

DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE NOVEDOSAS CELDAS SOLARES BASADAS EN NANOESTRUCTURAS CUÁNTICAS

ENTIDAD EJECUTORA PRINCIPAL: Facultad de Física-Instituto de Ciencias y Tecnología de Materiales (IMRE). Universidad de La Habana

AUTORES PRINCIPALES: Luis M. Hernández García¹, Carlos I. Cabrera Perdomo², David A. Contreras Solorio², Julio C. Rimada Herrera³ y Carlos J. Rodríguez Castellanos¹.

COLABORADORES: Agustín Enciso Muñoz²

FILIACIÓN: ¹Facultad de Física, Universidad de La Habana, ²Unidad Académica de Física. Universidad Autónoma de Zacatecas, México, ³Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana.

AUTOR PARA LA CORRESPONDENCIA:

Luis M. Hernández García.

Facultad de Física. Universidad de La Habana. Colina Universitaria, 10400. La Habana.

E-mail: luisman@fisica.uh.cu

RESUMEN

Antecedentes

Este es un trabajo de continuación en busca de diseñar celdas solares de alta eficiencia. El autor principal ha obtenido cinco premios ACC, pero sólo dos están relacionados con heteroestructuras cuánticas, el último Premio ACC fue en e 2012. Sin embargo, en esta opción se presentan trabajos originales que enriquecen lo previo.

En esta presentación nosotros estudiamos la emisión anisotrópica y el reciclaje fotónico en celdas solar nanoestructuradas con confinamiento cuántico y balance de tensiones. La anisotropía se manifiesta como consecuencia del desdoblamiento de la banda de valencia debido a las compresiones que ocurren en los pozos cuánticos lo que elimina transiciones que contribuyen a la emisión. Nosotros investigamos tanto la emisión polarizada al plano que contiene al pozo cuántico (TM) la cual está exclusivamente acoplada al hueco ligero así como a la polarización en el plano del pozo cuántico (TE) que se encuentra asociada al hueco pesado. Se encontró por primera vez que la razón de emisión espontánea tanto la TM como la TE incrementan cuando el pozo cuántico se crece más profundo. Demostramos que la adición de un reflector de Braga distribuido puede incrementar la fotocorriente y disminuir las pérdidas por recombinación radiativa. Nosotros hemos examinado el impacto del reciclaje fotónico sobre el rendimiento de una celda solar

nonoestructurada con balance tensiones y hemos encontrado que pueden alcanzarse eficiencias superiores al 30%.

En aras de encontrar una nueva forma para calcular el coeficiente de absorción en nanoestructuras, en particular superredes, nosotros presentamos una nueva aproximación para evaluar la densidad de estados para sistemas cuasi-dimensionales, que vincula la densidad de estados confinados con la densidad de estados en el plano perpendicular. Usando el operador de convolución, encontramos una exacta expresión matemática que relaciona directamente las densidades de estado de las bandas de valencia y conducción conllevando una "joint density of states" para transiciones directas. Cuando se consideran semiconductores de baja dimensionalidad, otra expresión fue encontrada para la densidad de estados de los electrones y huecos que puede ser calculada mediante operaciones de convolución entre la dirección de confinamiento y el plano perpendicular. Usando ambas expresiones originales, pudimos calcular el coeficiente de absorción para pozos cuántico y superredes, pudiéndose extender a hilos y puntos cuánticos. Un resultado remarcable se obtuvo al encontrar que la JDOS de un pozo cuántico no es una función de paso, como ha estado reportado en los libros de texto.

Nuestro grupo fue el primero que estudió la viabilidad de celdas solares con superredes en la región intrínseca para celdas solares p-i-n de GaAs/GaInNAs. Sin embargo, en los primeros trabajos observamos que el rendimiento de la celda solar era muy sensible al campo eléctrico interno. Por ello se decidió utilizar superredes gaussianas, las cuales tienen excelentes características ya que el espectro de transmisión posee bandas de transparencia casi perfectas separadas por bandas donde no hay en absoluto transmisión. Por otra parte este arreglo aumenta la probabilidad de escape de electrones y huecos desde la superred. En la literatura se utiliza para calcular el ancho de la semibanda, que se genera en la superred, tanto el Método de la Matriz Transferencia (TMM) como el modelo de Kronig-Penny con simple potencial. Estas dos aproximaciones coinciden en resultados. Pero cuando hay campo eléctrico, entonces los resultados reportados difieren. Nosotros demostramos que el método TMM es el válido. Optimizando el ancho de la minibanda obtuvimos resultados de incremento de la eficiencia superiores a una celda solar de homounión con mucho menos sensibilidad al campo eléctrico interno.

Investigamos sustituir las superredes por capas de grafeno, con la certeza que la absorción de fotones será mayor. En la literatura reciente se han publicado dispositivos que contemplan una sola capa de grafeno entre dos barreras de h-BN. Pero para ser sustituida las superredes es necesario tener varias heteroestructuras de grafeno/h-BN. El problema entonces es establecer las condiciones para que ocurra la corriente de tunelaje. Para ello, diseñamos un dispositivo tal que la concentración de las diferentes capas de grafeno permitiera la alineación de los puntos de Dirac y entonces alcanzar la resonancia en la corriente de tunelaje. Nosotros encontramos por primera vez expresiones analíticas y numéricas para la característica I-V de la heteroestructura. Demostramos como la corriente de tunelaje es fuertemente amplificada en un dispositivo compuesto por heteroestructuras de grafeno/h-BN. Se discutió el efecto del alineamiento de las capas de grafeno en el rendimiento del dispositivo. También encontramos que la razón de transición entre las capas de grafeno es mayor para estados por encima del punto de Dirac, concluyó que conlleva a utilizar preferentemente capas de grafeno dopadas n.

COMUNICACIÓN CORTA

Introducción

Las vías para lograr una reducción de los costos de la energía fotovoltaica son muy variadas. Una de las más prometedoras es el incremento de la eficiencia de conversión de la energía solar en eléctrica mediante el uso de la nanotecnología. Celdas fotovoltaicas que permiten una mayor absorción de fotones del espectro solar funcionan en base a nanoestructuras cuánticas. Estos nuevos dispositivos se encuentran en pleno desarrollo, tanto desde el punto de vista tecnológico como científico. La incorporación de nanoestructuras cuánticas permite incrementar la absorción de fotones, pero contribuye al mismo tiempo a un aumento de la probabilidad de recombinación de los portadores. De ahí que varios trabajos han estado encaminados a optimizar la eficiencia de estas celdas solares.

Resultados

a) Celda Solar GaAsP/InGaAs/GaAs con múltiples pozos cuánticos (QW) con balance de tensiones (SB-QWSC)

En la figura 1 se muestra esquemáticamente SB-QWSC donde QWs se encuentran embebidos en la zona intrínseca de una celda solar de GaAs para extender el borde de absorción de fotones. Las capas de GaAsP e InGaAs fueron escogidas de manera tal que se acoplara a la constante de la red del GaAs.

Nosotros discutimos teóricamente los parámetros físicos: recombinación radiativa, ganancia y el reciclaje fotónico. El cuasi-nivel de Fermi para electrones (e^-) y huecos (h^+) fue calculado para computar la razón de emisión espontánea TE y TM en un QW y la ganancia como función de la composición de In. Similarmente, las transiciones ópticas en el QW son evaluadas para calcular el coeficiente de absorción. Entonces, presentamos los resultados de una SB-QWSC que tiene en cuenta un reflector de Bragg distribuido (DBR) y los efectos anisotrópicos. También calculamos la eficiencia cuántica y la eficiencia cuántica y de conversión, observando un incremento en su rendimiento. Estudiamos la emisión de la luz polarizada en el plano perpendicular al QW, que está relacionado las transiciones del h^+ pesado y la emisión polarizada en el plano del QW asociado a los h^+ ligeros. Se encontró que las razones de emisiones espontáneas TM y TE incrementan cuando los QW son más profundas. Demostramos que las tensiones compresivas biaxiales no suprimen la recombinación radiativa en el plano de los QWs, contrario a lo que se afirmaba en la literatura¹. La suposición que los portadores fotogenerados tienen escape unitario fue fuertemente avalado por

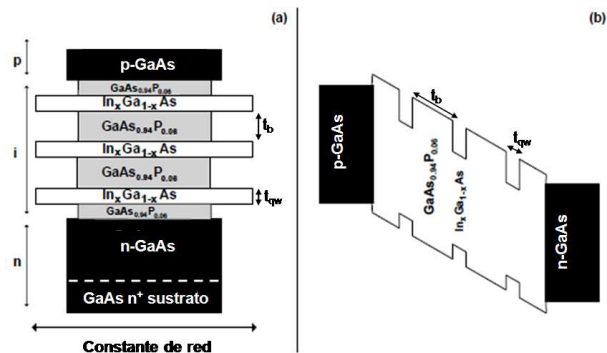


Fig. 1 Esquema de bandas de una SB-MQW

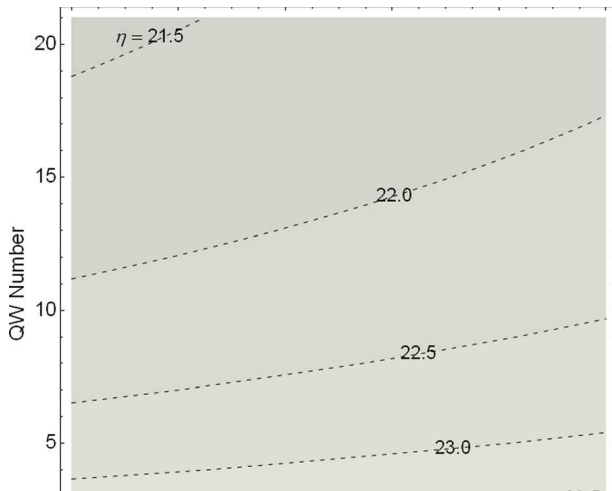


Fig. 2. Contour plot para la eficiencia como función de la reflectividad del CBR, el número de QW. Composición de P, $y = 0.09$, In, $x = 0.17$ y $L_w = 9.6$ nm.

los varios ordenes de diferencia a favor de la ganancia versus la recombinación radiativa.

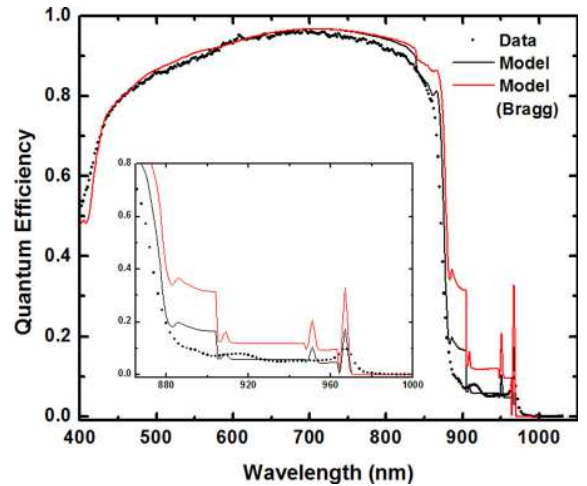


Fig. 3 Eficiencia cuántica experimental y modulada. El inserto muestra el rango de longitudes de onda dominado por la absorción de los QWs con o sin la influencia del DBR

b) Celda Solar GaAs/GaInNAs con superredes gaussianas (GSLSC).

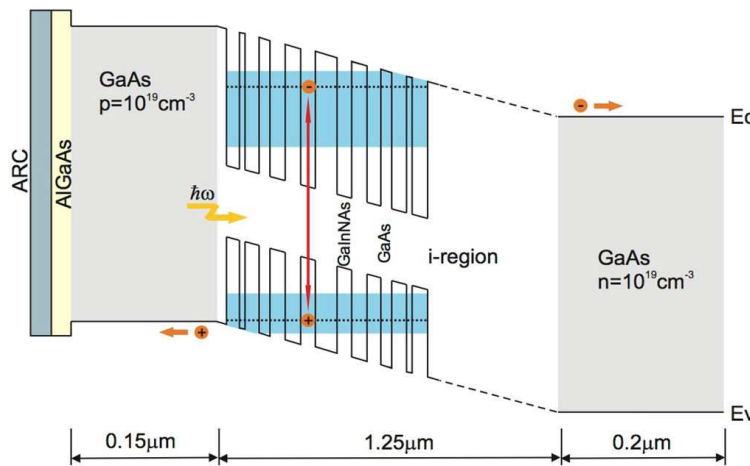


Figura 4. Esquema del diagrama de bandas de una GSLSC. SL gaussianas son incorporadas en la región intrínseca. Una capa de $Al_{0.8}Ga_{0.2}As$ es sumada para disminuir la velocidad de recombinación superficial y otra de MgF:SiN como capa anti-refractante.

En la figura 4 se muestra el esquema del diagrama de bandas de la GSLSC. La superred (SL) gaussiana se encuentra en la región intrínseca de una celda p-i-n de GaAs. Una capa ventana de $Al_{0.8}Ga_{0.2}As$ de 40 nm se incorpora en la región p para reducir la recombinación superficial y otra de MgF:SiN como capa anti-reflejante.

En medio de este trabajo decidimos desarrollar un nuevo método para calcular el coeficiente de absorción de superredes. Encontramos por primera vez una

expresión matemática que relaciona directamente las funciones densidad de estados (DOS) de la banda de conducción con la de valencia a una “joint density”,

JDOS, para transiciones directas la cual fue comprobado con el experimento en aleaciones de GaAs en sistemas de baja dimensionales como QW y SL. Utilizando propiedades del operador de convolución se obtuvieron tales expresiones. En semiconductores de baja dimensionalidad una diferente aproximación presentamos para evaluar la DOS, que relaciona la dirección de confinamiento con el plano 2D. Con esta aproximación, una expresión matemática fue encontrada la cual muestra que la DOS para e^- y h^+ puede ser calculada mediante el operador de convolución por dos funciones: la DOS en la dirección de confinamiento y la del plano. Una vez encontrada estas dos funciones el coeficiente de absorción se calculó de manera precisa para QW y SL, mostrando una buena concordancia entre la teoría y el experimento.

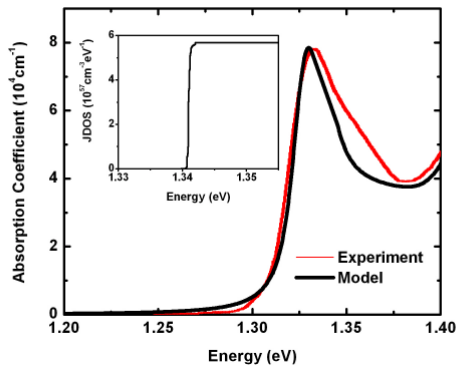


Fig. 5. Coeficiente de absorción experimental y modelado para una $\text{Ga}_{0.72}\text{Al}_{0.28}\text{As}/\text{GaAs}$ MQW a R.T. El inserto muestra la JDOS calculada. Obsérvese la buena coincidencia y que

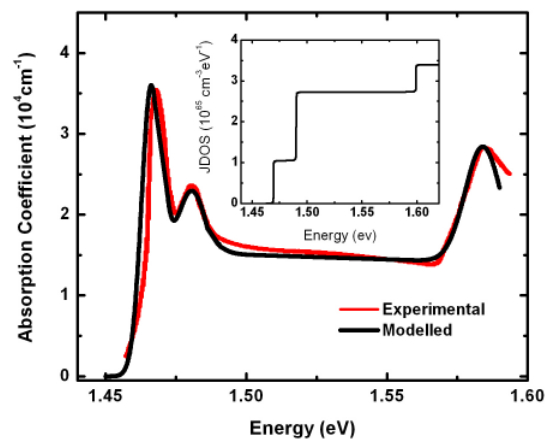


Fig. 6. Espectro PPT experimental y modelado para $\text{In}_{0.23}\text{GaAs}_{0.77}\text{As}/\text{GaAs}_{0.61}\text{P}_{0.39}$ SL a RT. El inserto muestra la JDOS.

Regresando a la GSLSC, establecimos un criterio para calcular los anchos de las mini-bandas en una SL en presencia de un campo eléctrico a través de estudios comparativos que incluían los parámetros: procesos de recombinación, la DOS en la dirección de confinamiento para la GSL y la

probabilidad de tunelaje. También se presentó un método para la optimización del ancho de la mini-banda que permite alcanzar un alto rendimiento en la GSLSC comparado con las celdas de GaAs de homounión. Las transiciones ópticas fueron evaluadas para calcular la eficiencia cuántica, la corriente oscura y la fotocorriente, y se compararon con el experimento. La GSLSC fue optimizada para alcanzar el máximo de rendimiento, evaluando las características I-V bajo iluminación² y así determinar la mayor eficiencia para las celdas solares que poseen “clusters” de GSL.

Encontramos nuevas expresiones matemáticas relacionan directamente la DOS de la banda de conducción con la de valencia a través del operador de convolución. Por primera vez, se estudiaron las transiciones ópticas directas en nanoestructuras semiconductoras considerando simultáneamente las tres dimensiones espaciales. Nuevo significado físico se alcanza con este proceder.

Presentamos un nuevo tipo de dispositivo fotovoltaico donde GSL son insertadas dentro de la región intrínseca de una celda solar p-i-n de GaAs/GaNAs. Nuestros resultados demuestran que podrían alcanzarse eficiencias nunca antes obtenidas para una celda de simple banda prohibida.

d) Nanoestructuras grafeno/h-BN

Presentamos un modelo teórico para evaluar la viabilidad de obtener transporte vertical a través de nanoestructuras de grafeno/h-BN con vistas a desarrollar dispositivos fotovoltaicos. Por primera vez, fue investigada teóricamente las propiedades de heteroestructuras formada por múltiples capas de grafeno impurificadas n y p, con diferentes alineaciones. Trabajos anteriores sólo fueron considerado una sólo capa de grafeno³. Encontramos expresiones para la dependencia con el voltaje de la corriente de tunelaje que circula entre los estados electrónicos (2D) en las capas de grafeno con área finita. A un voltaje de polarización, tal que los puntos de Dirac de las capas de grafeno son alineados, se observa un amplificado pico de corriente resonante. Calculamos la magnitud de este pico utilizando el modelo de secuencia de tunelaje. Para un rango de energía dado, se discutió la contribución a la densidad de corriente de tunelaje total de los estados electrónicos a través del elemento de matriz para las transiciones, encontrando que la fortaleza de las transiciones entre estados en las capas vecinas de grafeno es mayor para los estados encima del punto de Dirac. Nuestro dispositivo propuesto está compuesto de canales de tunelaje en las capas de n-BN entre capas de grafeno como se muestra en la figura 8.

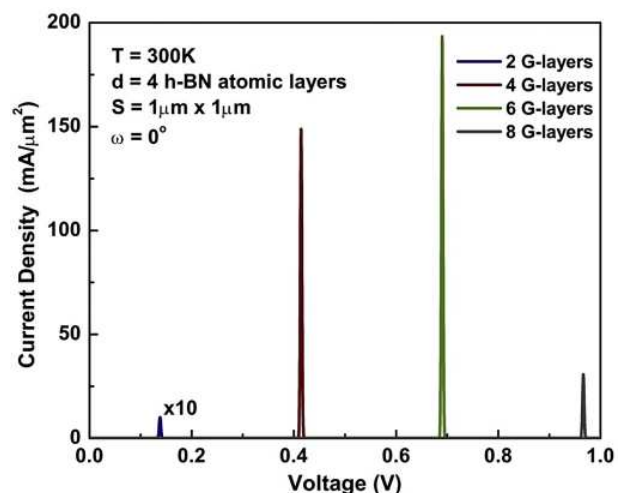


Fig. 9. Densidad de corriente de tonelaje en función del voltaje de polarización para varios número de capas de grafeno.

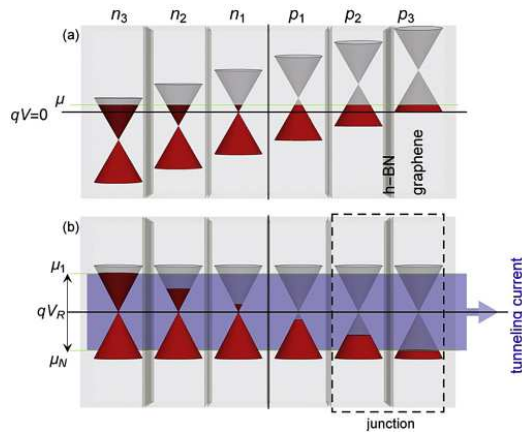


Fig. 8. Diagrama esquemático de la nanoestructura grafeno/h-BN

Diseñamos un dispositivo compuesto de múltiples capas de nanoestructuras de grafeno/h-BN que amplifica el transporte de tunelaje vertical. Modelamos las capas de grafeno asumiendo diferentes niveles de impurificación para que los puntos de Dirac se alineen al voltaje de operación y así alcanzar la corriente de resonancia. Encontramos una expresión matemática que describe

la densidad de corriente a través de la nanoestructura con diferentes alineaciones. Encontramos que la fortaleza de transición entre capas de grafeno vecinas es mayor para estados por encima del punto de Dirac, sugiriendo que tales dispositivos deben construirse sólo con capas de grafeno dopadas n.

REFERENCIAS

- ¹ J. G. J. Adams, B. C. Browne, I. M. Ballard, J. P. Connolly, N. L. A. Chan, A. Ioannides, W. Elder, P. N. Stavrinou, K. W. J. Barnham, and N. J. Ekins-Daukes, [Prog. Photovoltaics: Res. Appl.](#) 19, 865–877 (2011).
- ² M. Courel, J. C. Rimada, and L. Hernández, [J. Appl. Phys.](#) 112, 054511, (2012).
- ³ J. Gaskell, L. Eaves, K.S. Novoselov, A. Mishchenko, A.K. Geim, T.M. Fromhold, M.T. Greenaway, [Appl. Phys. Lett.](#) 107,103105, (2015).