fg

1. Introducción

La inclusión de pozos cuánticos en las celdas solares ha sido motivo de investigaciones tanto en el campo teórico como en el experimental, demostrándose que es posible obtener eficiencias mayores a la celda de homo-unión. Barnham y Duggan [1] fueron los primeros en considerar la inclusión de pozos cuánticos dentro de la región intrínseca de una celda $p - i - n$, proponiendo las celdas solares en base a múltiples pozos cuánticos (MQW) y a superredes (SL). La incorporación de pozos cuánticos permite incrementar la absorción de fotones, pero contribuye al mismo tiempo un aumento de la probabilidad de recombinación de los portadores. De ahí que varios trabajos han estado encaminados a optimizar la eficiencia de las celdas, siendo el AlGaAs/GaAs el material más estudiado [2-4]. Sin embargo, fabricar pozos cuánticos de GaAs en una celda de AlGaAs, no es la mejor opción. Para poder obtener una celda solar eficiente, resulta necesario emplear el GaAs como material volumétrico, por ser el de mayor eficiencia teórica. Esto implica encontrar un material que pueda ser utilizado como pozo cuántico en celdas solares de GaAs, que cumpla no sólo la condición de tener un menor ancho de banda prohibida, sino también una constante de red igual a la del GaAs, para evitar la recombinación en las interfaces.

Dos vías son utilizadas en este trabajo para estudiar las celdas solares de GaAs con pozos cuánticos. Una es el empleo del material cuaternario $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}$ que al incorporar una concentración de indio igual o menor al 2.85 % de la de nitrógeno, se logra una disminución del ancho de

la banda prohibida, manteniendo la constante de red idéntica a la del GaAs [5]. Esta propiedad hace muy atractivo este compuesto para ser empleado como pozo cuántico en celdas solares de GaAs con confinamiento cuántico. La otra vía es la inclusión de MQW de GaAsP/InGaAs con tensiones balanceadas en la región intrínseca de una celda solar $p - i - n$ de GaAs.

2. Modelo para la celda solar con múltiples pozos cuánticos

El comportamiento de la densidad de corriente en función del voltaje para una celda solar con múltiples pozos cuánticos (MQWSC), puede ser determinado a través de la expresión [2,4]:

$$J_{\text{MQWSC}} = J_0 (1 + r_R \beta) \left[\exp \left(\frac{qV}{kT} \right) - 1 \right] + (\alpha r_{NR} + r_S) \left[\exp \left(\frac{qV}{2kT} \right) - 1 \right] + J_{PH}. \quad (1)$$

Donde r_R , r_{NR} y r_S representan las razones de incremento de la recombinación radiativa, no radiativa y la recombinación en las interfaces debido a la presencia de los pozos cuánticos en la región intrínseca, α y β son parámetros definidos por Anderson [6]. La fotocorriente J_{PH} puede ser determinada a partir de la integración de la eficiencia cuántica

interna $QE_{\text{total}}(\lambda)$ a partir de la expresión:

$$J_{\text{PH}} = q \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} F(\lambda) QE_{\text{TOTAL}}(\lambda) d\lambda. \quad (2)$$

Donde $F(\lambda)$ es el número de fotones por longitud de onda correspondientes al espectro AM1.5. La eficiencia cuántica interna total de la celda puede ser determinada una vez conocidas las contribuciones de cada región mediante la expresión:

$$QE_{\text{total}}(\lambda) = QE_n(\lambda) + QE_p(\lambda) + QE_{\text{int}}(\lambda). \quad (3)$$

El aporte a la eficiencia cuántica de las regiones n y p son evaluadas siguiendo el procedimiento clásico reportado por Hovel [7]. En cambio, para la región intrínseca hay que tener presente la contribución de los pozos [2,4]:

$$QE_{\text{int}}(\lambda) = [1 - R(\lambda)] \exp\{-(\Sigma \alpha_i z_i) \times [1 - \exp(-\alpha_B W - NL_W \alpha_W^*)]\}. \quad (4)$$

Donde $R(\lambda)$ es la reflectividad en la superficie de la celda en función de la longitud de onda, N el número de pozos, L_W el ancho de los pozos y W el ancho de la región intrínseca. El factor exponencial representa la atenuación de la luz en las capas anteriores a la región intrínseca, α_B y α_W son los coeficientes de absorción de los materiales de barrera y de pozos, siendo el coeficiente de absorción del pozo determinado según la expresión reportada por Bastar [9]. De esta forma mediante la Ec. 1, considerando las expresiones (2)-(4) es posible estudiar el comportamiento de una MQWSC en función de los anchos y profundidad de los pozos.

3. Modelo para la celda solar con superredes

En una MQWSC al considerar pozos separados por barreras finas, si se dan las condiciones para que se solapen las funciones de onda correspondientes a los estados de los pozos adyacentes, será posible obtener una minibanda. Bajo estas condiciones, cada pozo no podrá ser tratado como una entidad independiente como en el caso de las MQWSC, obteniéndose entonces una celda solar en base a superredes (SLSC). Desde el punto de vista teórico, las principales ventajas que ofrecen las SLSC frente a las MQWSC, es que al existir una minibanda, la absorción de fotones puede ser incrementada, los pares electrón-hueco no se encuentran confinados disminuyendo por tanto la probabilidad de recombinación, al tiempo que los portadores podrán escapar de los pozos de forma más efectiva. Por tanto, un modelo desarrollado para el estudio de las SLSC debe partir de investigar las condiciones bajo las cuales se puede obtener una minibanda.

3.1. Método de la matriz de transferencia

Considerando como solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, aplicada a cada barrera y pozo que

conforman la superred, bajo la presencia del campo eléctrico, combinaciones lineales de las funciones de Airy son utilizadas. Considerando las condiciones de frontera para cada intercara, se encuentra una matriz M que relaciona la función de onda del primer pozo con la función de onda del último pozo correspondiente a la superred:

$$\psi_i = M \psi_f. \quad (5)$$

Donde la matriz M es función de la energía de los portadores, de los anchos de los pozos y las barreras, de la profundidad de los pozos y de la intensidad del campo eléctrico. Una vez conocida la matriz M , es posible determinar el coeficiente de tunelaje T el cual es la razón entre la densidad de corriente de probabilidad de la onda saliente del último pozo y la densidad de corriente de probabilidad de la onda que entra al primer pozo. Considerando que la onda saliente del último pozo no tiene componente reflejada, el coeficiente de tunelaje para una superred de N pozos puede ser determinado a través de la expresión:

$$T = \frac{k_f}{k_i} \frac{m_i^*}{m_f^*} \frac{1}{|M_{11}|^2}. \quad (6)$$

Donde m_i^* y m_f^* son las masas efectivas de los portadores en el primero y último pozo, siendo k_i y k_f los vectores de onda correspondientes del primero y último pozo, M_{11} es el término (1,1) de la matriz M . A partir de la Ec. 6 puede realizarse un estudio del coeficiente T en función de diversos parámetros tales como los anchos de pozos y barreras, profundidad de los pozos y de la intensidad del campo eléctrico. De esta forma siguiendo el procedimiento reportado en Ref. 8, se pueden obtener las condiciones bajo las cuales se obtiene la minibanda en la superred (condiciones de resonancia), siendo el ancho de la minibanda el rango de valores para los cuales el coeficiente de tunelaje es cercano a la unidad. Las condiciones de resonancia sólo pueden ser encontradas si los pozos cuánticos en la superred poseen anchos diferentes.

3.2. Dependencia J-V para la SLSC

La dependencia de la densidad de corriente-voltaje para una SLSC, puede ser determinada mediante la expresión desarrollada para las MQWSC en Ec. (1). Para ello, resulta necesario definir el concepto de “cluster”, el cual es el conjunto de pozos acoplados para los cuales se obtienen las condiciones de resonancia, siendo el mismo tomado como una identidad. En las SLSC el cluster será la identidad equivalente a los pozos de las MQWSC. Para poder determinar la dependencia de la densidad de corriente-voltaje de una SLSC es necesario encontrar las expresiones para calcular la densidad de estados efectivos, el coeficiente de absorción y el coeficiente de recombinación radiativo correspondientes al cluster. La foto-corriente J_{PH} para una SLSC será determinada igualmente mediante la Ec. (2). La recombinación en las intercaras se asume nula considerando el perfecto acoplamiento entre los dos materiales.

3.3. Densidad de estados efectivos

Considerando la expresión reportada en la literatura para determinar la densidad de estados de una superred [9], asumiendo un cambio brusco en la densidad de estados tridimensional para valores de energía superiores al valor energético correspondiente a la altura de la barrera. Igualmente se con-

sidera que la minibanda solamente se extiende dentro de la longitud del cluster y que la aproximación de Boltzman para la ecuación de Fermi-Dirac es válida, se encontró una expresión por primera vez para la densidad de estados efectivos para los electrones en función del ancho de la minibanda Γ_e [10]:

$$g_e = \frac{m_e^*}{\pi d_{SL} \hbar^2} \left[\int_0^{\Gamma_e} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \arcsin \left(\frac{E - \frac{\Gamma_e}{2}}{\frac{\Gamma_e}{2}} \right) \right] \exp \left(-\frac{E + E_e}{kT} \right) dE \right. \\ \left. + kT \left[\exp \left(-\frac{E_e + \Gamma_e}{kT} \right) - \exp \left(-\frac{\Delta E_c}{kT} \right) \right] \right] + 2 \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{\hbar^2} \right)^{3/4} \left[2\sqrt{\frac{\Delta E_c}{\pi kT}} \exp \left(-\frac{\Delta E_c}{kT} \right) + \text{erfc} \sqrt{\frac{\Delta E_c}{kT}} \right]. \quad (7)$$

donde m^* es la masa efectiva de los electrones, d_{SL} el período de la superred, E_e representa el borde inferior energético de la minibanda, ΔE_c la profundidad del pozo y erfc es la función error complementaria. Siguiendo el mismo procedimiento puede encontrarse una expresión similar para los huecos ligeros y huecos pesados.

3.4. Coeficiente de absorción

Haciendo uso de la regla de oro de Fermi, considerando la aproximación dipolar de la función de onda envolvente y asumiendo la de banda coseno, puede encontrarse una expresión para determinar el coeficiente de absorción para la transición hueco ligero-minibanda de conducción en función de la energía [11]:

$$\alpha_{lh-e}(E) = \frac{q^2}{cm_0^2 \varepsilon_0 n_r d_{SL} \hbar^2 \omega} |\langle f | a.p | i \rangle|^2 \\ \times \frac{m_{lh}^* + m_e^*}{m_{lh}^* m_e^*} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arcsin \left[\frac{E - E_{g0} - \frac{\Gamma_e + \Gamma_{lh}}{2}}{\frac{\Gamma_e + \Gamma_{lh}}{2}} \right] \right\}. \quad (8)$$

Siendo n_r el índice de refracción de la heteroestructura, $|\langle f | a.p | i \rangle|$ el elemento matricial entre el estado inicial i y el estado final f , donde a su vez a es un vector unitario y p es el momentum. Γ_e es el ancho de la banda para los electrones y Γ_{lh} el ancho de la minibanda de los huecos ligeros, m_e^* y m_{lh}^* las masas efectivas de los electrones y huecos ligeros y E_{g0} la diferencia energética entre el borde inferior de la minibanda de conducción y el borde superior de la minibanda de valencia.

Una expresión similar a la anterior es encontrada para las transiciones huecos pesados-minibanda de conducción. De esta forma el coeficiente de absorción para un cluster en función de la energía podrá ser determinado, una vez conocido el coeficiente de absorción para las transiciones huecos ligeros-electrones y para las transiciones huecos pesados-electrones, que vienen dado por:

$$\alpha_{\text{cluster}}(E) = \alpha_{lh-e}(E) + \alpha_{hh-e}(E). \quad (9)$$

3.5. Coeficiente de recombinación radiativo

Evaluado el coeficiente de absorción es posible determinar el coeficiente de recombinación radiativo para el cluster mediante la teoría del balance detallado, considerando que la separación entre los quasi-niveles de Fermi permanece constante e igual al voltaje aplicado V :

$$B = \frac{8\pi n_r^2}{c^2 h^3 n_0 p_0} \int_{E_1}^{E_2} \frac{\alpha E^2 dE}{\exp \left(\frac{E}{kT} \right) - 1}. \quad (10)$$

Donde E_1 y E_2 son los valores de energía dentro de los que se realiza la integración, siendo n_0 y p_0 las concentraciones de electrones y huecos en equilibrio.

Así, una vez determinadas las expresiones para calcular la densidad de estados efectivos, el coeficiente de absorción y el coeficiente de recombinación radiativo correspondientes al cluster es posible evaluar la Ec. (1) para determinar la eficiencia de las SLCS en función del ancho de la minibanda.

4. Celdas solares de $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$

En este epígrafe se realiza un estudio teórico del comportamiento de las celdas solares con múltiples pozos cuánticos (MQWSC) de GaAs/GaInNAs en función del ancho y profundidad de los pozos cuánticos. Igualmente, es desarrollado un modelo a partir del cual se puede estudiar el comportamiento de las celdas solares en base a superredes (SLSC) formadas por la misma heteroestructura. Las condiciones de resonancia, que favorecen el escape de los portadores fotogenerados en una superred, fueron determinadas mediante el método de la Matriz de Transferencia, con pozos cuánticos de espesor variable siguiendo el método reportado por Reyes-Gómez *et al* [8]. La característica volt-ampérica para ambas configuraciones es determinada calculando la densidad de estados efectiva y el coeficiente de absorción, siguiendo el procedimiento reportado en Ref. 4. Finalmente, se estudia la

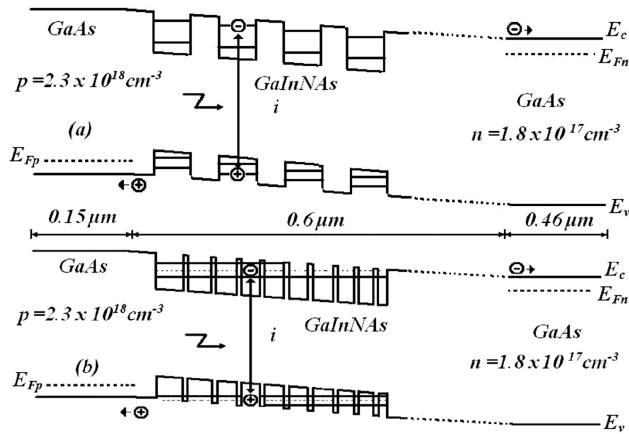


FIGURA 1. Esquema de una celda solar tipo p-i-n con múltiples pozos cuánticos (a) y con superredes (b) en la región intrínseca.

eficiencia en las SLSC en función de la longitud o ancho de la superred, siendo estos valores comparados con los obtenidos en una MQWC optimizada.

4.1. Resultados y discusión

Para estudiar el comportamiento de la eficiencia de las MQWSC y de las SLSC de GaInNAs/GaAs, se simuló una celda tipo $p - i - n$, con los pozos cuánticos insertados en la región intrínseca tal y como se muestra en la Fig. 1.

Los anchos de cada región son $0.15 \mu\text{m}$ (emisor), $0.6 \mu\text{m}$ (intrínseca) y $0.46 \mu\text{m}$ (base), mientras que el dopaje de las regiones p y n son $2.3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ y $1.8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, respectivamente. Haciendo uso de las expresiones reportadas en Ref. 13 para el cálculo de las masas efectivas y el ancho de la banda prohibida del GaInNAs, se determinó la dependencia de la eficiencia normalizada para una MQWSC de 15 pozos, en función de su ancho, siendo este resultado mostrado en la Fig. 2. La eficiencia normalizada se define como la razón

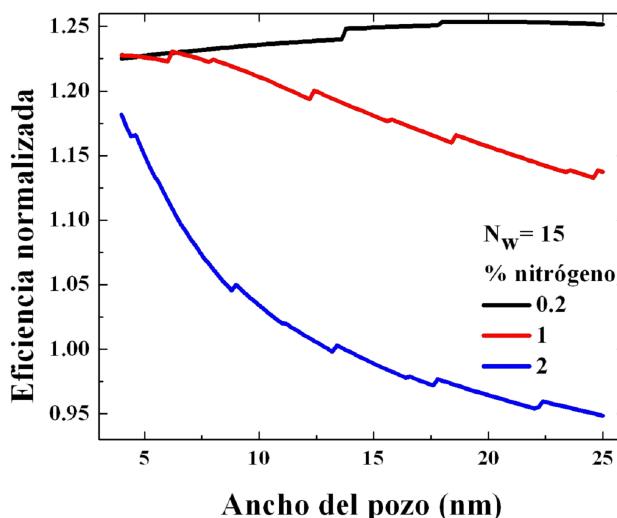


FIGURA 2. Dependencia de la eficiencia normalizada para MQWSC en función del ancho de los pozos para diferentes concentraciones de nitrógeno.

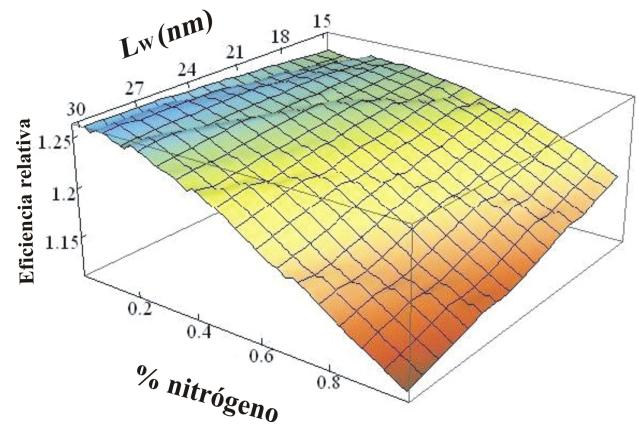


FIGURA 3. Dependencia de la eficiencia normalizada para MQWSC en función de la concentración de nitrógeno y de los anchos de los pozos.

entre la eficiencia de la MQWSC y la eficiencia de una celda con las mismas características pero sin pozos cuánticos. En la figura se observa, que para concentraciones del 0.2 % de N, se obtiene que la eficiencia de una MQWSC es incrementada con el aumento del ancho de los pozos, siendo superado la eficiencia de una celda sin pozos en un valor cercano al 25 %. Cada salto en la eficiencia se corresponde con la incorporación de nuevos niveles de energía en el pozo, lo cual permite una mayor absorción de fotones y por ende un aumento en la photocorriente, aumentando por tanto la eficiencia. En la medida que aumenta la concentración de nitrógeno se obtiene una disminución en la eficiencia, lo cual es debido a que al aumentar la profundidad de los pozos, los portadores se encuentran más confinados, lo cual contribuye a un aumento de las pérdidas por recombinación, disminuyendo por ende la eficiencia. Sin embargo, nótese que aún para 1 % de N, la eficiencia de estas celdas es superior a la de GaAs sin pozos. Con el fin de optimizar la eficiencia de las MQWSC, se calculó la eficiencia normalizada en función del ancho del pozo y de la concentración de nitrógeno, siendo este resultado mostrado en la Fig. 3. A partir de la figura puede observarse que hasta concentraciones de 0.5 % de N, la eficiencia de las celdas se incrementa con el aumento del ancho de los pozos, prevaleciendo de esta forma la absorción frente a la recombinación, alcanzándose un valor de saturación de la eficiencia superior en un 25 % en comparación con la celda sin pozos. Para concentraciones de nitrógeno mayores se observa que la eficiencia disminuye debido al incremento de la recombinación.

Para estudiar el comportamiento de la eficiencia en la SLSC, primeramente se determinaron los valores de los anchos de los pozos, que permiten la formación de la minibanda, en presencia del campo eléctrico creado por los átomos ionizados de las regiones n y p. Las condiciones de resonancia fueron determinadas para dos clusters con pozos cuánticos de ancho variable. El primer cluster comienza con un pozo de 25 nm de ancho terminando con un pozo de ancho 1 nm, siendo la longitud del cluster de 147 nm. Mientras que el

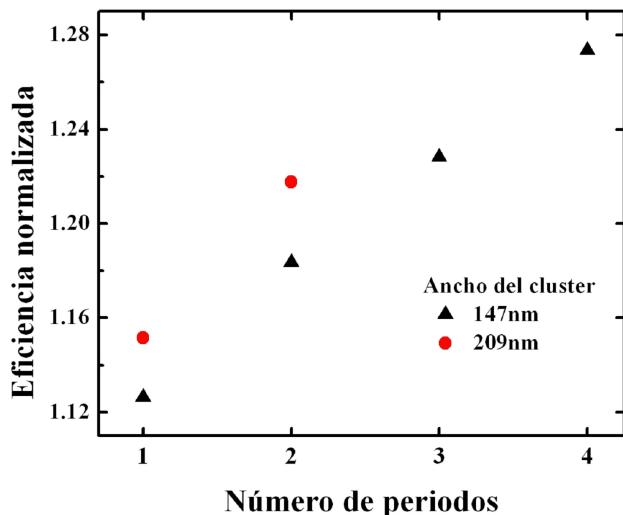


FIGURA 4. Dependencia de la eficiencia normalizada para dos SLSC en función del número de clusters, utilizando clusters de diferentes anchos.

segundo, comienza con un pozo de 25 nm y termina en un pozo de 15 nm de ancho, siendo su longitud de 209 nm. Para ambas configuraciones se consideran 10 pozos dentro del cluster, separados por barreras finas de 1 nm, siendo los pozos con concentraciones de nitrógeno de 0.5 %. La eficiencia de las SLSC es calculada en función del número de clusters para ambas configuraciones y es ahora normalizada por la eficiencia máxima obtenida para las MQWSC, siendo estos resultados mostrados en la Fig. 4. Al comparar las eficiencias de dos celdas con igual número de clusters se observa que el mayor valor corresponde a aquella celda que posee clusters de mayores anchos, sin embargo, se lograrán alcanzar mejores eficiencias en SLSC con clusters de anchos menores, puesto que de esta forma es posible incluir más clusters, estando la absorción favorecida por el número de pozos en lugar del ancho de los pozos. Como resultado interesante se obtuvo que la eficiencia de las SLSC puede superar al óptimo valor encontrado en las MQWSC en un valor incrementado cercano al 27 %, demostrándose de esta forma un aumento en la absorción y una disminución en la recombinación producto a la existencia de una minibanda.

5. Celdas solares de GaAsP/InGaAs/GaAs

Las celdas solares de GaAs con múltiples pozos cuánticos de GaAsP/InGaAs y tensiones balanceadas es una nueva propuesta para incrementar la eficiencia de conversión de las convencionales celdas solares de mayores rendimientos [12,13]. La incorporación de pozos cuánticos en la región intrínseca de una estructura p-i-n permite extender la absorción de fotones y ampliar la respuesta espectral. La photocorriente se incrementa cuando pozos cuánticos tensionados de InGaAs son agregados en una celda p-i-n GaAs. Sin embargo, el desacople reticular entre InGaAs y GaAs impide la incorporación de varios pozos cuánticos al ocurrir la relajación

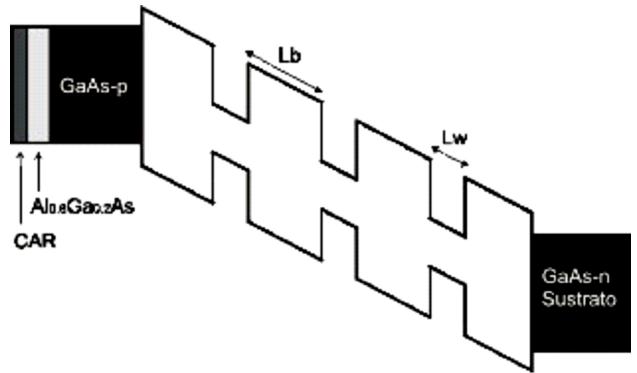


FIGURA 5. Esquema de una SBSC a ser diseñada. La CAR es una bicapa antirreflejante de MgF:SiN. La capa pasivadora de AlGaAs tiene un espesor de 40 nm; el emisor con $p = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ posee un ancho de 200 nm, la base con $n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ y espesor de 500 nm. El número de pozos y barreras es variable al igual que el ancho W .

producto de las tensiones compresivas, apareciendo defectos estructurales que provocan el incremento de las corrientes de fugas y con ello la disminución de la eficiencia de conversión. Las tensiones compresivas de los pozos cuánticos de InGaAs pueden ser compensadas con las tensiones expansivas de las barreras de GaAsP y de esta forma varios pozos cuánticos pueden incorporarse en la región intrínseca sin relajarse.

La celda solar de GaAsP/InGaAs/GaAs (SBSC) con múltiples pozos cuánticos y tensiones balanceadas que es modelada, se muestra esquemáticamente en Fig. 5. En la región intrínseca se insertan los pozos cuánticos. Para que las tensiones estén compensadas, los espesores de las barreras y los pozos deben escogerse de forma tal que exista un perfecto acoplamiento entre la constante de la red del GaAs y la constante reticular promedio que surja en la región intrínseca producto de la inserción de las capas de $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$ e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Así, debe cumplirse:

$$a_{\text{GaAs}} \equiv \langle a \rangle = \frac{L_b a_{\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y} + L_w a_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}}{L_b + L_w}, \quad (11)$$

donde L_b y a_{GaAsP} son el espesor y constante de la red para la barrera, respectivamente y L_w y a_{InGaAs} los valores correspondientes a los pozos.

En el presente trabajo se presenta una optimización del rendimiento de una celda solar de GaAsP/InGaAs/GaAs con múltiples pozos cuánticos y tensiones balanceadas a través de un diseño de los espesores de las barreras y pozos en la región intrínseca. Para el cálculo de la eficiencia, se extenderá el modelo reportado en la Ref. 4 para incluir en la relación $J - V$ los efectos de las tensiones y el campo eléctrico en la absorción de los fotones en la región intrínseca.

5.1. Efecto de las tensiones en la absorción de fotones en la región intrínseca

Las tensiones deforman la red cristalina de las capas de GaAsP e InGaAs modificando sus anchos de banda prohibida. En el material de pozo, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, las tensiones compresivas producen el ensanchamiento de la banda prohibida

con el aumento de la concentración de In. Contrariamente, el material de barrera, $\text{GaAs}_{1-y}\text{P}_y$, las tensiones expansivas producen el estrechamiento de la banda prohibida con el aumento de la concentración de P.

Las tensiones están relacionadas con el cambio relativo del período de la red, ε_{ij} :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\Delta a_i}{a_j}. \quad (12)$$

Estos valores pueden ser diferentes en cada dirección, a es la constante de red, $i, j = x, y, z$. En el caso de pozos cuánticos tensionados crecidos en la dirección z con orientación (001), se tienen tensiones biaxiales con $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \neq \varepsilon_{zz}$ y $\varepsilon_{ij} = 0$, $\forall i \neq j$. Las dos componentes de las tensiones están relacionadas por las constantes elásticas C_{11} y C_{12} en la forma¹⁴

$$\varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{xx}, \quad (13)$$

con $\varepsilon_{xx} = (a_{st} - a_0)/a_0$, donde a_{st} y a_0 son las constantes de red del cristal tensionado y sin tensionar, respectivamente. Las tensiones causan el siguiente cambio del borde de las bandas en el punto Γ ¹⁵:

$$E_{hh}(\vec{k} = 0) = E_{hh}^0 = E_v^0 - P_\varepsilon - Q_\varepsilon, \quad (14)$$

$$E_{lh}(\vec{k} = 0) = E_{lh}^0 = E_v^0 - P_\varepsilon + Q_\varepsilon, \quad (15)$$

donde E_{hh}^0 y E_{lh}^0 son los desplazamientos de los niveles de energía de los huecos pesados y ligeros, respectivamente, E_v^0 marca el borde de la banda de valencia y

$$P_\varepsilon = -a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (16)$$

$$Q_\varepsilon = -\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}). \quad (17)$$

El borde de la banda de conducción es dado por

$$E_c(\vec{k} = 0) = E_c^0 = E_v^0 + E_g + a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (18)$$

donde E_g es el ancho de la banda prohibida y los factores a_c y a_v son los potenciales de deformación hidrostática, y b es el potencial de deformación de ruptura.

Variando los valores del vector de onda \vec{k} se obtienen las relaciones de dispersión para ambos materiales, InGaAs y GaAsP, las cuales son mostradas en la Fig. 6. Obsérvese de la Fig. 6(a) que para una concentración de In, $x = 0.2$, los valores del cambio relativo del período de la red son, $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = -0.014$; $\varepsilon_{zz} = 0.013$, provocando un aumento de la banda prohibida igual a 121 meV. En tanto para una concentración de P, $y = 0.3$, Fig. 6(b), los valores del cambio relativo del período de la red son $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 0.019$; $\varepsilon_{zz} = -0.010$ y ahora la banda prohibida disminuye en 176 meV. Cuando los valores de In y P se varían, las tensiones en las capas de barrera y pozo se modifican provocando una variación en el umbral de absorción en ambas películas.

5.2. Cálculo de los niveles de energía en pozos cuánticos tensionados en la banda de conducción

Para el cálculo de los estados electrónicos en un pozo cuántico en la banda de conducción se asumen las aproximaciones de función de onda envolvente y que la banda no interacciona fuertemente con ninguna otra, así se considera parabólica para todas las energías. Para un pozo cuántico en la banda de conducción crecido en la dirección z , las energías y funciones de onda de los electrones se obtienen de la solución de la ecuación de Schrödinger.

5.3. Cálculo de los niveles de energía en pozos cuánticos tensionados en la banda de valencia

Los niveles de energía de las bandas de huecos pesados hh y huecos ligeros lh en los pozos cuánticos ($k_{xy} = 0$) en la banda de valencia se obtienen resolviendo el Hamiltoniano de Kohn-Luttinger (4×4) con el efecto de las tensiones, H_{KL}^ε [16]:

$$H_{KL}^\varepsilon = H_{KL} + H^\varepsilon. \quad (19)$$

H_{KL} es el Hamiltoniano de Kohn-Luttinger y H^ε es el Hamiltoniano de tensiones para un crecimiento epitaxial en la dirección (001) y viene dado por:

$$H^\varepsilon = \begin{pmatrix} H_{hh}^\varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H_{lh}^\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H_{lh}^\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H_{hh}^\varepsilon \end{pmatrix}, \quad (20)$$

con

$$H_{hh}^\varepsilon = a_v(2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) - b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz}), \quad (21)$$

$$H_{hh}^\varepsilon = a_v(2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz})' + b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz}) - b^2 \frac{(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})^2}{\Delta_{s0}}. \quad (22)$$

En H_{KL}^ε se desprecian las interacciones de las bandas hh y lh con la banda de conducción y con la banda spin-órbita, pues en los materiales con que se trata en este trabajo, la energía del desdoblamiento spin-órbita Δ_{SO} mayor que 300 meV. Los pozos cuánticos tratados en este trabajo se consideran pseudomórficos ya que producto del confinamiento y la deformación se rompe la degeneración de las bandas hh y lh en $\vec{k} = 0$, separándose en energía y disminuyendo fuertemente su interacción. Entonces es posible en primera aproximación considerar las bandas de hh y lh no degeneradas y desacopladas. Para determinar los niveles de energía dentro del pozo para hh y lh se emplea la ecuación:

$$[H_{KL}^\varepsilon - IE] \Psi = 0, \quad (23)$$

donde $\Psi = (\psi_{hh}^\uparrow \psi_{lh}^\uparrow \psi_{lh}^\downarrow \psi_{hh}^\downarrow)^T$, siendo $\psi_{hh}^{\uparrow,\downarrow}$ y $\psi_{lh}^{\uparrow,\downarrow}$ las funciones de onda envolvente dependientes de la proyección del

spin (arriba \uparrow , abajo \downarrow) e I es la matriz unidad. Como resultado de igualar los términos de la diagonal a cero la Ec. 23 en la aproximación de la masa efectiva se transforma en:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{d^2}{dz^2} + V(z) + H_{hh}^\varepsilon - E_{hh} \right] \psi_{hh}^{\uparrow,\downarrow}(z) = 0, \quad (24)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{d^2}{dz^2} + V(z) + H_{lh}^\varepsilon - E_{lh} \right] \psi_{lh}^{\uparrow,\downarrow}(z) = 0, \quad (25)$$

donde $V(z)$ es el potencial de barrera o pozo según la región, m_0 es la masa del electrón libre, γ_1 y γ_2 son parámetros de Konh-Luttinger.

6. Efecto del campo eléctrico en los pozos cuánticos.

Como resultado de la impurificación en las zonas n y p , los pozos cuánticos en la zona intrínseca se encuentran bajo la acción de un campo eléctrico perpendicular al plano de crecimiento, teniendo lugar el efecto Stark. Este efecto provoca la disminución en la energía del borde de absorción; los niveles de energía de los pozos cuánticos en la banda de conducción descienden, mientras en la banda de valencia ascienden. En un sistema de múltiples pozos cuánticos, el campo eléctrico inclina la estructura de banda, lo cual provoca la desintonía de los niveles de energía en los pozos cuánticos, alcanzándose la condición de pozos desacoplados con independencia de los valores de L_b y L_w , los cuales están dados por la condición del balance de tensiones. Las correcciones a los niveles energéticos se encuentran resolviendo la ecuación de Schrödinger por el método perturbativo. Se comprobó que en presencia de los campos eléctricos utilizados, el desplazamiento de los niveles fue mucho menor que la diferencia entre éstos y los niveles inmediatos sin perturbar.

7. Resultados y discusión

La eficiencia cuántica interna fue calculada siguiendo el procedimiento descrito en la Sec. 2. Los valores de las constantes fueron recabados de la literatura. En Fig. 7 se muestra QE (λ), y el aporte de las regiones n , p e i , observándose que se logran altos valores, cercanos a la unidad, en una ancha región espectral. También se resalta la extensión del espectro para longitudes de onda mayores al umbral de absorción del GaAs ($\lambda = 890$ nm) como resultado de la absorción de fotones en los pozos cuánticos, lo que induce un incremento de la fotocorriente. La QE (λ) calculada es muy similar a un reporte experimental [14] en este tipo de celdas, a pesar que existen diferencias en la CAR utilizada y los espesores de las distintas capas.

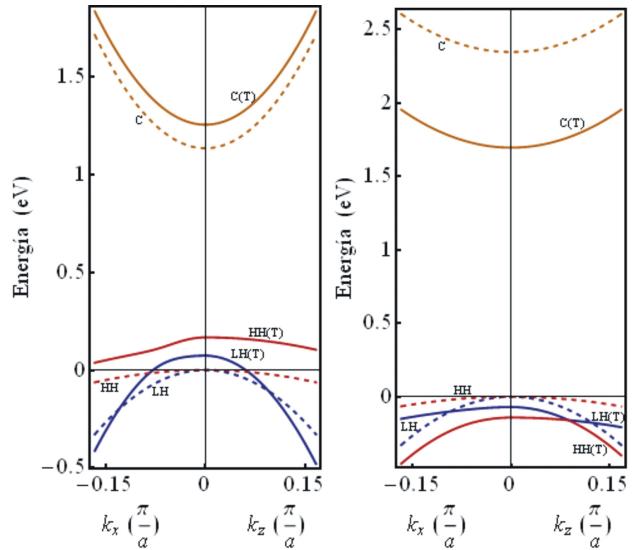


FIGURA 6. Relación de dispersión alrededor del centro de la primera zona de Brillouin. HH(T) y LH(T) son las bandas de huecos pesados y ligeros tensionados, respectivamente. (a) $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$, $e_{xx} = -0.014$; $e_{zz} = 0.013$. (b) $\text{GaAs}_{0.7}\text{P}_{0.3}$, $e_{xx} = 0.019$; $e_{zz} = -0.010$.

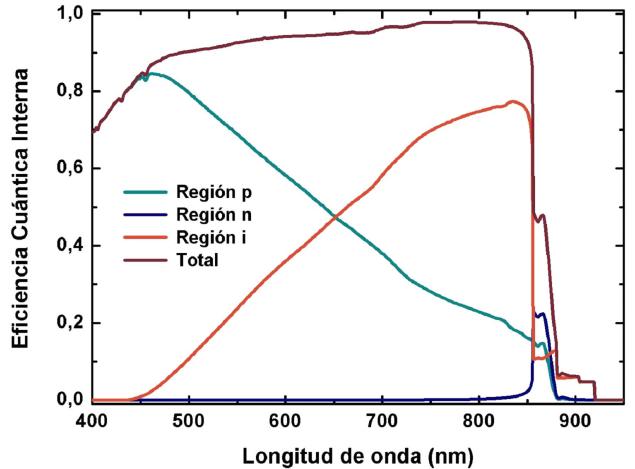


FIGURA 7. Eficiencia cuántica interna modelada versus longitud de onda para una SBSC. Composición de P, $y = 0.06$, composición de In, $x = 0.11$, $N_w = 20$, $L_w = 15$ nm. Se muestran las contribuciones de las regiones n , p e i .

Las curvas J vs V fueron computadas a través de la Ec. 1 sin tener en cuenta la recombinación en las intercaras, ya que se supone un perfecto acoplamiento entre el GaAs y las capas insertadas en la región intrínseca. También, las tensiones y el campo eléctrico que depende del ancho W , fueron considerados para el cálculo de la absorción de fotones en la región intrínseca. Los valores de las constantes utilizadas fueron extraídos de la literatura. De las curvas volt-ampérea se determinó el punto de máxima potencia y la eficiencia de conversión se computó en función del ancho y profundidad de los pozos.

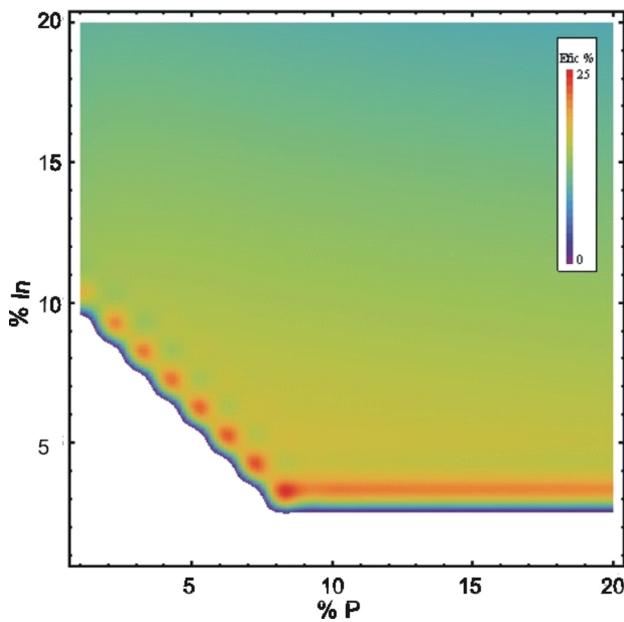


FIGURA 8. Eficiencia versus composición de In y P. El ancho del pozo cuántico es $L_w = 15$ nm, en tanto el espesor W fue variable para contener 20 pozos. La zona blanca se explica en el texto.

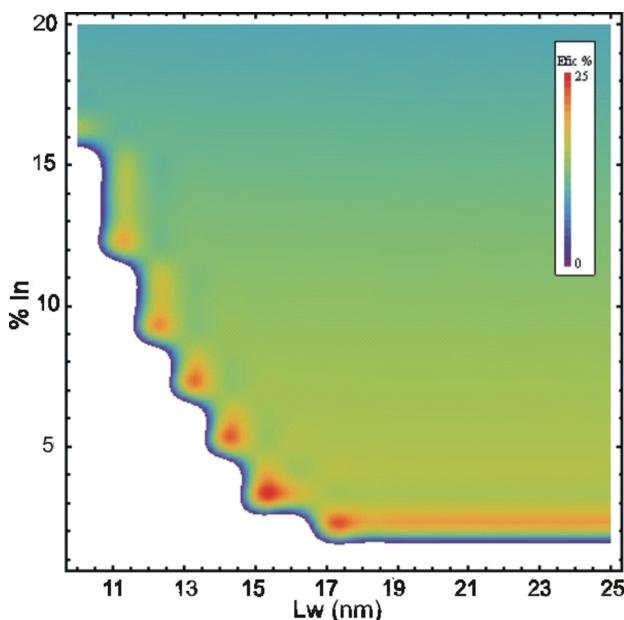


FIGURA 9. Eficiencia en función de la concentración de In y el ancho del pozo cuántico L_w . La composición de P, $y = 0.08$, y $W \sim 1 \mu\text{m}$. La zona blanca se explica en el texto.

Inicialmente se investigó cual era la composición de In y P, es decir, la profundidad de los pozos, con que se alcanzan las máximas eficiencias. La Fig. 8 muestra los valores de eficiencia calculada en función de la composición de In y P para $L_w = 15$ nm y $N = 20$, de modo que el ancho W es variable para satisfacer la condición de balance de las tensiones. La zona de color blanco en la figura indica los casos que no son de interés en el rango de valores estudiados, ya que los niveles que aparecen, el campo eléctrico los desplaza al continuo. Igualmente no se consideran los casos en que la mínima transición energética es superior al umbral de absorción del GaAs. Obsérvese que para composiciones de 3 % de In y 8 % de P se alcanzan eficiencias tan elevadas como del 25 %. La eficiencia en función del ancho del pozo L_w y la composición de In se muestra en la Fig. 9 para una concentración de P, $y = 0.08$. Se escogió $W \sim 1 \mu\text{m}$, de manera que el número de pozos varía para que se cumpla la condición del balance de las tensiones. Siempre se comienza y termina en una barrera. Altas eficiencias son alcanzadas en un amplio rango de valores de In y ancho del pozo obteniéndose el máximo para $x = 0.02$ y $L_w = 17$ nm.

8. Conclusiones

Se desarrolló un modelo que permitió estudiar la viabilidad de las MQWSC y las SLSC de GaAs/GaInNAs. Se realizó un estudio del comportamiento de las MQWSC el cual mostró que es posible obtener rendimientos superiores a la eficiencia de la celda sin pozos cuánticos en un valor incrementado cercano al 25 %. La región en la cual la eficiencia de las MQWSC supera a la de la celda sin pozos fue determinada, siendo de esta forma posible optimizar la eficiencia de las MQWSC en función de los anchos de los pozos y profundidad de los pozos. Con el fin de evaluar la eficiencia de las SLSC, se desarrolló un modelo, para el cual resultó necesario determinar la densidad de estados efectivos, el coeficiente de absorción y la probabilidad de recombinación radiativa en función del ancho de la minibanda, encontrándose que la eficiencia de las SLSC puede superar en un 27 % al óptimo valor encontrado en las MQWSC, mostrándose de esta forma el dispositivo interesante para continuar con su estudio y posible fabricación.

Igualmente se demostró que las SBSC poseen una eficiencia de conversión elevada que las hace muy atractivas para su utilización en aplicaciones espaciales. Se ha extendido el modelo al considerar los efectos de las tensiones y el campo eléctrico en la absorción de los fotones en la región intrínseca, permitiendo optimizar el rendimiento de estas celdas. Se encontró que las máximas eficiencias se alcanzan entorno a los valores de composición de In, $x = 0.02$, P, $y = 0.08$ y $L_w = 17$ nm.

1. K.W.J. Barnham y C. Duggan, *J. Appl. Phys.* **67** (1990) 3490-3493.
2. J.C. Rimada, L. Hernandez, K.W.J. Barnham y J.P. Connolly, *Phys. Status Solidi B* **242** (2005) 1842-1845.
3. S.J. Lade y A. Zahedi, *Microelectron. J.* **35** (2004) 401-410.
4. J. C. Rimada, L. Hernández, J. P. Connolly y K. W. J. Barnham, *Microelectron. J.* **38** (2007) 513-518.
5. M. Henini, "Dilute nitride semiconductors", edited by M. Henini, vol. 1, pp. 1-2 (Elsevier, 2005).
6. N.G. Anderson, *J. Appl. Phys.* **78** (1995) 1850-1861.
7. H. J. Hovel, "Semiconductors and semimetals", solar cells, edited by R.K. Willardson, vol. 11 (Academic Press, 1975). pp. 15-19
8. E. Reyes-Gómez, L. E. Oliveira y M. de Dios-Leyva, *Physica B* **358** (2005) 269-278.
9. J. H. Davis, "The physics of low-dimensional semiconductor" (Cambridge University Press, 1998). pp. 182
10. Maykel Courel, J. C. Rimada y L. Hernández, *AlGaAs/GaAs superlattice solar cells. Aceptadp a publicar in Progress in Photovoltaics* (wileyonlinelibrary.com). DOI: 10.1002/pip.1178
11. J. Singh, "Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures" (Cambridge University Press, 2003). pp. 359-360
12. D.C. Johnson *et al.*, *Sol. Energ. Mat & Sol. Cell.* **87** 2005 169.
13. J.G.J. Adams, W. Elder, P. Stavrinou, K.W.J. Barnham. Efficiency enhancement in strain-balanced quantum well solar cells via anisotropic emission. 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference, 21-25 September 2009, Hamburg, Germany.
14. P. Harrison, *Quantum wells, wires and dots* (John Wiley & Sons, Ltd, 2005). p. 219-230.
15. J. Piprek, *Semiconductor Optoelectronic Devices* (Academic Press, 2003). p. 27-30.
16. J. Singh, *Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures* (Cambridge University Press, 2003). p. 129-140,