

**ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA DE
TELECOMUNICACIONES.**



**Máster universitario en redes de telecomunicación para países en
desarrollo**

**Caracterización óptica-electromagnética de materiales
semiconductores con aplicación en energía solar
fotovoltaica como soporte en la alimentación de redes
rurales de telecomunicaciones.**

PROYECTO FIN DE MÁSTER

Memoria presentada por

Jaime Camilo Rodríguez Gallego.

**Tutores: Dr. Julio Ramiro Bargueño (URJC)
Dr. Juan Fco. Trigo Escalera (CIEMAT)**

Madrid, Julio 2012

No somos más que neuronas en un cerebro global, por eso limitar el libre tránsito del conocimiento es contrario a la naturaleza humana.

Anónimo.

Agradecimientos

Durante el transcurso de este máster, he tenido la posibilidad de contar con el apoyo de personas y organizaciones, a las cuales quiero agradecerles por su colaboración.

En primera instancia agradecer a Julio y Juan, ya que ustedes con su experiencia y colaboración, han sido una guía de inicio a fin para la realización de este interesante proyecto con el que concluyo el máster.

También debo hacer mención de Andrés Martínez, Javier Simó y demás docentes, por ser los encargados de llevar a cabo este máster que permite a profesionales de diferentes zonas del mundo, realizar aportes a las telecomunicaciones en países en vía de desarrollo.

Debo agradecer al Gobierno de España, por permitirme entrar y vivir en su territorio durante estos años de formación, también a la Universidad Rey Juan Carlos por colaborar en la realización de este postgrado.

También debo hacer mención especial al Centro de Investigaciones energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT) por la colaboración para la realización en conjunto de mi proyecto final de máster.

He tenido la oportunidad de realizar prácticas profesionales en las compañías: ROCHE FARMA ESPAÑA S.A. y LG ELECTRONICS ESPAÑA, las cuales agradezco por el conocimiento adquirido y el apoyo económico durante mi estadía en este país.

No puede faltar agradecer a mis compañeros de curso, como los compañeros de promociones anteriores por compartir momentos de formación académica y momentos de tiempo libre.

Un agradecimiento especial a mi Madre, a mi hermano Juan con quien he vivido en Madrid estos años, a mis hermanos Carlos y María, a las nanas Carmen y Antonia, a mi tía Ligia, a Matías por ser un buen remplazo durante mi ausencia en casa de mi madre.

Para terminar tengo un agradecimiento especial a Luz, por el apoyo recibido en todo momento y porque me ha enseñado que la distancia no es obstáculo para seguir llevando una relación.

Índice

I. Introducción.....	1
1 Presentación	1
1.1 Motivación.	1
1.2 Organización de la memoria.	2
1.3 Marco de referencia.....	3
1.3.1 La Energía y el desarrollo sostenible.....	3
1.3.2 Caracterización de materiales en la producción de energía fotovoltaica.....	4
1.3.3 Energías solar fotovoltaica en sistemas aislados.	4
1.3.4 Energía solar fotovoltaica y la Ingeniería de Telecomunicaciones.	5
2 Objetivo.....	6
3 Contexto.....	6
3.1 Energía solar fotovoltaica.....	6
3.1.1 Aspectos generales.....	6
3.1.2 Aplicaciones de la energía solar fotovoltaica.....	6
3.1.3 Célula solar.....	7
3.2 Células de materiales semiconductores para la producción de energía solar fotovoltaica.	8
3.2.1 Células de silicio monocristalino.....	8
3.2.2 Células de silicio policristalino.....	9
3.2.3 Células multiunión.....	10
3.2.4 Células de película delgada (Thin-film).	12
3.2.5 Células orgánicas.....	16
3.3 Caracterización óptica.....	19
3.3.1 Óptica de una intercara.....	19
3.3.2 Óptica de múltiples capas.	21
3.3.3 Problema inversión de las ecuaciones ópticas.....	24
3.3.4 Medidas espectrofotométricas.....	27
3.3.5 Métodos de estimación de parámetros ópticos de una lámina delgada.....	28
3.3.6 Síntesis inversa o ajuste de espectros mediante formulas de dispersión para n y k	30
3.3.7 Funciones de dispersión.....	32
3.3.8 Caracterización espectrofotométrica de sistemas multicapa.....	36

II. Metodología	38
4 Materiales y métodos.....	38
4.1 Obtención de la información.....	38
4.2 Mediciones de magnitudes ópticas.....	39
4.2.1 Espectrofotómetro Perkin-Elmer lambda 9 ³⁰	39
4.2.2 Espectrofotómetro AvaSpec-USB2 de Avantes.....	41
4.3 Herramienta de simulación OPTICA.....	42
4.3.1 Descripción general de OPTICA.....	42
4.3.2 Determinación de parámetros ópticos y básicos de una capa por medio del programa simulador OPTICA.....	45
4.3.3 Implementación de modelos paramétricos en OPTICA.....	46
4.3.4 Ajuste de parámetros ópticos de los modelos de OPTICA.....	47
4.4 Láminas de nuevos materiales semiconductores para aplicaciones en energía solar fotovoltaica.	50
4.4.1 Lámina de sulfuro de Indio.....	50
4.4.2 Lámina Cobre-Indio-Galio-Azufre.....	51
4.4.3 Célula comercial fotovoltaica CIS.....	51
III. Resultados.....	53
5 Análisis experimental – teórico de láminas para aplicaciones en fotovoltaica.....	53
5.1 Caracterización óptica de una lámina de vidrio como ejemplo de una capa de sustrato. ..	53
5.1.1 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de un sustrato de vidrio por medio de OPTICA usando el modelo de ajuste de parámetros punto a punto (PAP).....	53
5.1.2 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de un sustrato de vidrio por medio de OPTICA usando el modelo físico de ajuste de parámetros WEMPLE – DIDOMENICO (WD).	55
5.1.3 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de un sustrato de vidrio por medio de OPTICA usando el modelo físico de ajuste de parámetros FOROUHI–BLOOMER (FB).....	56
5.1.4 Análisis de resultados de constantes ópticas ajustadas para un sustrato de vidrio.....	58
5.2 Caracterización óptica de una lámina de sulfuro de indio (In ₂ S ₃) como ejemplo de capa ventana.....	59
5.2.1 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de sulfuro de indio (In ₂ S ₃) por medio de OPTICA, usando el modelo de ajuste de parámetros punto a punto (PAP).....	59

5.2.2	Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de sulfuro de indio (In_2S_3) por medio de OPTICA, usando el modelo físico de ajuste de parámetros WEMPLE – DIDOMENICO (WD).	60
5.2.3	Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de sulfuro de indio (In_2S_3) por medio de OPTICA, usando el modelo físico de ajuste de parámetros FOROUHI-BLOOMER (FB).....	63
5.2.4	Análisis de resultados de constantes ópticas ajustadas de una lámina de In_2S_3	73
5.3	Caracterización óptica de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) como ejemplo de capa absorbente.....	73
5.3.1	Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) por medio de OPTICA, usando el modelo de ajuste de parámetros punto a punto (PAP).	74
5.3.2	Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) por medio de OPTICA, usando el modelo de ajuste de parámetros WEMPLE – DI DOMENICO (WD).	75
5.3.3	Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) por medio de OPTICA, usando el modelo físico de ajuste de parámetros FOROUHI - BLOOMER (FB).....	77
5.3.4	Análisis de resultados de constantes ópticas ajustadas de una lámina de CIGS.	85
5.4	Simulación de célula comercial fotovoltaica (CIS).....	86
5.4.1	Análisis de espectros de magnitudes ópticas y parámetros básicos de las capas de una célula comercial fotovoltaica CIS por medio de OPTICA.	87
IV.	Conclusiones y trabajos futuros.	92
6	Conclusiones.	92
7	Trabajos futuros.	93
8	Bibliografía.	94

Índice de figuras

Figura 3.1 - Estructura típica de una célula solar. Figura extraída del documento: Componentes de una instalación solar fotovoltaica.....	8
Figura 3.2 - Esquema de una célula Silicio monocristalino. Figura extraída del documento: Energías Solar Fotovoltaica, Grupo de nuevas actividades profesionales UPM.	9
Figura 3.3 - Imagen de una célula Silicio policristalino.....	10
Figura 3.4 - Estructura de una célula tándem, el semiconductor 1 aprovecha una parte del espectro y el semiconductor 2 aprovecha otra parte del espectro. Imagen extraída de la memoria del proyecto fin de carrera titulado: Instalación fotovoltaica conectada a red sobre estructura en Crevillente.....	11
Figura 3.5 - Estructura de una célula de película delgada de silicio amorfo (a-Si). Imagen extraída de la memoria de la tesis doctoral titulada: Prototipo experimental para la medida y caracterización de las curvas I-V y P-V de módulos y Arrays FVs : diseño,modelado, implementación y pruebas	13
Figura 3.6 - Estructura e imagen de una célula CdTe/CdS. Imagen extraída de la memoria de la tesis doctoral titulada: Prototipo experimental para la medida y caracterización de las curvas I-V y P-V de módulos y Arrays FVs : diseño,modelado, implementación y pruebas.	14
Figura 3.7 - Estructura de una célula CIGS. Espesor de cada capa del orden de las micras. Imagen extraída de la memoria de la tesis doctoral titulada: Prototipo experimental para la medida y caracterización de las curvas I-V y P-V de módulos y Arrays FVs : diseño, modelado, implementación y pruebas.	15
Figura 3.8 - Imagen sección transversal célula CIS (Izquierda). Estructura de una célula CIGS (Derecha). Espesor de cada capa del orden de las micras. Imagen extraída de Hahn-Meitner-Institut Berlín.	15
Figura 3.9 - Estructura célula fotovoltaica orgánica. Imagen extraída de la memoria de la tesis doctoral titulada: Prototipo experimental para la medida y caracterización de las curvas I-V y P-V de módulos y Arrays FVs : diseño,modelado, implementación y pruebas.	16
Figura 3.10 – Paneles solares de TiO_2 sensibilizado (color rojo) con bandas conductoras negras). Imagen extraída: Sustainable Technologies Internacional.	17
Figura 3.11 - a) Integración de módulos de DSC transparentes en edificios. Imagen extraída schott Ibérica. b) Cargador comercial. Imagen extraída G24 Innovations. c) Modulo de DSC de gran área. Imagen extraída Solaronix.....	18
Figura 3.12 - Diagrama de reflexión y transmisión de una onda que incide con un ángulo θ_0 a la intercara plana entre dos medios semi-infinitos 0 y 1.....	19
Figura 3.13 - Diagrama esquemático de una película de múltiples capas.	21
Figura 3.14 - Espectro de reflectancia y transmitancia de una película de Arseniuro de Galio (AsGa) sobre un sustrato de vidrio, en las que se distinguen las tres zonas con diferente comportamiento óptico.....	28
Figura 4.1 - Imagen del espectrofotómetro Perkin Elmer Lambda 9, utilizado en las mediciones de las magnitudes ópticas para el proyecto.	39
Figura 4.2 - Esquema óptico de un espectrofotómetro dispersivo de doble haz del tipo empleado en el proyecto. Figura extraída de la tesis doctoral: Diseño, Fabricación y caracterización del filtro paso-banda estrechos para infrarrojo.....	40
Figura 4.3 - a) Esquema para medida de reflectancia absoluta en configuración V-W. Figura extraída de la tesis doctoral: Diseño, Fabricación y caracterización del filtro paso-banda estrechos para infrarrojo. b) Esquemas para medidas de reflectancia total por medio de una esfera integradora. Figura extraída de www.google.es	40
Figura 4.4 - Imagen del espectrofotómetro AvaSpec-USB2, utilizado en las mediciones de las magnitudes ópticas de referencia para el proyecto.....	41
Figura 4.5 - Interfaz de la herramienta OPTICA en la unidad de diseño.	43
Figura 4.6 - Interfaz de la herramienta OPTICA en la unidad principal de cálculo.	43
Figura 4.7 - Interfaz de la herramienta OPTICA en la unidad de ajustes por modelos.....	44

Figura 4.8 - Interfaz de la herramienta OPTICA en la unidad de cálculo de Gap.	44
Figura 4.9 - Diagrama de flujo de las funciones utilizadas por el simulador OPTICA para la determinación de parámetros ópticos de una lámina o un sistema multicapa.	47
Figura 4.10 - Imagen de una lámina de In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio, Lámina elaborada por el laboratorio de fotovoltaica del CIEMAT, utilizada en el proceso de caracterización de este proyecto.	50
Figura 4.11 - Imagen de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) sobre un sustrato de vidrio, Lámina elaborada por el laboratorio de fotovoltaica del CIEMAT, utilizada en el proceso de caracterización de este proyecto.	51
Figura 4.12 - Imagen de una célula comercial fotovoltaica (CIS), utilizada en el proceso de caracterización de este proyecto.....	52
Figura 4.13 - Imagen de la estructura una célula comercial fotovoltaica (CIS), figura extraída de www.google.es	52
Figura 5.1 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales. Para este caso la reflectancia trasera inicial ($R_{\text{tras ini}}$) se calcula pero no se usa, debido a que en un sustrato teóricamente la reflectancia trasera es igual a la reflectancia normal.	53
Figura 5.2 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	54
Figura 5.3 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales. Para este caso la reflectancia trasera inicial ($R_{\text{tras ini}}$) se calcula pero no se usa, debido a que en un sustrato teóricamente la reflectancia trasera es igual a la reflectancia normal.	55
Figura 5.4 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	56
Figura 5.5 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales. Para este caso la reflectancia trasera inicial ($R_{\text{tras ini}}$) se calcula pero no se usa, debido a que en un sustrato teóricamente la reflectancia trasera es igual a la reflectancia normal.	57
Figura 5.6 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	58
Figura 5.7 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo PAP;(b) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo WD; (c) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo FB. Donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales.	58

Figura 5.8 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.....	59
Figura 5.9 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	60
Figura 5.10 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.....	61
Figura 5.11 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	62
Figura 5.12 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Wemple–DiDomenico.....	62
Figura 5.13 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.....	63
Figura 5.14 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	64
Figura 5.15 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con una transición.....	64
Figura 5.16 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.....	65
Figura 5.17 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	66
Figura 5.18 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con dos transiciones.	66
Figura 5.19 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.....	67

Figura 5.20 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	68
Figura 5.21 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con tres transiciones.	68
Figura 5.22 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.....	69
Figura 5.23 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	70
Figura 5.24 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con cuatro transiciones.....	70
Figura 5.25 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.....	71
Figura 5.26 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	72
Figura 5.27 – Grafico de TAUC que determina el gap ópticos de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con cinco transiciones.....	72
Figura 5.28 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una lámina de sulfuro de indio (In_2S_3) en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo PAP;(b) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo WD; (c) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo FB. Donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales.	73
Figura 5.29 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.	74
Figura 5.30 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con n_fA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	75
Figura 5.31 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.	76

Figura 5.32 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	77
Figura 5.33 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.	78
Figura 5.34 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	79
Figura 5.35 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con dos transiciones.	79
Figura 5.36 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.	80
Figura 5.37 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	81
Figura 5.38 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con tres transiciones.	81
Figura 5.39 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.	82
Figura 5.40 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	83
Figura 5.41 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con cuatro transiciones.	83
Figura 5.42 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.	84
Figura 5.43 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.	85

Figura 5.44 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con cinco transiciones.....	85
Figura 5.45 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo PAP;(b) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo WD; (c) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo FB. Donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales.	86
Figura 5.46 – Espectros iniciales de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia) de una célula fotovoltaica CIS en el rango entre 300nm y 2000nm, donde está con respecto a una longitud de onda, donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y el otro es el espectro experimental....	88
Figura 5.47 – Espectros en primera aproximación de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia) de una célula fotovoltaica CIS en el rango entre 300nm y 2000nm, donde (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y el otro es el experimental; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los otros son los espectros experimental e iniciales.....	89
Figura 5.48 – Espectros en segunda aproximación de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia) de una célula fotovoltaica CIS en el rango entre 300nm y 2000nm, donde (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y el otro es el experimental; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.	90
Figura 5.49 – Espectros de reflectancia de una célula fotovoltaica comercial (CIS) en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) simulación de reflectancia con valores iniciales;(b) simulación de reflectancia con valores de primera aproximación; (c) simulación de reflectancia con valores de segunda aproximación. Donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y el otro es el espectro experimental. ...	91

Índice de tablas

Tabla 3.1 - Ventajas y desventajas de la energía solar fotovoltaica.....	6
Tabla 4.1 - Principales características del espectrofotómetro Perkin Elmer Lambda 9.	39
Tabla 5.1 - Valores de los coeficientes del modelo de Wemple–DiDomenico para un sustrato de vidrio	56
Tabla 5.2 - Valores de los parámetros $n(\text{infinito})$, E_g y grupo de tres parámetros I , E_0 , γ para el modelo de Forouhi-Bloomer para un sustrato de vidrio	57
Tabla 5.3 - Valores de los parámetros básicos ajustados por el modelo punto a punto, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.	60
Tabla 5.4 - Valores de los parámetros básicos y coeficientes ajustados por el modelo Wemple – DiDomenico, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.....	61
Tabla 5.5 - Valores de los parámetros básicos, parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.....	64
Tabla 5.6 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.....	65
Tabla 5.7 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.....	67
Tabla 5.8 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.....	69
Tabla 5.9 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.....	71
Tabla 5.10 - Valores de los parámetros básicos ajustados por el modelo punto a punto, para una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio.	75
Tabla 5.11 - Valores de los parámetros básicos y coeficientes ajustados por el modelo Wemple– DiDomenico, para una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio.....	76
Tabla 5.12 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio.	78
Tabla 5.13 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina semiconductor <i>tipo p</i> (CIGS) sobre un sustrato de vidrio.....	80
Tabla 5.14 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi – Bloomer, para una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio.	82
Tabla 5.15 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina semiconductor <i>tipo p</i> (CIGS) sobre un sustrato de vidrio.....	84
Tabla 5.16 - Valores iniciales de los parámetros básicos para una célula fotovoltaica CIS.....	87
Tabla 5.17 - Valores de primera aproximación de los parámetros básicos para una célula fotovoltaica CIS.	88
Tabla 5.18 - Valores de segunda aproximación de los parámetros básicos para una célula fotovoltaica CIS.	90

AsGa	Arseniuro de Galio
Avantes	Espectrofotómetro
Band-gap	Banda prohibida.
CdS	Sulfuro de Cadmio
CdTe	Telurio de cadmio
CIEMAT	Centro de Investigaciones energéticas, Medioambientales y Tecnológicas.
CIGS	Cobre-Indio-Galio-Azufre.
CIGSe	Cobre-Indio-Galio-Selenio.
CIS	Cobre-Indio-Selenio.
DSC	Dye solar cell (Células sensibilizadas con colorantes).
FB	Modelo Forouhi-Bloomer.
GaInP	Galio-Indio-Fosforo.
ISF	Ingeniería sin fronteras.
ITO	Oxido de estaño de indio.
NAP	Grupo de nuevas actividades profesionales.
NREL	National Renewable Energy Laboratory.
ODM	Objetivos de desarrollo del milenio.
OPTICA	Simulador de características ópticas de materiales.
PAP	Modelo punto a punto.
Perkin-Elmer	Espectrofotómetro.
p-i-n	Semiconductor tipo p, intrínseco y n.
pn	Unión pn para semiconductores.
PNUD	Programa de naciones unidas para el desarrollo.

TCO

Oxido transparente conductivo.

WD

Modelo Wemple- DiDomenico.

I. Introducción

1 Presentación

1.1 Motivación.

Las energías renovables año tras año están tomando un papel muy importante en el desarrollo humano, debido a que es un tipo de energía sostenible la cual se produce y se usa de forma que apoyen a largo plazo en el desarrollo social, económico y ambiental de una sociedad. El acceso a la energía es primordial tanto para los que carecen de recursos energéticos, como para los que tienen acceso y desean un mejor aprovechamiento de este recurso.

Los servicios energéticos son de suma importancia para la salud, la educación, la seguridad alimentaria e hídrica, el cambio climático, la producción y los servicios de comunicación; por lo anterior la Organización de Naciones Unidas (ONU) ha intensificado esfuerzos para el reconocimiento de la importancia de la energía para un desarrollo sostenible¹.

La energía solar fotovoltaica, continúa en constante estudio, investigación y desarrollo, para seguir colaborando y aportando tecnología cada vez más eficiente, útil para diversas aplicaciones y benigna con el medio ambiente.

La utilización de las energías renovables, en particular de la energía solar fotovoltaica como soporte de la alimentación eléctrica en redes de telecomunicaciones en zonas aisladas o rurales, nos motiva a investigar sobre esta tecnología, Se ha presentando en principio como una fuerte alternativa, que no ha dejado de estudiar la viabilidad de utilizar nuevos materiales que conformen las células fotovoltaicas.

Se hace muy interesante colaborar en el desarrollo de una nueva herramienta que permita caracterizar ópticamente nuevos materiales semiconductores de películas delgadas, como también diseñar y simular células modernas o comerciales en este tipo de aplicaciones; En este aspecto, el presente estudio se podría presentar como un importante aporte a la tecnología fotovoltaica en aplicaciones de telecomunicaciones.

Para poder realizar nuestro trabajo hemos contado con la colaboración del Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT²), lo que ha supuesto una gran oportunidad para el desarrollo de nuestro proyecto, ya que contamos con el apoyo de investigadores especialistas del laboratorio de fotovoltaica de energías renovables, como también con materiales de células fotovoltaicas de última tecnología y equipos robustos de mediciones de magnitudes ópticas.

1.2 Organización de la memoria.

Esta memoria se estructura de la siguiente forma:

- **Capítulo 1- Presentación:** hacemos referencia a la motivación que nos llevó para la consecución de este proyecto. Así mismo se presenta un resumen sobre la estructura de la memoria final, para terminar con un marco de referencia en el que nos sitúa en la temática global del proyecto; resaltando la importancia del desarrollo de las energías renovables, los materiales utilizados para la energía solar fotovoltaica y como esta clase de energía es aplicable en sistemas de telecomunicaciones.
- **Capítulo 2 – Objetivo:** Presenta el objetivo general del proyecto final máster.
- **Capítulo 3 – Contexto:** En este capítulo se presenta el estado de arte del proyecto, este capítulo se divide en tres subgrupos, el primero consiste en una breve explicación sobre la energía solar fotovoltaica. El segundo hace referencia a los tipos de células fotovoltaicas que existentes en la actualidad. El último, hace referencia a la física teórica de la óptica en una y varias capas, seguido del cálculo de las magnitudes ópticas de las capas y la problemática de la inversión de las ecuaciones ópticas. La importancia de las medidas espectrofotométricas y estimación de parámetros, para finalizar esta parte se explica en qué consiste las funciones de dispersión y la caracterización de sistemas de múltiples capas.
- **Capítulo 4 – Materiales y métodos:** se presenta las fuentes de información teórica y práctica, y posteriormente se hace un resumen sobre los espectrofotómetros utilizados en las mediciones, junto con la realización de una minuciosa descripción de la herramienta de simulación OPTICA (Interfaz gráfica, procedimiento de caracterización), por último en base a la literatura se comenta sobre las láminas medidas (In_2S_3 – CIGS) como la célula comercial (CIS).
- **Capítulo 5 – Resultados:** se presentan todos los resultados experimentales del proyecto, comenzando con los resultados de ajuste de las constantes y parámetros ópticos de: un sustrato de vidrio, una lámina de sulfuro de indio la cual puede trabajar como capa ventana, una lámina de CIGS la cual puede trabajar como capa absorbente. Por último las simulaciones de una célula comercial CIS.
- **Capítulo 6 – Conclusiones:** presentamos y discutimos lo que se ha aprendido como consecuencia del contraste entre los resultados experimentales y el objetivo inicial propuesto para este proyecto.
- **Capítulo 7 – Trabajos futuros:** Enunciamos las posibles ramas y áreas que pueden continuar estudiando e investigando el tema del proyecto.

1.3 Marco de referencia.

1.3.1 La Energía y el desarrollo sostenible.

En los países en desarrollo, hay más de 3000 millones de personas que dependen de la biomasa tradicional para cocinar y como fuente de calefacción, 1500 millones de personas que carecen de electricidad, así como millones de pobres que no pueden pagar estos servicios energéticos, aún estando disponibles³.

Existe una relación entre la energía y el desarrollo sostenible, que da suma importancia a desarrollar energía moderna, menos contaminante y eficiente para erradicar la pobreza. El acceso a servicios energéticos modernos y asequibles en los países en desarrollo es esencial para lograr los objetivos de desarrollo del milenio (ODM⁴), lo cual ayudaría a reducir la pobreza y a mejorar las condiciones y el nivel de vida de la mayoría de la población mundial.

Es determinante la inversión en el acceso a opciones de tecnologías energéticas menos contaminantes, con capacidad de adaptarse al cambio climático. Así mismo se hace necesario el acceso a recursos y servicios energéticos para el desarrollo sostenible que sean fiables, de costo razonable, económicamente viables, socialmente aceptables y ecológicamente racionales.

Es necesario adoptar medidas para estimular la aportación de recursos financieros suficientes, de buena calidad, así como la transferencia de tecnología avanzada a los países en desarrollo y los países de economía en transición para facilitar un uso más amplio y eficientes de las fuentes de energía, en particular fuentes de energías nuevas y renovables.

Es fundamental que las políticas y estrategias de los países, combinen un mayor uso de fuentes de energías nuevas y renovables y de tecnología de baja emisión de gases de efecto invernadero, incluidas tecnologías menos contaminantes para el aprovechamiento de los combustibles fósiles, y el uso sostenible de servicios energéticos tradicionales. El aumento de la capacidad para atender a la creciente demanda de energía, cuando corresponda, con el apoyo de cooperación internacional y promoción de desarrollo y difusión de tecnologías energéticas adecuadas, asequibles y sostenibles, se hace cada vez más necesario.

El acceso a la energía sostenible, está ligada a un futuro sostenible para el mundo en desarrollo. El acceso a la energía no solo transforma la vida de los que carecen de recursos energéticos y mejora el nivel de vida, también:

- Posibilita la generación de ingresos (Brindar energía a un pequeño negocio)
- Brinda energía a centros de salud comunitario (frigoríficos para almacenar medicamentos, teléfonos móviles)
- Brinda alternativas menos contaminantes y más eficientes. (Para cocinar y generar calor).
- Dar soporte de alimentación a sistemas de telecomunicaciones en zonas rurales de difícil acceso.
- Proporciona iluminación para que los niños puedan estudiar en la noche
- Permite el funcionamiento de los negocios y crea nuevas oportunidades empresariales.

1.3.2 Caracterización de materiales en la producción de energía fotovoltaica.

Los materiales investigados y utilizados en la producción de energía fotovoltaica tienen en común su gran capacidad de absorber el espectro solar visible, generando y separando cargas eléctricas.

Los materiales más utilizados son inorgánicos de tipo semiconductor. Estos materiales son ampliamente conocidos debido a sus aplicaciones en microelectrónica y actualmente por su importancia para generar y detectar luz. Sin embargo el punto de vista de producción energética que nos ocupa añade una restricción importante: El espectro solar de la tierra. Este determina el rango de frecuencias electromagnéticas de interés así como las condiciones para la optimización de la eficiencia en producción de electricidad solar.

La caracterización óptica en el espectro visible, tiene un largo recorrido histórico y gran madurez pero sigue adaptándose a los nuevos retos. En el caso que nos ocupa tiene un interés central. No sólo como una técnica de caracterización que nos da una información adicional del material (su comportamiento electromagnético o constantes ópticas con el que compone la estructura de bandas del material semiconductor), sino que nos puede proporcionar otros detalles de caracterización de varias capas, grosores, rugosidades, etc. De esta forma facilitará comprender el funcionamiento final de la célula fotovoltaica, siendo por tanto el primer paso para el cálculo de la eficiencia de un dispositivo real, convirtiéndose en pieza angular de los sistemas de simulación y optimización de células fotovoltaicas, así como la herramienta ideal para el control y monitorización de los sistemas de producción.

1.3.3 Energías solar fotovoltaica en sistemas aislados.

La energía solar fotovoltaica es uno de los recursos energéticos más apropiados para llevar electricidad al medio rural, a causa de las propiedades de modularidad y autonomía, por precisar bajo mantenimiento y ser no contaminante. Prueba de ello es que se está utilizando en multitud de países para mejorar las condiciones de vida, impulsada por muy diversos actores: gobierno, organizaciones no gubernamentales, entidades privadas. Los mecanismos financieros de implementación son también muy variados: donación, subsidio para la compra, empresas concesionarias de energía, venta al contado, etc.¹

Es complicado determinar el número de instalaciones domésticas distribuidas por los países en vía de desarrollo, debido al carácter descentralizado y modular de la electricidad solar y por la variedad de actores implicados, con todo esto se estima en más de un millón.⁵

Estas instalaciones proporcionan un nivel bajo de electrificación (50 Wp por módulo, 200Wh/día). Sin embargo las repercusiones socioeconómicas, sólo por el hecho de tener iluminación de mucha más calidad que la que proporcionan las lámparas de queroseno, de aceite o las velas, son muy importantes. La jornada de actividad se amplía de forma notable, lo que permite estudiar a los niños y continuar las actividades manuales en casa durante horas.

¹ En Kenia, mediante venta directa y sin ninguna subvención, se han alcanzado las 150.000 instalaciones fotovoltaicas.

También el acceso a la televisión (Lo habitual es que se alimente con pilas secas) tiene consecuencias destacadas (No todas deseables): permite mantenerse informado en un mundo no muy lejano, en todos los sentidos, pero con el que necesariamente hay que relacionarse.

Asimismo son muy frecuentes las instalaciones solares en centros de salud y escuelas. En el primer caso, los beneficios principales son la posibilidad de almacenar vacunas, utilizar instrumental eléctrico y mejorar los servicios de urgencia nocturnos.

Las aplicaciones aisladas de energía solar fotovoltaica, actualmente se dividen en tres grupos que son:

- Aplicaciones de consumo, en las que encontramos: dispositivos de carga, fuentes, calculadoras, relojes, luces de jardín, ventilación en coches, etc.
- Aplicaciones industriales, en las que encontramos: telecomunicaciones, telemática, señales de tráfico, refrigeración de vacunas, etc.
- Aplicaciones remotas, en las que encontramos: alumbrado, riego, suministro a poblados suministro de viviendas, escuelas, centros de salud, etc.

La electrificación rural se ha convertido en un mercado creciente en los últimos años, debido a la imposibilidad de extender redes eléctricas convencionales a casas, centros de salud y colegios remotos por consecuencia la correspondiente inaccesibilidad de energía eléctrica para millones de persona.

Con la energía solar fotovoltaica se están alimentando repetidores de telecomunicaciones que por su ubicación (alto de cerros, colinas, sitios de difícil acceso) encuentran en esta tecnología la mejor solución desde el punto de vista técnico y económico.

1.3.4 Energía solar fotovoltaica y la Ingeniería de Telecomunicaciones.

El profesional de la ingeniería de telecomunicaciones al poseer conocimientos sobre dispositivos semiconductores e identificar que la energía solar fotovoltaica es un área de la cual puede apoyarse para un diseño e implementación de una red telecomunicaciones determinada, esta cualificado para realizar todas las actuaciones investigativas, técnicas, de gestión y modelado relacionadas con el aprovechamiento de la energía solar fotovoltaica.

Son muchos los escenarios de en los que puede intervenir, destacando entre ellos:

- Caracterización, optimización o fabricación de dispositivos, materiales y sistemas fotovoltaicos.
- Diseño de plantas de generación de energía fotovoltaica.
- Redacción de normas técnicas y planificación de la tecnología fotovoltaica.
- Redacción de proyectos sobre energía solar fotovoltaica.

Desde hace algunos años, los sistemas de energía solar fotovoltaica se han presentado como sistemas de respaldo de energía para repetidores de telecomunicaciones en zonas rurales. Por esta razón el área de las telecomunicaciones sigue en su tarea de estudio e investigación del desarrollo de este tipo de energías.

En la actualidad, los paneles fotovoltaicos más usados para suministrar alimentación en sistemas independientes como en sistemas híbridosⁱⁱ 6a equipos de telecomunicaciones terrestres, son de la tecnología de silicio (Policristalino, amorfo), ya que son los que mejor calidad-precio ofrecen. Sin embargo la industria espacial de Estados Unidos, para alimentar los satélites de comunicaciones utiliza una tecnología más avanzada que es la de células de capa delgadaⁱⁱⁱ; esta tecnología intenta alcanzar la eficiencia del silicio, utilizando materiales de menor coste, más abundantes, menos pesados y más amigables con el medio ambiente.

ⁱⁱ Fotovoltaica-Diesel; Fotovoltaica-Eólica.

ⁱⁱⁱ Un ejemplo es la célula bajo estudio en este proyecto. Ver capítulo de resultados ítem 5.4.

2 Objetivo

Los sistemas de energía solar fotovoltaica que proveen energía eléctrica a equipos de telecomunicaciones en zonas rurales, han resultado ser una muy buena alternativa de soporte de alimentación, al presentarse como una solución económica, técnica y ecológicamente viable. Contando con este escenario tan favorable; es importante seguir estudiando e investigando sobre desarrollos que hagan que esta energía siga evolucionando en esta área.

En este sentido, un importante desarrollo en esta tecnología es la elaboración de películas delgadas de múltiples capas semiconductoras, ya que han presentado buenos resultados en la generación de energía eléctrica en varias aplicaciones a costes razonables y con eficiencias cercanas a las películas de silicio. Tomamos este tema como base para el desarrollo de nuestro proyecto, ya que podemos contribuir por medio de la implementación de una herramienta de simulación, que ayude al diseño y desarrollo de películas delgadas de múltiples capas con nuevos materiales semiconductores para aplicaciones en energía solar fotovoltaica.

El Objetivo de este proyecto fin de máster es la caracterización de nuevos materiales semiconductores con aplicaciones en energía solar fotovoltaica como soporte de alimentación de sistemas de telecomunicación en zonas rurales, por medio de una herramienta de simulación óptica que se encuentra en plena etapa de desarrollo.

Con la herramienta de simulación se realizará la caracterización de materiales semiconductores de múltiples capas, incorporando para ello los modelos físicos más adecuados para parametrizar las constantes ópticas, así como la descripción del comportamiento con diferentes grados de rugosidad o incoherencia óptica. Paralelamente comprobaremos la capacidad de la herramienta para trabajar con medidas ópticas (Reflectancia y transmitancia) reales de materiales semiconductores. Concluiremos comparando la magnitud óptica de la reflectancia simulada con la medida de la reflectancia real de una célula fotovoltaica.

3 Contexto.

3.1 Energía solar fotovoltaica.

3.1.1 Aspectos generales.

La energía solar fotovoltaica es una tecnología que genera corriente continua, por medio de semiconductores, cuando estos son iluminados por un haz de fotones. Mientras los fotones inciden sobre una célula solar (elemento fotovoltaico individual), se genera potencia eléctrica^{iv}. Cuando la luz desaparece, la energía también lo hace. Algunas células solares vienen manteniéndose en operación terrestre o en el espacio desde hace aproximadamente 30 años.

La energía solar fotovoltaica presenta ventajas e inconvenientes, en la tabla 3.1 podemos identificar algunas de ellas. Es de resaltar que algunos inconvenientes pueden compensarse parcialmente gracias al crecimiento de la aceptación pública y por los indudables beneficios al medio ambiente en a zonas de difícil de acceso⁷.

Tabla 3.1- Ventajas y desventajas de la energía solar fotovoltaica.

Ventajas	Desventajas
Energía: Limpia, renovable, infinita, silenciosa	Difícil almacenamiento
Retribuida económicamente la producción para venta a la red	Proceso de fabricación de módulos complejo, toxico y un poco caro
Su coste no tiende a crecer	No competitiva con otras energías en la actualidad
Plantas pequeñas (modulares)	Producción variable según climatología y época del año
Portátiles	Poco conocimiento sobre esta tecnología

3.1.2 Aplicaciones de la energía solar fotovoltaica.

3.1.2.1 Aplicaciones autónomas⁸.

Producen electricidad sin ningún tipo de conexión con la red eléctrica, a fin de suministrar este tipo de energía al lugar donde se encuentren ubicadas, de esta clase de aplicaciones pueden distinguirse dos grupos que son:

- *Aplicaciones espaciales:* sirve para proporcionar energía eléctrica a elementos que se encuentran en el espacio, tales como satélites de comunicaciones, estación espacial internacional. La investigación en esta área propició el desarrollo de los equipos fotovoltaicos tal y como los conocemos en la actualidad.

^{iv} Potencia medida en vatios o Kilovatios.

- **Aplicaciones terrestres:**
 - *Telecomunicaciones:* Estaciones repetidoras (Televisión, telefonía móvil, enlaces de radio, redes VSAT satelitales) urbanas y rurales.
 - *Electrificación de zonas rurales y aisladas:* estas instalaciones, se realizan en cualquier lugar, están pensadas para países y regiones en desarrollo y todas aquellas zonas en que no existe acceso a la red eléctrica comercial: viviendas aisladas, de ocupación permanente o periódica, refugios de montañas. También se utilizan para abastecer de energía a una población determinada.
 - *Señalización:* se aplica a señales de tránsito luminoso formadas por diodos LED.
 - *Alumbrado público:* Se utiliza en zonas en las que resulta complicado llevar una línea eléctrica convencional.
 - *Bombeo de agua:* Estas instalaciones están pensadas para lugares tales como granjas, ranchos. Su uso puede ser tanto para agua potable como para riego.
 - *Telemetría:* permite realizar medidas sobre variables físicas y transmitir la información a una central.

3.1.2.2 **Aplicaciones conectadas a la red⁸.**

En ella, el productor no utiliza la energía de forma directa, sino que es vendida al organismo encargado de la gestión de la energía en el país. Su ventaja radica en que la producción de electricidad se realiza precisamente en el periodo de tiempo en el que la curva de demanda de electricidad aumenta, es decir durante el día. De esta clase de aplicaciones cabe distinguir:

- *Centrales fotovoltaicas y huertos solares:* recintos en los que se concentra un número determinado de instalaciones fotovoltaicas de diferentes propietarios con el fin de vender la electricidad producida a la compañía eléctrica.
- *Edificios fotovoltaicos:* es una de las últimas aplicaciones desarrolladas para el uso de la energía fotovoltaica. La rápida evolución en los productos de este tipo ha permitido el uso de los módulos como material constructivo en cerramientos, cubiertas y fachadas de gran valor visual. Además, la energía fotovoltaica es el sistema de energía renovable más adecuado para la generación de electricidad en zonas urbanas sin provocar efectos ambientales adversos. La integración arquitectónica consiste en combinar la doble función, como elemento constructivo y como productor de electricidad. La mayoría de estos sistemas han sido integrados en tejados, muros fachadas; por ejemplo el vidrio es reemplazado por módulos de láminas delgadas semitransparentes

3.1.3 **Célula solar.**

Las células solares están conformadas de materiales semiconductores, que poseen electrones débilmente ligados ocupando una banda de energía denominada banda de valencia. Cuando aplicamos energía (el semiconductor absorbe un fotón) encima de un cierto valor a un electrón de valencia, el enlace se rompe y el electrón atraviesa una barrera pasando a una nueva banda de energía llamada banda de conducción. Mediante un contacto conductor, estos electrones pueden ser llevados a un circuito externo y colaborar para realizar un trabajo útil.

El flujo de electrones en el circuito exterior se llama corriente de la célula y su producto por el voltaje con el que se liberan los electrones por los contactos de salida determina la potencia generada. Todo esto ocurre a temperatura ambiente; pues las células solares que convierten en electricidad solo una parte de la energía de los fotones absorbidos se calienta entre 25 a 30°C por encima de la temperatura ambiente.

La estructura típica de una célula solar (ver figura 3.1) es una unión $p-n$ similar a los diodos semiconductores, pero no necesariamente la única posible. En aplicaciones fotovoltaicas, las células solares se interconectan y se encapsulan en elementos llamados módulos fotovoltaicos. Estos módulos producen corriente continua que suele transformarse en corriente alterna, más útil, mediante dispositivos electrónicos llamados inversores.

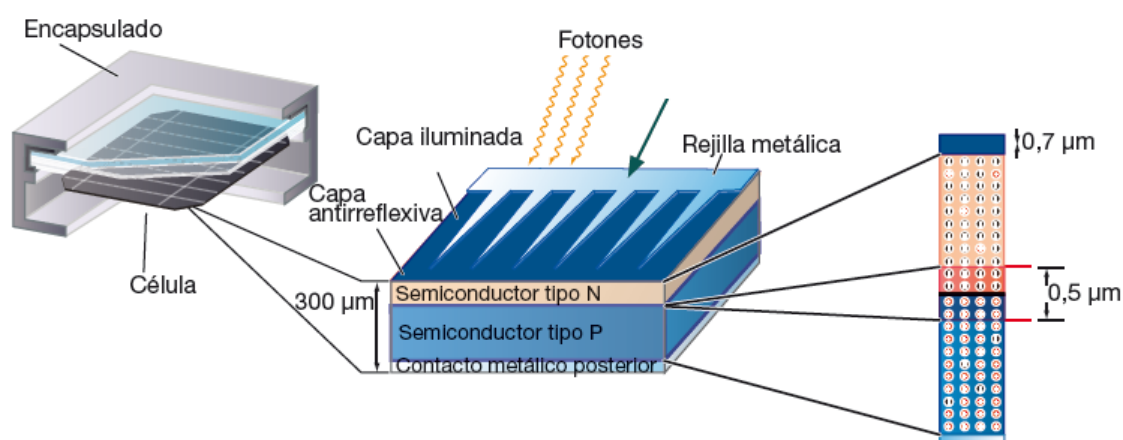


Figura 3.1 - Estructura típica de una célula solar. Figura extraída del documento: Componentes de una instalación solar fotovoltaica.

3.2 Células de materiales semiconductores para la producción de energía solar fotovoltaica.

Existen en la actualidad diversidad de materiales para la fabricación de células en la producción de energía solar fotovoltaica. Las células fotovoltaicas de mayor impacto en la actualidad son: células de *Silicio monocristalino*; células de *silicio policristalino*; células *multiunión*; células de película delgada (thin film), células orgánicas.

3.2.1 Células de silicio monocristalino.

Debido principalmente a su abundancia en la tierra, estas células son la más desarrolladas y usadas comercialmente. Se elaboran a partir de obleas (wafers o discos) cortadas de lingotes monocristalino, los métodos empleados de fabricación más generalizados son el de Czochralski ($Si-Cz$) zona flotante⁹ ($Si-Cz$). El método Czochralski es el más usado comercialmente y el más económico, este consiste en fundir el Si en un crisol con trazas del dopante (Boro para obtener el material tipo p y fósforo para un tipo n). Usando una semilla cristalina con la orientación

requerida y bajo condiciones controladas de temperatura y en ambiente de Argón, se extrae de la fundición lingotes cristalinos de entre 10 y 15 cm de diámetro y de decenas de centímetros de longitud. Los cristales tipo Zona flotante son mucho más costosos y de mayor pureza. Estos se obtienen por una refundición en forma localizada de 2 a 3 cm del lingote. De esta forma las impurezas del cristal son expulsada hacia la superficie del mismo, de tal manera que eliminando está se obtiene un lingote de mayor calidad que el original.

La estructura de una célula de *Si monocristalino*, consta de una capa conductora en la parte superior, una película antirreflectora, una película delgada de *Si* tipo *n* de 0,3 mm (llamada colector), la unión, un substrato de *Si* tipo *p* de 250 μ m y contacto inferior. El *Si monocristalino* se utiliza también para fabricar células de alta eficiencia, aunque su peso relativo debido al espesor requerido presenta un inconveniente. Estas células son de color azul homogéneo y posee conexión de células individuales entre sí. La eficiencia en celdas a nivel de laboratorio de *Si-FZ* es de un 25% y en *Si-CZ* del 22%. Para celdas iluminadas con radiación concentrada se obtuvieron eficiencias de hasta el 29%¹⁰; y entre un 15 -18 % de rendimiento en los paneles comerciales, cuentan con un elevado número de fabricantes. El costo del panel es mayor que el de silicio policristalino.

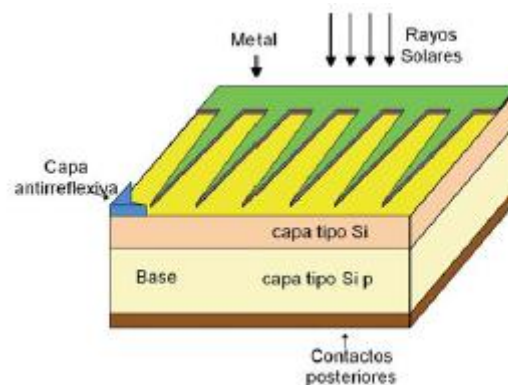


Figura 3.2 - Esquema de una célula Silicio monocristalino. Figura extraída del documento: Energías Solar Fotovoltaica, Grupo de nuevas actividades profesionales UPM.

3.2.2 Células de silicio policristalino.

La fabricación de silicio policristalino es, en general, más sencilla que las requeridas para producir silicio monocristalino. Mientras que la pureza del material de partida es similar; en este caso el proceso de cristalización del silicio es diferente. La barra de silicio se ha estructurado desordenadamente en forma de pequeños cristales de silicio, reconocibles por presentar en su superficie un aspecto granulado, contiene distintos tonos azules y un aspecto no uniforme. Poseen un rendimiento óptimo aunque un poco inferior que las células de silicio monocristalino; en pruebas de laboratorio alcanzan un rendimiento entre 19 – 20% y en módulos comerciales un rendimiento entre el 12 – 14%.

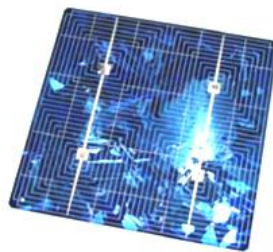


Figura 3.3 - Imagen de una célula Silicio policristalino.

Presentamos a continuación, algunas ventajas de las celdas de Si (monocristalino y policristalino):

- El Si es uno de los elementos más abundantes en la tierra.
- Su vida útil de funcionamiento es superior a 30 años.
- Son las celdas más desarrolladas y estudiada debido a los avances tecnológicos de la industria electrónica.
- La industria está bien establecida y son celdas utilizadas comercialmente
- El ensamblado del sistema, los costos de mantenimiento en inversión son bastante bajos.
- En comparación con otros materiales fotovoltaicos (celdas de α -Si(H), CdTe, CIS), el silicio posee una eficiencia relativamente alta.

Siendo algunas de sus desventajas:

- El sustrato de Si es todavía relativamente costoso, debido a las pérdidas por corte; su ancho de banda es de 1,12 eV no es el ideal, puesto que teóricamente la mayor eficiencia se lograría con materiales de anchos de banda entre 1,4 y 1,5 eV.
- Su capacidad de absorción es relativamente baja, con lo cual se requieren espesores de 25 μm o más para absorber toda la luz, mientras que otros materiales requieren espesores de 1 a 2 μm .
- Los módulos no pueden obtenerse por integración monolítica, ya que las celdas están limitadas por las medidas y deben soldarse e interconectarse en serie.

3.2.3 Células multiunión.

El principal objetivo de las células solares formadas por varias uniones de semiconductor es conseguir un dispositivo con mayor capacidad de absorción del espectro solar, y en consecuencia con mayor eficiencia. Esto se consigue mediante la adición de células con diferentes band-gap (banda prohibida)^v, dando una mayor complejidad y sensibilidad espectral al material. Esto reduce algunas de las pérdidas debido a las limitaciones de la banda prohibida. Cada tipo de semiconductor se caracteriza por una banda de energía, que le hace más sensible a la luz de una determinada longitud de onda, absorbiendo radiación electromagnética de una determinada

^v Cantidad de energía requerida para desalojar un electrón de su enlace covalente.

región del espectro. Los semiconductores se eligen cuidadosamente para lograr absorber la mayor parte posible del espectro solar.

Las células solares *multiunión* o *Tándem* pueden hacer un mejor uso del espectro solar por tener múltiples capas de semiconductores con diferente salto energético de bandas. Están hechas de un material diferente, y absorben una porción diferente del espectro. La capa superior tiene el mayor *band-gap* de modo que sólo los fotones con más energía son absorbidos por esta capa. Cada capa absorbe los fotones que tienen energías superiores al *band-gap* de esa capa. La forma más común de la célula solar multiunión se compone de tres capas, lo que se llama una célula solar de triple unión. Los paneles que utilizan esta clase de células, han llegado a lograr rendimientos del 35% que teóricamente son la suma de los rendimientos de ambos tipos de semiconductores por separado. La desventaja es el alto costo de los módulos, debido a la superposición de semiconductores.

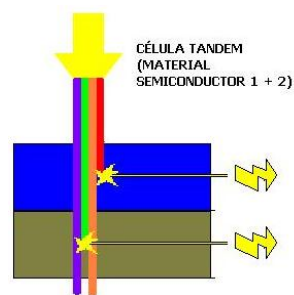


Figura 3.4 - Estructura de una célula tándem, el semiconductor 1 aprovecha una parte del espectro y el semiconductor 2 aprovecha otra parte del espectro. Imagen extraída de la memoria del proyecto fin de carrera titulado: Instalación fotovoltaica conectada a red sobre estructura en Crevillente.

3.2.3.1 Célula de Arseniuro de galio.

El arseniuro de galio (*GaAs*) es un semiconductor cuyo ordenamiento cristalino es similar a la estructura del diamante y del *Si* cristalino, pero con dos átomos diferentes por cada unidad de celda del cristal.

Sus propiedades electrónicas permiten lograr celdas que han alcanzado eficiencias superiores al 27%¹¹, mientras que con estructuras más complicadas tipo tándem *GaAs/GaSb*, se obtuvieron eficiencias del 35 % bajo iluminación concentrada (100X)¹². En el *GaAs* la luz es absorbida muy cerca de la superficie del dispositivo, necesitándose unos pocos μm de espesor para su fabricación.

Una célula triple unión está compuesta por *GaAs*, *Ge* y *GaInP₂*^{vi}. Cada tipo de semiconductor se caracteriza por una banda de energía, que le hace más sensible a la luz de un determinado color, absorbiendo radiación electromagnética de una región muy concreta del espectro. Las células multiunión de *GaAs* tienen eficiencias que han alcanzado valores de hasta un 39%.

Los módulos de *GaAs* tienen las siguientes ventajas: ancho de banda de 1,43 eV, alta capacidad de absorción y altísima resistencia al calor, tienen eficiencias del 26% y en concentradores se han alcanzado hasta el 29%.

^{vi} *GaAs*: Arseniuro de Galio; *Ge*: Germanio; *GaInP₂*: Galio Indio y Fosforo

Algunas desventajas que presentan estas células son: escasez de galio en la naturaleza, lo que aumenta su coste, y la toxicidad del arsénico involucrado en la fabricación. Por ello es importante estudiar las consecuencias ambientales de la instalación de grandes sistemas solares basados en este semiconductor.

3.2.4 Células de película delgada (Thin-film).

La tecnología thin-film desarrolla células de menor coste y menores requerimientos energéticos de producción frente a las células de silicio cristalino (c-Si). Los diferentes tipos de células comerciales de capa delgada han hecho aparición en el mercado en los últimos años: células de silicio amorfo (a-Si), con estructura multiunión, de capa delgada de silicio policristalino en sustrato de bajo coste, de heterounión de diseleniuro de Cobre-Indio/Sulfuro Cadmio (CuInSe₂/CdS) y las células de heterounión de Teluro de Cadmio/Sulfuro de Cadmio (CdTe/CdS).

La tecnología de capa delgada utiliza materiales con un espesor entre 1 y 10 μm y se fabrican mediante procesos capaces de producir grandes volúmenes a bajo coste¹³¹⁴. Otro aspecto importante de estas células es su versatilidad, lo que permite incluso en algún caso su adaptación a superficies irregulares.

De los distintos tipos de células, la tecnología que en la actualidad ha alcanzado un valor en el mercado importante, son las células de silicio amorfo.

3.2.4.1 Células de Silicio amorfo.

Las células fabricadas con *a-Si*, son las que actualmente menor rendimiento proporcionan y las más baratas de fabricar. Su principal ventaja es su bajo precio. Una célula amorfa consiste en una unión *p-n* en la que se intercala una capa intrínseca (*p-i-n* o *n-i-p*^{vii}); una capa transparente de óxido conductor (TCO^{viii}) en su parte frontal, y una capa metálica como contacto y reflector trasero. El silicio utilizado en este tipo de células se conoce como silicio amorfo hidrogenado. Al ser un tipo de célula muy ligera y manejable se convierte en la solución óptima para su adaptación a diferentes superficies.

Las propiedades físicas del *a-Si hidrogenado (H)* difieren del *c-Si* en que el *Si* amorfo no posee un orden en la estructura atómica del material. Los átomos no están localizados a distancias y ángulos únicos. Esta aleatoriedad en el ordenamiento atómico del Si modifica las propiedades electrónicas del material, lo que provoca un band-gap entre 1,1 y 1,75 eV (frente al 1,1 eV del *c-Si*), controlado mediante la formación de aleaciones con germanio y carbono.

La estructura amorfa es viable ya que las células son capaces de absorber la radiación solar con una eficiencia de 40 veces superior a la del *c-Si*, requiriéndose una película de 1 μm para absorber el 90 % de la luz. Esta disminución de la cantidad de material, asociada con procesos de deposición de estas películas sobre sustratos más económicos, constituye el gran potencial de estas celdas.

^{vii} Diodo PIN, es una estructura de tres capas, siendo la intermedia un *semiconductor intrínseco* y las externas una de *tipo P* y la otra de *tipo N*.

^{viii} Transparent Conductive Oxide.

La estructura de esta célula cuenta con un sustrato transparente. Sobre él se deposita una fina capa de óxido de alta conductividad óptica. Se añade una capa de α -Si dopada tipo p de 10nm, una capa de silicio amorfo sin dopar intrínseco de 300nm, una capa de α -Si tipo n de 20nm y un contacto metálico. Los fotones producen los pares electrón-hueco en el semiconductor, los cuales se encuentran dentro del campo eléctrico producido por las capas p y n .



Figura 3.5 - Estructura de una célula de película delgada de silicio amorfo (a-Si). Imagen extraída de la memoria de la tesis doctoral titulada: Prototipo experimental para la medida y caracterización de las curvas I-V y P-V de módulos y Arrays FVs: diseño, modelado, implementación y pruebas.

Las láminas con espesores de $1\mu\text{m}$ consiguen rendimientos del 13% a nivel de laboratorio. Sin embargo en los procesos de fabricación a gran escala, el rendimiento desciende hasta valores de 6 y 8%.

La construcción de células de α -Si compuestas de varias uniones (multiunión), suponen una mejora en su rendimiento (8-8,5%)¹⁵, lo cual permite el uso de este tipo de células de forma masiva en la generación de energías fotovoltaicas.

Entre las ventajas que presentan este tipo de células, se encuentran: el bajo coste del material debido al poco rendimiento del Si en la célula y la posibilidad de depositar el α -Si(H) en áreas extensas; así como la posibilidad de fabricación de módulos en proceso continuo.

Entre las desventajas de este material para su uso en dispositivos fotovoltaicos, cabe resaltar que las células a-Si sufren una degradación debido a la luz al inicio de su operación, lo cual provoca que la eficiencia del módulo disminuya cerca de un 10%.

Tienen un color homogéneo (marrón), pero no existe conexión visible entre las células. Se emplean para pequeños dispositivos electrónicos (Calculadoras, relojes) y en pequeños paneles portátiles. Los paneles son menos costosos que los de otras tecnologías. Su rendimiento máximo es del 16% en pruebas de laboratorio e inferior al 10% en módulos comerciales.

3.2.4.2 Células de Teluro de Cadmio /Sulfuro de Cadmio (CdTe/CdS).

El band-gap del telurio de cadmio es de 1,45 eV, lo que lo hace un excelente semiconductor para su uso de células solares. El CdTe puede convertir la energía solar en electricidad con una tasa de eficiencia comparable con las tecnologías basadas en silicio, requiriéndose sólo el 1% del material semiconductor.

La estructura típica de este tipo de células, consiste en una capa de CdS tipo *n* depositada sobre una película antirrefleitora; sobre la que se deposita una película CdTe tipo *p* con gran capacidad de absorción; a continuación se coloca una capa de óxido transparente (TCO generalmente SnO_2) que va conectada con el contacto eléctrico. Las células basadas en tecnología CdTe/CdS forman parte de una gran tecnología con gran potencial de bajo coste. Se han conseguido células solares a nivel de laboratorio con eficiencias de hasta un 16%, mientras que en las fabricadas comercialmente consiguen eficiencias del 8%¹⁶.

La principal ventaja de esta tecnología radica en su sencillez y la multitud de procedimientos existentes para su fabricación, la mayoría de las cuales tienen un gran potencial para producciones a gran escala. Mientras que sus inconvenientes son el coste de los materiales y la toxicidad del CdS.

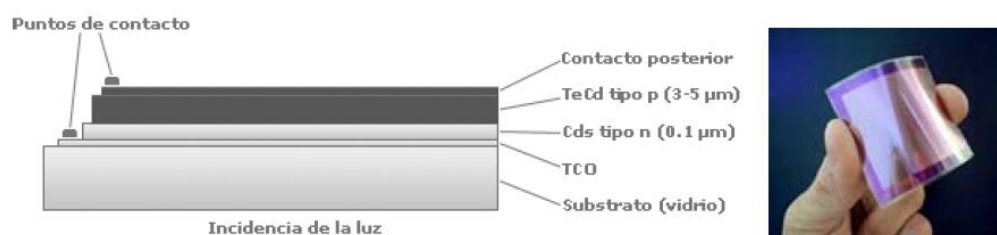


Figura 3.6 - Estructura e imagen de una célula CdTe/CdS. Imagen extraída de la memoria de la tesis doctoral titulada: Prototipo experimental para la medida y caracterización de las curvas I-V y P-V de módulos y Arrays FVs: diseño, modelado, implementación y pruebas.

3.2.4.3 Célula de Cobre-Indio-Galio-Selenio (CIGS, CuInGaSe_2).

Esta clase de células presentan un gran potencial debido a su alta eficiencia y bajo coste. Las células CIGS ofrecen un band-gap variable (Varia entre 1,02 eV a 1,68 eV) mediante la composición de *In-Ga*, para maximizar la absorción de radiación solar. Proporcionan el mayor coeficiente de absorción dentro de la tecnología película delgada (thin-film), lo que permite que aproximadamente un 99% de los fotones sean absorbidos en los primeros micrómetros del material¹⁷.

Una célula CIGS está conformada por una capa de contacto de molibdeno, por una capa de CdS o ZnS y una bicapa de aluminio y óxido de zinc como TCO. La principal ventaja de esta técnica, es la reducción de costes en materiales. Sus desventajas son la complejidad del método de fabricación, con una necesidad de inversión importante y la disponibilidad de materiales, sin obviar la toxicidad de la capa CdS¹⁸.

Nanosolar comenzó a producir células solares basadas en tecnología CIGS, empleando nanoestructuras de tinta sobre una lámina de aluminio. Su funcionamiento es similar al de una impresora de tinta, esto permite reducir de manera importante los costes de fabricación de células fotovoltaicas.

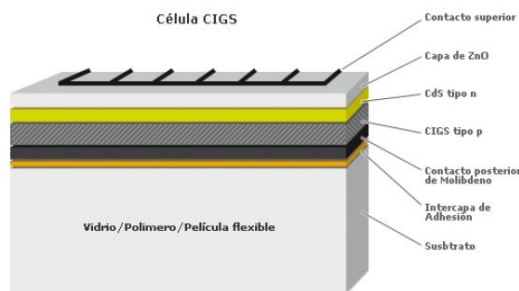


Figura 3.7 - Estructura de una célula CIGS. Espesor de cada capa del orden de las micras. Imagen extraída de la memoria de la tesis doctoral titulada: Prototipo experimental para la medida y caracterización de las curvas I-V y P-V de módulos y Arrays FVs: diseño, modelado, implementación y pruebas.

3.2.4.4 Diseleniuro de Cobre-Indio (CIS, $CuInSe_2$).

Las células de Seleniuro de Cobre e Indio (CIS) constan de varias células solares conectadas en serie. Su principal objetivo es absorber un amplio espectro de radiación solar. Estas películas presentan una eficiencia del 17%¹⁹; el material presenta un gran potencial, pero no es muy utilizado debido a que requiere procedimientos de fabricación muy específicos.

Los primeros módulos CIS fueron fabricados con una eficiencia del 8% en el 2001. Desde entonces, la eficiencia de este tipo de células ha aumentado a valores entre el 9-10% en 2002. En la actualidad los módulos de estas células presentan eficiencias del 10 al 12%. Un aspecto importante para el desarrollo de esta tecnología es la reducción de costes de material (más costosa que la del α -Si). El laboratorio NREL^{ix} ha alcanzado rendimiento de células CIS del 19%.

La estructura de una célula CIS está formada por un conductor transparente sobre el que se deposita una película antirrefleitora seguida del semiconductor tipo n . La película n (entre 0,05 y 0,01 μ m) actúa como una ventana, la cual debe tener un band-gap superior a 2,8 eV. La película absorbente tipo p , de 2 μ m de espesor y alta capacidad de absorción tiene un band-gap de 1,0 eV; lo cual permite un V_{oc} elevado. La ventana es de CdS, en esta se introduce una ventana de dos capas ($ZnO+CdS$). Por último se encuentra la película CIGS($Cu(In,Ga)Se_2$), que permite una amplia flexibilidad en la selección de ancho de banda de absorción.

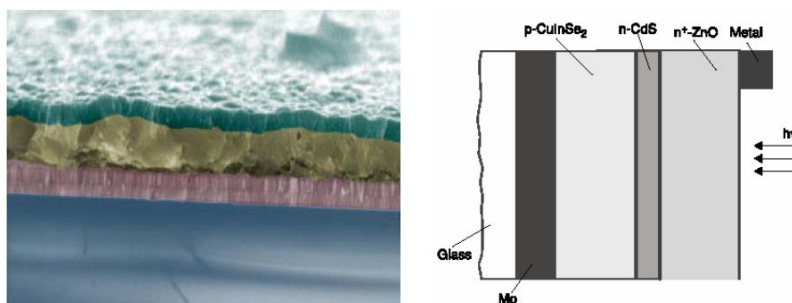


Figura 3.8 - Imagen sección transversal célula CIS (Izquierda). Estructura de una célula CIGS (Derecha). Espesor de cada capa del orden de las micras. Imagen extraída de Hahn-Meitner-Institut Berlín.

^{ix} National Renewable Energy Laboratory.

3.2.5 Células orgánicas.

Se ha estado investigando la posibilidad de usar sustancias orgánicas (plásticos o polímeros) de bajo coste para confeccionar paneles solares. En este caso la producción sería menos costosa, la instalación sería más fácil, pudiéndose incluso ajustar a las formas arquitectónicas debido a su flexibilidad. Las células orgánicas están basadas en polímeros y en diferentes estructuras de átomos de carbono (furelenos).

Normalmente, para que una célula solar sea considerada eficiente, se necesita que transforme más del 10% de la energía recibida en electricidad. Para el caso de células de Si este porcentaje se eleva al 12%. En la actualidad las células de polímeros llegan al 5,2%, se espera que unos años el rendimiento mejore.

El funcionamiento de una célula orgánica se considera como el inverso de un LED. En el caso de la célula solar los electrones son recolectados por el electro de metal (Cátodo) y los huecos por el electrodo ITO (ánodo)

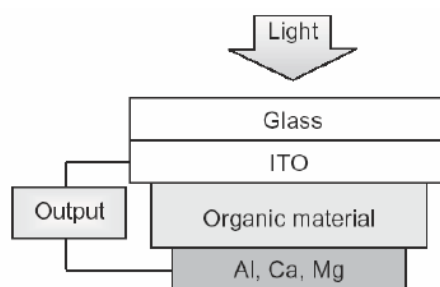


Figura 3.9 - Estructura célula fotovoltaica orgánica. Imagen extraída de la memoria de la tesis doctoral titulada: Prototipo experimental para la medida y caracterización de las curvas I-V y P-V de módulos y Arrays FVs: diseño, modelado, implementación y pruebas.

Los polímeros usados en la construcción de células orgánicas se encuentran comercialmente disponibles en grandes cantidades. El objetivo final para la eficiencia de la célula solar de polímero está fijado entre un 15 o 20%, con una vida útil de entre 15 a 20 años. Los grandes módulos de silicio con la misma vida útil, tienen una eficiencia promedio de entre 14 y 18 %²⁰.

3.2.5.1 Células sensibilizadas con colorantes (*Dye Solar cell*).

Las células solares sensibilizadas con colorantes, se basan en una tecnología híbrida realizada con materiales orgánicos e inorgánicos utilizando colorantes. Está basada en semiconductores nanoestructurados (Dióxido de titanio, TiO_2) sensibilizados con colorante. Debido a que el titanio resulta relativamente barato, este tipo de células ofrecen un gran potencial de reducción de costes²¹. Este semiconductor es ambientalmente benigno, ampliamente utilizado en dentífricos, bronceadores, y como pigmento blanco en pinturas.

En el campo práctico, la eficiencia de conversión total lograda hasta ahora se encuentra cerca del 11%. En el ámbito de la industria, una empresa australiana^x, tiene desde el 2001 la primera planta de producción a gran escala de células solares de titanio sensibilizado, los paneles tienen características típicas de 600 mm x 900 mm y potencia pico de 50 W/m². Se muestra en la figura 3.10.



Figura 3.10 – Paneles solares de TiO_2 sensibilizado (color rojo) con bandas conductoras negras). Imagen extraída: Sustainable Technologies Internacional.

La célula de semiconductor nanoporoso sensibilizado es un dispositivo versátil, ya que se puede concebir para gran variedad de configuraciones y aplicaciones (domesticas, decorativas o arquitectónicas). Considerando las células convencionales de unión sólida, hay que señalar que los semiconductores inorgánicos absorben prácticamente toda la luz que excede su energía de ancho de banda prohibida. Esto es favorable para una alta eficiencia de conversión de luz solar en electricidad. Pero los colorantes, por otra parte, tienen una banda de absorción bastante estrecha, y la posibilidad de configurar las absorciones en diferentes regiones de longitud de onda confiere a la célula de colorante una ventaja natural sobre otras células solares. Es decir, se pueden realizar células de colorante con absorción en el infrarrojo que sería transparente para el ojo humano y aún así absorbería una fracción substancial de la luz solar. Por lo tanto las células colorantes encuentran un mercado potencial y sin competencia si se desea aprovechar las ventanas para producir electricidad. Funcionan bien en una amplia gama de condiciones de iluminación y orientación, y son menos sensibles a un parcial sombreado y a bajos niveles de iluminación.

Estos aspectos las hacen especialmente adecuados para aplicaciones arquitectónicas, los módulos de color DSC son excelentes elementos de construcción multifuncional, capaces de generar electricidad en exteriores o interiores, mientras que pueden servir de aislante térmico y acústico. Productos como cargadores de baterías (para interiores y exteriores) compatibles con teléfonos móviles, ordenadores portátiles, reproductores de audio y cámaras digitales se encuentran disponibles comercialmente.

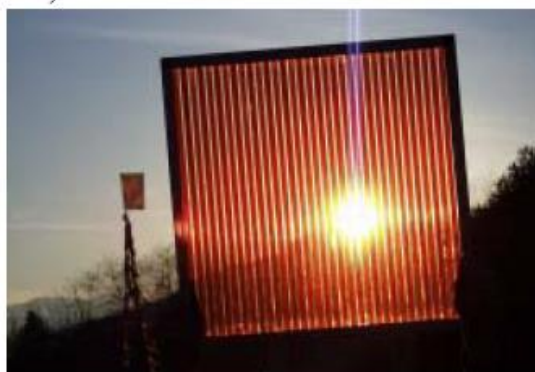
^x STI Sustainable Technologies International



a)



b)



c)

Figura 3.11 - a) Integración de módulos de DSC transparentes en edificios. Imagen extraída schott Ibérica. b) Cargador comercial. Imagen extraída G24 Innovations. c) Módulo de DSC de gran área. Imagen extraída Solaronix.

En cuanto a las perspectivas más próximas, hay que reconocer que en su estado actual las células solares sensibilizadas no pueden competir en cuanto a eficiencia o durabilidad con otras alternativas del mercado de energía solar. Se han planteado dudas sobre la estabilidad del colorante, cuya degradación, aunque ocurra muy lentamente, inutilizaría la célula solar a medio o largo plazo. Otro inconveniente es la fase líquida, entre otras cosas porque no resulta fácil sellar perfectamente y quedar inservible. Por ello mucho de las investigaciones actuales tiene como objeto el simplificar el proceso de producción y a la vez conseguir mejores propiedades mecánicas. Por ejemplo, dotando a la célula de flexibilidad.

De este modo la célula de colorante podría competir en ciertas áreas de mercado, por ejemplo en aplicaciones interiores donde los requisitos de eficiencia y durabilidad no son tan estrictos como en aplicaciones al aire libre.

3.3 Caracterización óptica.

3.3.1 Óptica de una intercara.

Consideremos la reflexión y transmisión de una onda plana en la intercara de dos medios semi-infinitos 0 y 1, homogéneos, ópticamente isotrópicos y con índices de refracción complejos N_0 y N_1 , ϕ_0 y ϕ_1 son los ángulos de incidencia y refracción, p y s son los ejes paralelos y perpendicular al plano de incidencia; donde $\mathbf{p} \times \mathbf{s}$ es paralelo a la dirección de propagación. En la figura 3.12 se representa este sistema.

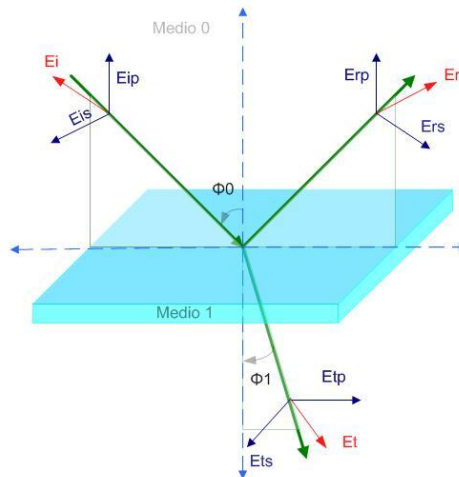


Figura 3.12 - Diagrama de reflexión y transmisión de una onda que incide con un ángulo ϕ_0 a la intercara plana entre dos medios semi-infinitos 0 y 1.

Si utilizamos la notación recomendada por Müller en la conferencia Internacional sobre Elipsometría celebrada en la universidad de Nebraska en 1986²², la dependencia temporal de todos los campos armónicos se asocia a $e^{j\omega t}$ y la propagación de ondas planas en un medio absorbente e isotrópico se describe por el índice de refracción complejo N dado por:

$$N = n - jk \quad (3.1)$$

Donde n es el índice de refracción y k es el coeficiente de extinción del medio, n es el factor para el cual la velocidad de radiación se reduce con respecto a sus valores en el vacío y k describe un cambio en la velocidad de fase y amplitud de la onda en el medio.

Todos los campos en el interior del medio 0 y 1 de la figura 3.12, obedecen las ecuaciones de Maxwell y las consiguientes condiciones de contorno en la intercara, por lo que las direcciones de propagación de los campos están contenidas en un plano perpendicular a la intercara, el ángulo de incidencia y reflexión deben ser iguales, y el de incidencia y refracción se relacionan por la ley de Snell.

$$N_0 \sin \phi_0 = N_1 \sin \phi_1 \quad (3.2)$$

Si ambos medios son transparentes, tal que N_0 y N_1 sean números reales, los ángulos ϕ_0 y ϕ_1 son también reales. Sin embargo cuando alguno de los medios es absorbente, los ángulos serán complejos en general, aunque el tratamiento formal se mantiene, la imagen física de los campos

se complica. Para una amplitud y polarización de la luz incidente dada, se puede calcular la amplitud y la polarización de la onda reflejada y transmitida a partir de las condiciones de continuidad de las componentes tangenciales de los vectores campo eléctrico (E) y magnético (H) a través de la interfaz.

Puede demostrarse que si la onda está linealmente polarizada con el campo eléctrico vibrando en la dirección p , las ondas reflejadas y transmitidas quedan polarizadas en esta dirección e igualmente ocurre con la dirección s . Por tanto las direcciones de polarización s y p son autopolarizaciones siempre que los medios sean ópticamente isótropos. Si la onda incidente es de polarización arbitraria, para calcular su estado de polarización resultante, se descompone en sus estados p y s .

Los coeficientes de Fresnel²³; permiten medir la relación entre los campos eléctricos transmitidos y reflejados, cuando una onda experimenta cambios en el medio en el que se propaga, estos coeficientes vienen dados por las ecuaciones (3.3), (3.4), (3.5) y (3.6)

$$\frac{E_{rp}}{E_{ip}} = r_p = \frac{N_1 \cos \theta_0 - N_0 \cos \theta_1}{N_1 \cos \theta_0 + N_0 \cos \theta_1} \quad (3.3)$$

$$\frac{E_{rs}}{E_{is}} = r_s = \frac{N_0 \cos \theta_0 - N_1 \cos \theta_1}{N_0 \cos \theta_0 + N_1 \cos \theta_1} \quad (3.4)$$

$$\frac{E_{tp}}{E_{ip}} = t_p = \frac{2 N_0 \cos \theta_0}{N_1 \cos \theta_0 + N_0 \cos \theta_1} \quad (3.5)$$

$$\frac{E_{ts}}{E_{is}} = t_s = \frac{2 N_0 \cos \theta_0}{N_0 \cos \theta_0 + N_1 \cos \theta_1} \quad (3.6)$$

Los coeficientes de reflexión y transmisión p y s son diferentes, el estado de polarización arbitrario de una onda incidente cambiara tras su reflexión o refracción

La elipsometría de reflexión es una técnica de caracterización óptica, que mediante la medida del estado de polarización de un haz de luz reflejado por la superficie de un material y conociendo el estado de polarización del haz incidente, permite deducir las constantes ópticas del material.

La magnitud que realmente se mide en elipsometría, es el cociente del coeficiente de reflexión paralelo (r_p) y el coeficiente de reflexión perpendicular (r_s) llamado razón de reflectancia compleja (ρ).

$$\rho = \frac{r_p}{r_s} = \tan \Psi e^{j\Delta} \quad (3.7)$$

$$\tan \Psi = \frac{|r_p|}{|r_s|} \quad (3.8)$$

$$\Delta = \delta_{rp} - \delta_{rs} \quad (3.9)$$

Así, Ψ determina los cambios relativos de amplitud y Δ cambios en fase respectivamente, de la onda reflejada respecto al incidente.

Al sustituir en la expresión ρ los valores de r_p y r_s y utilizamos ley de Snell, obtenemos una ecuación (3.10) que puede determinar el índice de refracción del medio 1, si se conocen el ángulo y el índice de refracción del medio de incidencia y se mide ρ .

$$N_1 = N_0 \left[1 + \left(\frac{1-\rho}{1+\rho} \right)^2 \tan^2 \phi_0 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.10)$$

Otra posibilidad consiste en determinar las reflectancias de R_p y R_s , que equivalen al módulo al cuadrado de los correspondientes coeficientes de Fresnel. Si la luz incidente es no polarizada, se determina la reflectancia como:

$$R = \frac{1}{2} (R_p + R_s) \quad (3.11)$$

Para la transmitancia se aplicaría lo mismo pero utilizando los coeficientes de Fresnel que permiten medir la relación de campos eléctricos transmitidos. Las medidas de reflectancia y transmitancia se denominan fotométricas, pues implican la medida de la intensidad de la luz incidente, reflejada y transmitida; mientras que en las medidas elipsométricas sólo están implicados los cambios en el estado de polarización de las ondas.

3.3.2 Óptica de múltiples capas.

El esquema de una multicapa consiste en m capas rodeadas a ambos lados por dos medios masivos. Las capas se numeran empezando por el lado izquierdo el cual supone el lado de la luz incidente. La luz incidente es una onda plana, monocromática, plano polarizada y de anchura infinita. Se supone que la multicapa está constituida por capas planas, paralelas, de extensión infinita, homogénea e isotrópica. En estas condiciones, cada capa queda definida por un índice de refracción complejo N_i y un grosor d_i . Para que la onda incidente y reflejada puedan separarse en términos de energía, suponemos que el índice n_0 del medio incidente es real. En la figura 3.13. Se muestra el esquema de multicapa.

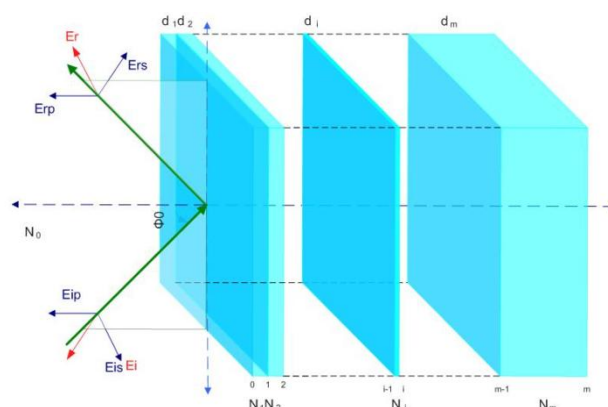


Figura 3.13 - Diagrama esquemático de una película de múltiples capas.

Las expresiones de los vectores campo eléctrico y magnético, se obtienen de soluciones de las ecuaciones de Maxwell sujetas a unas condiciones de contorno y de ciertas condiciones iniciales. Dentro de cada capa la solución general para las amplitudes de los campos, viene dada por la suma de dos ondas sinusoidales que viajan en direcciones opuestas, en el medio semi-infinito emergente ($m+1$) sólo existe una onda transmitida dándonos esto la condición inicial para las soluciones.

Si consideramos incidencia normal, la dirección de propagación sería z . Puesto que los campos eléctrico y magnético son perpendiculares entre sí y las ondas son homogéneas, los campos sólo tendrán componentes paralelas a las intercaras entre capas. En este caso no hay necesidad de especificar el estado de polarización de la onda, pues las dos polarizaciones se comportan igual. La expresión completa para el vector campo eléctrico de una onda plana viajando en la dirección positiva del eje z en un medio isótropo y absorbente es:

$$E = E_0 e^{-j(\omega t + \delta)} e^{-j\omega N_z z/c} \quad (3.12)$$

Donde δ es un ángulo de fase constante, c es la velocidad de la luz en el espacio libre y E_0 es un complejo que define la amplitud y polarización de la onda. Para el caso de una onda incidente en una multicapa, la ecuación (3.12) la reescribimos para campo eléctrico y la intensidad campo magnético

$$E(z, t) = E(z) e^{j\omega t} \quad (3.13)$$

$$H(z, t) = H(z) e^{j\omega t} \quad (3.14)$$

Substituimos E_0 y δ por a_i y α_i para la onda transmitida (en $i=m+1$) y por b_i y β_i para la onda reflejada (en $i=0$), también sustituimos ω/c por $2\pi/\lambda$ para ambos casos, el resultado es:

$$E_i(z) = a_i e^{j\left(-\frac{2\pi}{\lambda} N_i z + \alpha_i\right)} + b_i e^{j\left(\frac{2\pi}{\lambda} N_i z + \beta_i\right)} = E_i^t + E_i^r \quad (3.15)$$

$$H_i(z) = N_i \left[a_i e^{j\left(-\frac{2\pi}{\lambda} N_i z + \alpha_i\right)} - b_i e^{j\left(\frac{2\pi}{\lambda} N_i z + \beta_i\right)} \right] = H_i^t + H_i^r \quad (3.16)$$

La notación de t y r hacen relación a las ondas transmitidas y reflejadas en cada capa; al tratar con cantidades promediadas, se han omitido las dependencias temporales.

Elegimos $E_{m+}^t=1$ y $E_{m+}^r=0$ como punto inicial del cálculo. El cálculo de las amplitudes de los campos dentro de la multicapa se realiza mediante un proceso recurrente en el que se utilizan las condiciones de continuidad en las fronteras para pasar de E_{i+} a E_i y las siguientes expresiones para atravesar cada intercara.

$$E_{(i-1)+}^t = E_i^r e^{j\left(\frac{2\pi}{\lambda} N_i d_i\right)} = E_i^t e^{j\Delta_i} \quad (3.17)$$

$$E_{(i-1)+}^r = E_i^r e^{-j\left(\frac{2\pi}{\lambda} N_i d_i\right)} = E_i^r e^{-j\Delta_i} \quad (3.18)$$

Donde $d_i = z_i - z_{i-1}$ es el espesor de cada capa y Δ_i es el espesor de fase complejo que se denomina camino óptico. De lo anterior se derivan las siguientes expresiones de recurrencia:

$$E_{(i-1)^-}^t = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{N_i}{N_{(i-1)}} \right] E_{i^-}^t e^{j\Delta_i} + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{N_i}{N_{(i-1)}} \right] E_{i^-}^r e^{-j\Delta_i} \quad (3.19)$$

$$E_{(i-1)^-}^r = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{N_i}{N_{(i-1)}} \right] E_{i^-}^t e^{j\Delta_i} + \frac{1}{2} \left[1 + \frac{N_i}{N_{(i-1)}} \right] E_{i^-}^r e^{-j\Delta_i} \quad (3.20)$$

El punto inicial de estas recurrencias se obtiene al aplicar la condición en la intercara m :

$$E_{m^-}^t = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{N_{m+1}}{N_m} \right] \quad (3.21)$$

$$E_{m^-}^r = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{N_{m+1}}{N_m} \right] \quad (3.22)$$

Estamos en condiciones de calcular las relaciones de energía y de fase que nos interesan, las definiremos en términos del promedio temporal conocido como vector Poynting.

$$P(z) = C_p \Re[E(z)H(z)^*] \quad (2.23)$$

Donde C_p es una constante que depende de la elección de unidades, \Re es la parte real y $*$ es el complejo conjugado. Para una suma de ondas, P tendrá, términos cruzados en las diferentes ondas, pero si el medio es absorbente resulta

$$P(Z) = C_p n (a^2 - b^2) = P^t(z) - P^r(z) \quad (3.24)$$

La reflectancia y la transmitancia de la multicapa en términos de las variables de recurrencia son:

$$R = \frac{P_{0^-}^r}{P_{0^-}^t} = \left| \frac{E_{0^-}^r}{E_{0^-}^t} \right|^2 \quad (3.25)$$

$$T = \frac{P_{m^-}^t}{P_{0^-}^t} = \frac{\Re[N_{m+1}]}{n_0} \left| \frac{E_{m^-}^r}{E_{0^-}^t} \right|^2 \quad (3.26)$$

Para el caso de incidencia oblicua, la generalización de las ecuaciones anteriores se puede llevar a cabo si se observa que en cada intercara, la onda transmitida cambia su sección eficaz respecto a la incidente oblicua, por lo que una definición de R y T se basa en el principio de conservación de energía en las componentes normales del vector Poynting que dependen de las componentes tangenciales de los campos eléctrico y magnético de las intercaras. Así, teniendo en cuenta la polarización de la onda, definimos el índice de refracción efectivo. Para polarización p (3.27) y para polarización s (3.28).

$$\widetilde{N}_l = \frac{N_i}{\cos \Phi_i} \quad (3.27)$$

$$\widetilde{N}_l = N_i \cos \Phi_i \quad (3.28)$$

Un camino óptico efectivo que viene dado por la ecuación (3.29)

$$\tilde{\Delta}_i = \Delta_i \cos \Phi_i \quad (3.29)$$

Donde $\cos \Phi_i$ es una magnitud compleja que es definido por la ecuación (3.30)

$$\cos \Phi_i = \sqrt{1 - \frac{(n_0 \sin \theta_0)^2}{N_i^2}} \quad (3.30)$$

En la práctica, la última capa es comúnmente el sustrato, es decir una capa de grosor mucho mayor que el resto de capas y que la longitud de la onda incidente. Así, solo en condiciones ideales se podrían apreciar sus efectos de interferencia.

Cualquier inhomogeneidad o la imperfecta colimación y monocromaticidad de la onda, introducen efectos promediados que eliminan dichas interferencias. Matemáticamente, este hecho se puede incluir en las expresiones para R y T haciendo:

$$R = \frac{1}{\pi} \int_{i\pi}^{(i+1)\pi} R(\Delta_s) d\Delta_s \quad (3.31)$$

$$T = \frac{1}{\pi} \int_{i\pi}^{(i+1)\pi} T(\Delta_s) d\Delta_s \quad (3.32)$$

En el caso de sustrato no absorbente, es posible obtener soluciones analíticas integrales. Para sustratos que son suficientemente absorbentes o grueso se utiliza integración analítica ya que un sustrato es considerado semi-infinito.

3.3.3 Problema inversión de las ecuaciones ópticas.

3.3.3.1 Antecedentes.

Desde los años 60 el problema se ha tratado desde diversos puntos vista²⁴. Inicialmente el problema se centra en la determinación del índice de refracción complejo de la película (N_f) sobre un sustrato, conocidos todos los espesores y el índice del sustrato. Como el único caso que admite inversión analítica es el de la determinación del espesor de la película (d_f) conocidos los índices de todas las fases, se opta por métodos de inversión numéricos, en los que, debidos a consideraciones de tiempo y capacidad de cálculo, se utilizan modelos muy simplificados o aproximaciones que se han criticado posteriormente. Aún conociendo el espesor de la película, las soluciones a la inversión se ven seriamente afectadas por pequeñas variaciones del espesor. Una solución final satisfactoria pasa por ajustar simultáneamente d_f y N_f , obteniendo lo que suele llamarse espesor óptico.

El número de ecuaciones o medidas experimentales que se invierten, también ha evolucionado con el tiempo. Inicialmente para obtener dos variables "independientes" (n_f y k_f) se utilizaban dos medidas. El método más popular en fotometría es el denominado RT, la elipsometría de reflexión se basa en las medidas de Ψ y Δ . Sin embargo el argumento de igualar el número de incógnitas al de ecuaciones se ve perturbado por: 1- El sistema presenta soluciones múltiples o ninguna dependiendo de λ y d_f . 2- No siempre la solución obtenida tiene sentido físico. 3- En medidas espectrales podemos tener $2 \cdot n$ ecuaciones y $2 \cdot n + 1$ incógnitas considerando d_f independiente de λ . Si los espectros fuesen continuos n tendería a infinito.

Azzam y Bashara²⁵ han analizado el caso de un sistema sobre-determinado denominado elipsometría de múltiple ángulo de incidencia y proponen un test de correlación de parámetros para determinar la independencia de las medidas a cada longitud de onda.

Pelletier²⁶ propone el uso de medidas adicionales como comprobación de la compatibilidad de las medidas experimentales o la bondad del modelo elegido. En general se observa que un error sistemático en un sistema determinado, lleva a soluciones con un error transmitido, sin embargo, errores sistemáticos de distinta naturaleza en distintas medidas pueden comprometer el proceso de inversión en un sistema sobre determinado.

3.3.3.2 Solución con valores de reflectancia y transmitancia.

Para exponer las soluciones de obtención de constantes ópticas a partir de valores de reflectancia y transmitancia; nos basamos en un ejemplo teórico de solución conocida. Se propone un sistema óptico película-substrato de características muy frecuentes, donde el substrato no es absorbente de índice de refracción constante y una película con un espesor d_f y constantes ópticas (n_f, k_f) .

Las incógnitas son N_f y d_f , en primera instancia, tenemos los espectros experimentales de reflectancia y transmitancia para nuestro sistema. Con la intención de obtener un mapa de todas las posibles soluciones y estudiar el comportamiento de los contornos, realizamos mediante un método gráfico las inversiones numéricas para obtener n_f y k_f con un d_f arbitrario o de prueba. Este método ha sido propuesto por Denton *et al*²⁷ y revisado por Tomlin para introducir la inhomogeneidad de películas²⁸. Una última revisión de Cisneros *et al*²⁹, nos sugiere el estudio de los contornos $R_{\text{calculado}} - R_{\text{experimental}} = 0$; $T_{\text{calculado}} - T_{\text{experimental}} = 0$.

Estos contornos se cortan en dos puntos o soluciones. Para seleccionar el conjunto correcto de soluciones Cisneros²⁹ y colaboradores propone un criterio de mínima dispersión de errores en diferentes longitudes de onda.

En esta memoria las soluciones con valores de reflectancia y transmitancia, estudian métodos de estimación de parámetros (constantes ópticas) basado en el test estadístico de χ^2 y funciones de dispersión.

3.3.3.3 Test de χ^2 (Chi-cuadrado)

El test de Chi-cuadrado es una prueba estadística, cuyo principal objetivo es evaluar la bondad del ajuste de un conjunto de datos a una determinada distribución candidata. A través de esta evaluación aceptamos o rechazamos una hipótesis dada.

Por medio de este test determinamos si los datos disponibles de una muestra aleatoria simple de tamaño n corresponde a cierta distribución teórica. El primer paso a realizar es descomponer el recorrido de la distribución teórica en un número finito de subconjuntos: A_1, A_2, \dots, A_k . Después clasificar las observaciones muestrales, según el subconjunto al que pertenezcan, por último comparar las frecuencias observadas de cada A_i con las probabilidades que le corresponderían con la distribución teórica a contrastar.

Supongamos que tenemos un número k de clases en las cuales se registran un total de n observaciones (n es el tamaño muestral); las frecuencias observadas para cada clase están dadas por: O_1, O_2, \dots, O_k ; Donde el número total de frecuencias observadas debe ser igual que n .

Lo que deseamos comparar son las frecuencias observadas con las frecuencias esperadas (teóricas), estas últimas están dadas por E_1, E_2, \dots, E_k ; Donde el número total de frecuencias esperadas debe ser igual a n .

Se trata ahora de decidir si el número de resultados observados en cada clase corresponden aproximadamente al número esperado. Para comprobarlo, haremos uso de un contraste de hipótesis usando la distribución Chi-cuadrado (3.33)

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i} \quad (3.33)$$

Esta sumatoria es la de los k números no negativos. El numerador de cada término es la diferencia entre las frecuencias observadas y esperadas; en consecuencia, en cuanto estos valores estén más próximos entre sí, el numerador será pequeño. El denominador permite relativizar el tamaño del numerador.

Cuanto menor sea el valor estadístico de χ^2 , más coherentes serán las observaciones obtenidas con respecto a los valores esperados; por el contrario, valores grandes para este estadístico indicaran falta de concordancia entre las observaciones y lo esperado. Con este tipo de contraste se suele rechazar una determinada hipótesis nula, cuando el resultado es mayor que un determinado valor crítico.

Un experimento multinomial es generalización de un experimento binomial y consiste en: n pruebas idénticas e independientes, para cada prueba, existe un número k de resultados posibles y cada uno de esos resultados tiene una probabilidad de ocurrencia p_i ($p_1, p_2, \dots, p_k=1$), la cual permanece constante durante el desarrollo del experimento; por último el experimento dará lugar a un conjunto de frecuencias observadas, para cada resultado (O_1, O_2, \dots, O_k).

Estamos interesados en comparar los resultados obtenidos al realizar un experimento multinomial con los resultados esperados (teóricos). Esto nos permitirá saber si nuestro modelo teórico se ajusta bien a las observaciones. Para esto, utilizamos la distribución Chi-cuadrado, ya que esta nos permitirá realizar un contraste sobre la bondad del ajuste.

Utilizaremos la ecuación (3.33) con $k-1$ grados de libertad. Podemos calcular cada frecuencia esperada teórica, multiplicando el número total de pruebas n por la probabilidad de ocurrencia p_i , como se muestra en la ecuación (3.34), donde i toma valores de $1, 2, \dots, k$.

$$E_i = n * p_i \quad (3.34)$$

3.3.3.4 Función de minimización de error.

Una función de minimización, encuentra el mínimo de una función escalar de varias variables a partir de una estimación inicial, es generalmente una optimización no lineal. Si tenemos una función f , el primer punto de esta es X_0 ; por medio de la función de minimización podemos

encontrar el valor mínimo del primer punto (X_0); este valor puede ser un escalar, un vector o una matriz. Un ejemplo de minimización de multidimensional es la función de Rosenbrock.

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \quad (3.35)$$

El mínimo de esta función esta en $x_1=1$; $x_2=1$ con un valor de $f(x)=0$, su punto inicial tradicional es $x_1=-1,2$; $x_2=1$. Si se calcula la minimización de esta función por medio de un software matemático como Matlab utilizando la función FMINSEARCH, nos da el siguiente resultado: $x_1=1,0000$; $x_2=1,0000$, el valor de la función en este punto es: $f(x)=8,17777x10^{-10}$; esto indica que el resultado de la minimización encontró valores de x con cuatro cifras decimales muy próximos al valor de cero. Estas funciones son utilizadas por la herramienta de simulación OPTICA, para ajustar parámetros y constantes ópticas, veremos en detalle esto en el capítulo de materiales y métodos.

3.3.4 Medidas espectrofotométricas.

Las medidas espectrofotométricas, que proporcionan la respuesta óptica de las muestras en reflectancia o transmitancia, son la base de la caracterización óptica de las láminas delgadas y sistemas multicapa. Tomamos como referencia las medidas de transmitancia, ya que son las más fáciles de medir y por ende las más precisas. Un tipo de resultado habitual de esta clase de medida es la que se representa en la figura 3.14.

La figura 3.14 muestra el espectro de transmitancia (línea verde) en un rango de longitud de onda determinado, de una muestra de Arseniuro de Galio AsGa sobre sustrato. En esta clase de espectros se distinguen tres zonas.

La zona I corresponde al rango donde la película de AsGa es transparente; el espectro presenta máximos y mínimos que se deben a fenómenos interferenciales³⁰. Cuando la lámina tiene un índice de refracción mayor que el del sustrato, los máximos de transmitancia del espectro del sistema lámina/sustrato se aproximan a la transmitancia del sustrato. Si la lámina tiene un índice de refracción menor que el del sustrato, los mínimos del espectro de transmitancia del sistema lámina/sustrato se aproximan a la transmitancia del sustrato.

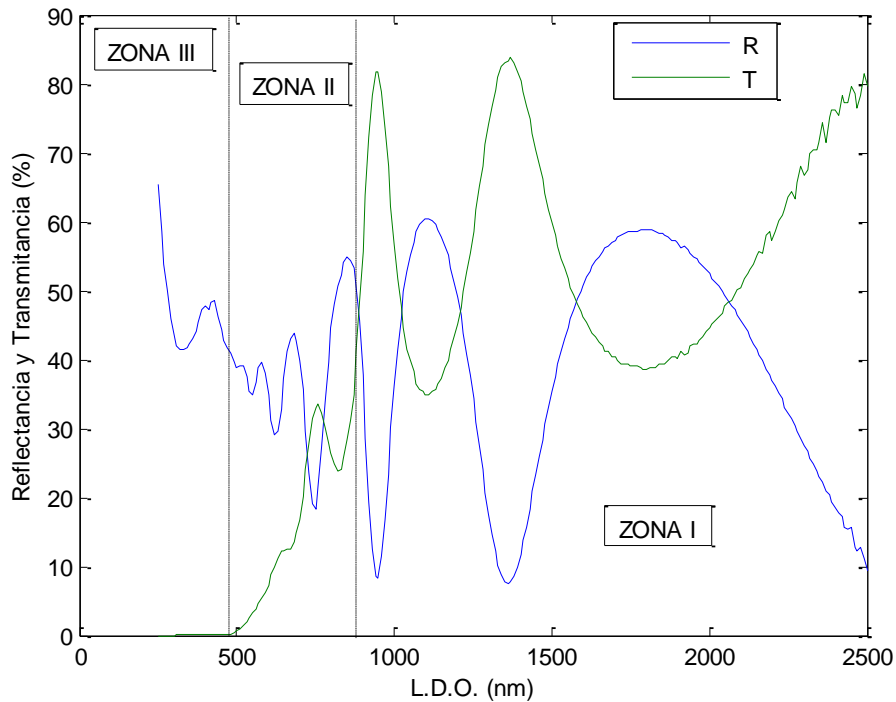


Figura 3.14 - Espectro de reflectancia y transmitancia de una película de Arseniuro de Galio (AsGa) sobre un sustrato de vidrio, en las que se distinguen las tres zonas con diferente comportamiento óptico.

La zona II de la figura 3.14, corresponde al borde de absorción de baja longitud de onda del material de la lámina, observamos que la transmitancia disminuye claramente al disminuir la longitud de onda y los extremos del espectro se ven amortiguados hasta que no se distinguen.

La zona III corresponde al rango de longitudes de onda en el que la radiación es absorbida por excitación de electrones desde la banda de valencia hasta la de conducción, saltando el *band gap* de energía.

Al utilizar un sustrato adecuado, el espectro experimental del sistema lámina/sustrato entre el borde de absorción de baja longitud de onda y la región de transparencia de la lámina delgada, contiene toda la información sobre los parámetros ópticos y el espesor de ésta. Cabe resaltar que la obtención de los parámetros ópticos a partir de valores de reflectancia y transmitancia en función de la longitud de onda no son triviales. Las curvas de reflectancia y transmitancia en función de la longitud de onda de los ejemplos que se analizan en esta memoria se han obtenido mediante espectrofotómetros de Perkin-Elmer Lambda 9.

3.3.5 Métodos de estimación de parámetros ópticos de una lámina delgada.

El espectro de transmitancia y reflectancia del sistema lámina-sustrato contiene toda la información sobre los parámetros ópticos de una lámina a distintas longitudes de onda y espesor de la misma; sin embargo las expresiones de la transmitancia y la reflectancia del sistema en función de estos parámetros no son lineales, ni biyectivas y por tanto la obtención de esta información no es directa.

En esta memoria los métodos que se usan para determinar los valores del índice de refracción (n) y el coeficiente de extinción (k) en función de la longitud de onda (λ) y el espesor (d) de láminas delgadas a partir del análisis de los espectros de reflectancia y transmitancia, son métodos que analizan un rango de longitudes de onda. La fiabilidad de los parámetros ópticos determinados por distintos métodos ha sido analizada en diversos estudios comparativos³¹³²³³³⁴, en los que, en general, se concluye que el método más adecuado debe elegirse en función de las propiedades de la muestra y las magnitudes que se pueden medir.

Generalmente se supone que la radiación incide perpendicularmente sobre el sistema lámina-sustrato. Consideramos la lámina homogénea, isótropa y plano-paralela. El sustrato se considera transparente, con espesor conocido y de varios órdenes de magnitud mayor que el de la lámina y con propiedades ópticas conocidas.

Las principales ventajas de la determinación de los parámetros ópticos de láminas delgadas a partir de espectros de transmitancia y reflectancia, son la rapidez y el ser métodos no destructivos. La fiabilidad de los resultados depende de una elección adecuada del modelo para definir el problema y de la eliminación de errores sistemáticos en las medidas espectrofotométricas empleadas.

3.3.5.1 *Métodos de análisis de longitudes de onda por separado.*

Mediante un espectrofotómetro se pueden obtener tres magnitudes para un sistema lámina-sustrato y son: transmitancia (T), reflectancia (R) y reflectancia trasera (R'). Cada una de esas magnitudes es función de: la longitud de onda, parámetros ópticos y espesor tanto de la lámina como del sustrato. Si suponemos conocidas las propiedades del sustrato y se determina el espesor de la lámina mediante una medida independiente, es posible plantear un sistema de ecuaciones con dos incógnitas, los parámetros ópticos (n, k) de la lámina para cada longitud de onda, a partir de la medida de dos de las magnitudes ($T_{exp}, R_{exp}, R'_{exp}$).

$$T_{exp}(\lambda) - T(n, k) = 0 ; R_{exp}(\lambda) - R(n, k) = 0 \quad (3.36)$$

Este método se aplica a medidas de transmitancia y reflectancia a incidencia normal por la cara recubierta del sustrato. La resolución del sistema de ecuaciones se realiza mediante un proceso iterativo en los que se minimiza una función de mérito que incluye la diferencia entre las magnitudes experimentales y las calculadas (mínimos cuadrados o Chi-cuadrado). En algunos casos no se encuentra ninguna solución del sistema de ecuaciones para un par de valores experimentales; este comportamiento se debe habitualmente a errores experimentales, especialmente en la reflectancia, y a imperfecciones de la muestra. En otros casos se obtienen soluciones múltiples para un mismo par de valores experimentales, con constantes ópticas físicamente razonables. En este caso es necesario desarrollar algún método para definir la solución correcta.

Bueno y colaboradores³⁵ proponen la utilización de un modelo más realista, en el que se considera un sustrato finito, el ángulo de incidencia experimental del haz en las medidas de reflectancia y transmitancia y la implementación de un parámetro que reproduzca la pérdida

parcial de fase debida a inhomogeneidad laterales en la muestra. Otra posibilidad, propuesta por Hernández-Rojas y colaboradores³⁶, es introducir en el modelo un parámetro empírico que reúna el efecto de la rugosidad y la inhomogeneidad morfológica y composicional de la lámina.

La principal ventaja de estos métodos de determinación de parámetros ópticos es que se pueden aplicar con láminas de bajo espesor, puesto que no se basan en la utilización de los extremos de interferencia. Sus principales desventajas son la dificultad de encontrar una solución adecuada y la necesidad de un valor independiente del espesor de la lámina

3.3.5.2 Métodos que analizan un rango de longitudes de onda.

Los métodos que analizan un rango de longitudes de onda son numerosos, en general requieren la presencia de extremos de interferencia en el rango de transparencia de las muestras; aunque algunos autores^{37,38} utilizan básicamente la información obtenida a partir de los máximos y mínimos de transmitancia y/o reflectancia. En conclusión estos métodos requieren un tratamiento más concreto del problema para obtener resultados satisfactorios.

En este grupo de métodos se destaca el basado en las envolventes de los espectros que recoge las ecuaciones básicas para obtener n , k y d en primera aproximación a partir de los extremos de interferencia. También destacamos el método de síntesis inversa, que empleamos en esta memoria, el cual se basa en el ajuste de los espectros de reflectancia y/o transmitancia mediante relaciones de dispersión para los parámetros ópticos de n y k , puede utilizarse para láminas con menor espesor.

3.3.6 Síntesis inversa o ajuste de espectros mediante formulas de dispersión para n y k .

Este método consiste en simular el espectro de la magnitud medida experimentalmente (T , R , R') con unos valores iniciales de los parámetros ópticos y el espesor de la lámina, suponiendo conocidas las propiedades ópticas y el espesor del sustrato experimental. Este espectro simulado ($F_{sim}(\lambda)$), se compara con el experimental ($F_{exp}(\lambda)$) y se minimiza una función (Error cuadrático medio o Chi-cuadrado) en la que intervenga $F_{sim}(\lambda) - F_{exp}(\lambda)$ para todo el rango de longitudes de onda considerado, variando los parámetros ópticos y el espesor de la lámina. Este método contiene una serie de pasos, que nos llevarán a la consecución de los parámetros ópticos adecuados. Los pasos a seguir son:

3.3.6.1 Determinación de parámetros ópticos del sustrato.

Para aplicar el ajuste de espectros mediante funciones de dispersión, se deben conocer previamente los parámetros ópticos y el espesor del sustrato utilizado. Para nuestra memoria utilizamos un sustrato ajustando sus propiedades ópticas con la herramienta OPTICA a partir de medidas experimentales. El sustrato es un vidrio con un espesor de 1.5mm. Las simulaciones de las constantes ópticas del sustrato las podemos observar en el capítulo de resultados de esta memoria (sección 5.1).

3.3.6.2 *Parámetros ópticos y espesor en primera aproximación.*

Cuando se trabaja con un material conocido por estudios experimentales previos, se pueden considerar en primera aproximación los valores de los parámetros ópticos obtenidos en dichos estudios y el espesor final indicado por el medidor de cristal de cuarzo del sistema de evaporación.

3.3.6.3 *Elección de las funciones de dispersión para n y k*

Ahora debemos definir la forma funcional más adecuada para representar los valores de los parámetros ópticos obtenidos en la primera aproximación en función de la longitud de onda o en función de la energía del fotón (E). Las funciones de ajuste deben ser adecuadas desde el punto de vista matemático y desde el punto de vista físico para el material estudiado. Estas funciones las estudiaremos en detalle en la sección 3.1.7 de esta memoria.

3.3.6.4 *Coefficientes de las funciones de dispersión.*

Los valores de n y k determinados para un rango de longitudes de onda o energía del fotón, se deben ajustar a las funciones de dispersión elegidas y el resultado de este ajuste se obtienen los coeficientes A, B, C, D, E para el modelo Wemple DiDomenico y los parámetros A_i , B_i , C_i , $n(\infty)$ y E_g para el modelo Forouhi-Bloomer. También como resultado de este ajuste obtenemos valores de espesor de la lámina, desacoplo y rugosidad.

3.3.6.5 *Optimización de los coeficientes y parámetros ópticos de las funciones de dispersión*

Se simula un espectro de transmitancia y reflectancia a partir del espesor y los valores iniciales de n y k determinados como primera aproximación. A partir de este cálculo o espectro simulado se inicia un proceso de optimización de los coeficientes o parámetros ópticos de las funciones elegidas para n y k como también valores de espesor de lámina, desacoplo y rugosidad.

En esta memoria se realiza la optimización por el test de χ^2 y minimización de función de error, variando los parámetros citados, para obtener una función óptica simulada (transmitancia y reflectancia), lo más próxima posible a las funciones experimentales respectivas. Utilizamos la siguiente función:

$$S \equiv \sum_{i=1}^N \frac{\left(\frac{Y[i]-Y[i]_m}{\sigma}\right)^2}{w[i]} \quad (3.37)$$

donde el numerador de la sumatoria de cuadrado de errores (funciones ópticas calculadas – funciones ópticas medidas), se divide por una constante ($\sigma=0,065$), donde su significado es la precisión de cada medida; el denominador de la sumatoria $w[i]$ es un valor modulado de la resta entre el número total de medidas y el número de parámetros ajustados. Este valor S , que está

dentro de una función a la cual se le asigna el nombre de *error* y va ser nuestra función a minimizar^{xi}.

Cuando la función alcanza un mínimo, se obtienen los coeficientes o parámetros de las funciones de ajuste, espesor, desacoplo, rugosidad de la capa optimizados. Estos valores constituyen el resultado de la caracterización óptica de la lámina estudiada.

Para valorar el resultado, se calcula el espectro de transmitancia o reflectancia (simulado) y se compara con el espectro experimental. En general se observan diferencias entre ambos espectros que se deben a errores de medida y a desviaciones de la lámina experimental respecto de las hipótesis del método. Estas desviaciones pueden ser inhomogeneidades en la lámina o bandas de absorción debida a impurezas. Una ventaja importante del ajuste de espectros mediante relaciones (funciones) de dispersión es que, en general, solo necesitamos un espectro experimental, que además puede ser el de transmitancia, para ser más preciso y más fácil de medir. También podemos caracterizar láminas con espesores bajos, siempre que tengamos una primera estimación de los parámetros ópticos, aunque los resultados en estos casos son menos exactos que para espectros con extremos de interferencia, por que los espectros presentan variaciones más suaves con la longitud de onda.

Como desventaja para este método, podemos decir que necesitamos elegir un sustrato con índice de refracción adecuado, como en el caso de las envolventes, y que se debe elegir una función de ajuste adecuada para el rango de longitudes de onda analizado.

3.3.7 Funciones de dispersión.

Como se comentó con anterioridad, estas funciones se utilizan para representar la dependencia de los parámetros ópticos con la longitud de onda o energía del fotón respectivamente.

3.3.7.1 Modelo de Wemple DiDomenico para n en la región transparente.

Wemple y DiDomenico³⁹⁴⁰, proponen un modelo en el que la dependencia de n con la energía viene dada por la ecuación:

$$n^2(E) = 1 + \frac{E_0 E_d}{E_0^2 - E^2} \quad (3.38)$$

Que en función de la longitud de onda, se puede expresar de la forma como se muestra en la ecuación (3.39) con la longitud de onda en nanómetros y $E_0 = 1240/(-B)^{1/2}$ y $E_d = E_0 A$ en eV.

$$n^2(\lambda) = 1 + \frac{A}{1 + \frac{B}{\lambda^2}} \quad (3.39)$$

El rango de validez de estas expresiones para el índice de refracción está limitado al rango de transparencia del material, para una amplia variedad de materiales. El valor fundamental de este

^{xi} La expresión que utiliza el simulador OPTICA, la encontramos en la sección 4.3.4, expresión 4.1.

modelo se basa en la relación de los parámetros que definen $n(E)$ con parámetros estructurales del material.

E_0 es la energía del oscilador efectivo y representa la anchura promedio de la banda prohibida. E_d es la energía de dispersión, cuya utilidad es esencialmente empírica, ya que se ha comprobado que obedece una relación muy simple para numerosos materiales cristalinos amorfos, que la definen en términos del número de coordinación (N_c), la valencia del anión (N_a) y el número equivalente de electrones por anión (N_e): $E_d = \beta N_c Z_a N_e$. El parámetro β toma un valor de 0,37+/-0,04 eV para materiales covalentes y un valor de 0,26+/-0,03eV en materiales iónicos.

En el análisis de la lámina delgada con este modelo debe tenerse en cuenta que los defectos estructurales hacen disminuir el valor de E_d con respecto al valor en volumen tanto por las diferencias de densidad, como por reducción del número de coordinación debida a la presencia de enlaces libres.

3.3.7.2 Modelo empírico para k en la región transparente.

En la región de transparencia el coeficiente de extinción es despreciable ($k = 0$) y crece conforme disminuye la longitud de onda y se aproxima al rango de absorción media. El coeficiente de extinción^{xii} puede expresarse mediante la exponencial decreciente, en el rango del espectro correspondiente a la zona I y el rango de alta longitud de onda de la zona II figura 3.14.

$$k(\lambda) = C e^{-\frac{(\lambda-D)}{E}} \quad (3.40)$$

3.3.7.3 Modelo Urbach para k en la región de absorción.

Existe una región del espectro que se caracteriza por valores de coeficientes de absorción entre $5 \times 10^2 < \alpha < 10^4 \text{ cm}^{-2}$, aproximadamente en la que α sigue una dependencia exponencial.

$$\alpha(E) = \alpha_0 e^{\frac{E}{E_s}} \quad (3.41)$$

Que equivale a una dependencia del coeficiente de extinción en función de la longitud de onda de la forma que se muestra en la ecuación (3.41), donde la longitud de onda se expresa en nanómetros, $\alpha_0 = 4 \pi C$ en cm^{-1} y $E_s = 1240/D$ en eV.

3.3.7.4 Modelo de Tauc para k en la región de alta absorción.

En la región de absorción alta, en la que el coeficiente de absorción es mayor que 10^4 cm^{-1} , se considera dependencia de α con la energía que corresponde al modelo de Tauc.

$$\alpha(E) = B \frac{(E - E_g^{opt})^2}{E} \quad (3.42)$$

^{xii} Para el simulador utilizado, el modelo WD comprende estados dos funciones para n y k , como lo podemos encontrar en la sección 4.3.4, expresión 4.1

Que equivale a la ecuación (3.43) donde la longitud de onda viene expresada en nanómetros, $E_g = 1240/D$ en eV y $B = (4\pi \cdot 10^7 C)/1240$ en $\text{eV}^{-1} \text{cm}^{-1}$.

$$k(\lambda) = C \left[\frac{1-\lambda}{D} \right]^2 \quad (3.43)$$

3.3.7.5 Modelo Forouhi-Bloomer

Formulación para el índice complejo de refracción, $N(E) = n(E) - ik(E)$ como función de la energía del fotón E , tanto para semiconductores cristalinos y amorfos, como para dieléctricos. El coeficiente de extinción $k(E)$, se deduce del modelo de un electrón con ciclo de vida finito para un estado de excitación; el índice de refracción $n(E)$ es derivado de la relación de Kramers-Kronig como de la transformada de Hilbert de $k(E)$.

Las propiedades ópticas de algún medio se pueden describir por el índice de refracción complejo, mencionado con anterioridad o por la función dieléctrica compleja $\epsilon = \epsilon_1 - i\epsilon_2$ donde $\epsilon = N^2$, de modo que $\epsilon_1 = n^2 - k^2$ y $\epsilon_2 = 2nk$. Las constantes k y ϵ_2 son relacionadas con el coeficiente de absorción $\alpha = 2wk/c$. Los valores de las anteriores constantes ópticas dependen de la energía del fotón E .

El principio de causalidad⁴¹, conduce a la relación fundamental entre la parte real (n) y la parte imaginaria de (k) del índice de refracción complejo $N(E)$, relación que se conoce como Kramers-Kronig, por tanto cuando k es una función de E , $n(E)$ podría ser determinada. Para este modelo se deduce que el valor de $n(E)$ es mayor a uno cuando la energía del fotón tiende al infinito, esto va en contraste con la teoría clásica de dispersión donde se dice que $n(\infty) = 1$.

La formulación de este modelo, se inició con el estudio de semiconductores amorfos, donde las formulas de este son base para la formulación de semiconductores cristalinos y dieléctricos. En primera instancia se deduce la expresión de coeficiente de absorción $\alpha(w)$, considerando la transición del electrón entre dos bandas de energía debido a la absorción de un fotón, eso nos da que la absorción queda definida por la ecuación (3.44).

$$\alpha(w) = \frac{\Phi \Theta}{I_0} \quad (3.44)$$

Donde (w) es la energía absorbida en un rango de frecuencias de w a $w+dw$ por unidad de tiempo; Θ es el número de transiciones por unidad de volumen en una capa de espesor Δx y I_0 es la intensidad de incidencia del fotón. Asumiendo que el estado de excitación al cual el electrón se transfiere, tiene un ciclo de vida finito (τ).

En semiconductores amorfos las bandas de valencia y de conducción se derivan de una ampliación de la unión σ y de la desunión σ^* . Del estado de las orbitas moleculares cuando el sólido está formado⁴², se asume que el máximo valor de (w) es cuando la energía del fotón (E) es $\hbar w = E_{\sigma^*} - E_{\sigma}$, donde el primer valor es el valor de energía del estado final y el segundo valor es el estado de energía inicial. Después de un tratamiento matemático de reemplazo de ecuaciones para calcular el valor de $k(E)$, en función de unos parámetros A, B, C ⁴³; tenemos como resultado la expresión (3.45).

$$k(E) = \frac{A}{E^2 - BE + C} (E - E_g)^2 \quad (3.45)$$

Donde los parámetros A, B, C ; están dados por las siguientes expresiones:

$$A = \text{const} \times |\langle \sigma^* | \times | \sigma \rangle|^2 \gamma \quad (3.46)$$

$$B = 2(E_{\sigma^*} - E_{\sigma}) \quad (3.47)$$

$$C = (E_{\sigma^*} - E_{\sigma})^2 + \frac{\hbar^2 \gamma^2}{4} \quad (3.48)$$

Como se mencionó con anterioridad, cuando k está en función de E , podemos encontrar el valor de $n(E)$, esto lo llevamos a cabo por el principio de causalidad por medio de la relación Kramers-Kronig⁴¹, si este principio se satisface, $N(E)$ sería analítica en la parte más baja de la mitad del plano. Como resultado de esto $n(E)$ se determinaría por la transformada de Hilbert de $k(E)$ ⁴³, como resultado tenemos la expresión (3.49).

$$n(E) - n(\infty) = \frac{B_0 E + C_0}{E^2 - BE + C} \quad (3.49)$$

Donde los valores de B_0 y C_0 están dados por las siguientes expresiones:

$$B_0 = \frac{A}{Q} \left[-\frac{B^2}{2} + E_g B - E_g^2 + C \right] \quad (3.50)$$

$$C_0 = \frac{A}{Q} \left[(E_g^2 + C) \frac{B}{2} - 2E_g C \right] \quad (3.51)$$

$$Q = \frac{1}{2} (4C - B^2)^{1/2} \quad (3.52)$$

Las formulaciones anteriores son utilizadas para semiconductores amorfos. En los semiconductores cristalinos y dieléctricos la estructura en $k(E)$ contiene una estructura de varios “picos” en la gráfica de este parámetro con respecto a su espectro, a diferencia de los semiconductores amorfos los cuales sólo cuentan con un “pico” en su espectro para el parámetro k .

Se asume que un pico en el espectro k de un semiconductor cristalino y un dieléctrico, ocurre cuando la energía absorbida en una transición, (w), tiene un valor máximo que viene dado por:

$$\hbar w \approx E_c(k_{crit}) - E_v(k_{crit}) \quad (3.53)$$

Cuando $k=k_{crit}$, entonces $\nabla_k E_{cv}(k_{crit})=0$, está condición se cumple, para muchos puntos, líneas y planos simétricos en la zona de Brillouin. El análisis de simetría de la zona de estos materiales debe determinar que estados específicos están implicados en las transiciones que producen los “picos” en $k(E)$.

Tomamos (w) como la sumatorias de términos, donde el número de términos es el número de “picos” in $k(E)$. El coeficiente de extinción para materiales cristalinos

$$k(E) = \left[\sum_{i=1}^q \frac{A_i}{E^2 - B_i E + C_i} \right] (E - E_g)^2 \quad (3.54)$$

Donde $q=entero$ y los parámetros A_i, B_i, C_i vienen dados por las siguientes expresiones.

$$A_i = const \times \left| \langle \psi_{crit}^c | \times | \psi_{crit}^v \rangle \right|_i^2 \gamma_i \quad (3.55)$$

$$B_i = 2[E_c(k_{crit}) - E_v(k_{crit})]_i \quad (3.56)$$

$$C_i = [E_c(k_{crit}) - E_v(k_{crit})]_i^2 + \frac{\hbar^2 \gamma_i^2}{4} \quad (3.57)$$

En la ecuación (3.55) ψ denota el estado del electrón en la banda de valencia o conducción cuando $k=k_{crit}$.

El índice de refracción $n(E)$, se determina de la misma manera que para semiconductores amorfos. Se lleva a cabo el análisis de Kramers-Kronig, si satisface este principio se aplica la transformada de Hilbert al valor de $k(E)$. El valor de $n(E)$ estaría dado por:

$$n(E) = n(\infty) + \sum_{i=1}^q \frac{B_{0i} E + C_{0i}}{E^2 - B_i E + C_i} \quad (3.58)$$

Donde $q=entero$ y los coeficientes, B_{0i}, C_{0i}, Q_0 vienen dados por las siguientes expresiones.

$$B_{0i} = \frac{A_i}{Q_i} \left[-\frac{B_i^2}{2} + E_g B_i - E_g^2 + C_i \right] \quad (3.59)$$

$$C_{0i} = \frac{A_i}{Q_i} \left[(E_g^2 + C_i) \frac{B_i}{2} - 2E_g C_i \right] \quad (3.60)$$

$$Q_i = \frac{1}{2} (4C_i - B_i^2)^{1/2} \quad (3.61)$$

Tanto para semiconductores amorfos como cristalinos, no se asume que $n(\infty)=1$, en contraste con la teoría de dispersión clásica, de hecho Toll⁴⁴ propone que $n(\infty)=1+ca$, donde c representa la velocidad de la luz y a una constante positiva, cuando las condiciones de causalidad así como la condición de $k(E) \rightarrow 0$ como $E \rightarrow \infty$ se satisfacen.

Las expresiones resultantes de este modelo se ajustan de manera excelente a datos experimentales de parámetros ópticos medidos, para gran número de materiales en un amplio rango de espectro de energía del fotón. Otro aspecto a resaltar es la posibilidad de expresar una función óptica, en este caso la reflectancia, en función de las ecuaciones de $k(E)$ y $n(E)$.

3.3.8 Caracterización espectrofotométrica de sistemas multicapa

Las medidas de la transmitancia y reflectancia de los sistemas multicapa permiten obtener dos tipos de información: Por un lado, se pueden determinar los parámetros ópticos y el espesor de las capas que forman el sistema y por otro, definimos la respuesta óptica del sistema y la comparamos con la respuesta teórica para establecer el cumplimiento de las especificaciones de diseño. En nuestra memoria profundizaremos en la primera determinación.

3.3.8.1 *Determinación de parámetros ópticos y espesor de capa.*

La caracterización óptica de sistemas multicapa es una herramienta muy importante en el desarrollo de dispositivos con aplicaciones fotovoltaicas. El método empleado para obtener los parámetros ópticos en sistemas multicapa es similar al expuesto anteriormente para una única lámina, en donde el procedimiento es el siguiente:

-Se consideran las propiedades ópticas de los materiales utilizando modelos de funciones de dispersión (Wemple-DiDomenico, Forouhi-Bloomer) para el índice de refracción (n) y coeficiente de extinción (k).

-Se considera como valor inicial para el espesor y los coeficientes de las funciones de dispersión el correspondiente al diseño teórico. La misma función define los parámetros ópticos de todas las capas del mismo material dentro del sistema.

-Se obtienen las funciones de dispersión de los materiales de los espesores de las capas que proporcionen un espectro de transmitancia o reflectancia simulado más próximo al experimental.

Para abordar la caracterización de sistemas multicapa, es fundamental el estudio previo de las propiedades de los materiales que intervienen en los sistemas, en forma de lámina delgada. Como resultado de este estudio se obtiene una estimación realista de los parámetros ópticos de los materiales involucrados, que proporcionan valores iniciales adecuados para los coeficientes de las funciones de dispersión.

Para que los resultados de la caracterización óptica de un recubrimiento multicapa sean fiables, se debe tener en cuenta que el espectro de transmitancia del sistema debe tener una estructura de picos para que su forma sea más sensible a los cambios de espesor ópticos de las capas. Otro aspecto que debemos tener en cuenta es que el número de parámetros a ajustar en la caracterización óptica no sea excesivo. De otra forma se puede producir errores significativos en los valores estimados para estos parámetros que se compensan entre sí, a pesar de que resulte un ajuste aparentemente bueno del espectro experimental.

Para sistemas con un alto número de capas y con una escasa estructura de picos en su espectro de transmitancia, se requiere un estudio por bloques de capas separados, depositados en el mismo proceso. La caracterización óptica de estos subsistemas proporciona resultados más fiables, que se utilizarán posteriormente para definir propiedades ópticas del sistema completo.

II. Metodología

4 Materiales y métodos.

4.1 Obtención de la información.

La obtención de la información que es base de este proyecto, se obtuvo de las siguientes fuentes:

- **Documentación institucional de investigación del CIEMAT-URJC:** Numerosa información bibliográfica (Tesis doctorales, textos⁴⁵, publicaciones – Biblioteca CIEMAT-URJC) sobre temas básicos de fotovoltaica, estado sólido de los semiconductores, óptica de múltiples capas; como también información particular de los procedimientos de los cálculos de magnitudes y constantes ópticas.
- **Publicaciones de artículos de investigación del departamento de fotovoltaica del CIEMAT:** Diversas publicaciones de investigadores del CIEMAT sobre algunos ejemplos de caracterización y simulaciones de nuevos materiales semiconductores para láminas delgadas en aplicaciones en fotovoltaica.
- **Mediciones con espectroscopios del laboratorio de fotovoltaica del CIEMAT:** Uso de los espectroscopios Perkin Elmer Lambda 9 y AvaSpec-USB2, para obtención de datos sobre mediciones fotométricas experimentales de láminas de nuevos materiales semiconductores como también células comerciales en aplicaciones fotovoltaicas.
- **Simulador de caracterización ópticas de materiales del laboratorio de fotovoltaica del CIEMAT:** Uso y desarrollo del simulador OPTICA, basado en subrutinas en lenguaje Matlab, para obtener información de caracterización de: láminas de nuevos materiales semiconductores (Capa ventana, capa absorbente), como también células comerciales en aplicaciones en fotovoltaica.
- **Publicaciones de organizaciones sobre aplicaciones de la energía fotovoltaica:** Diversas publicaciones sobre aplicación de energía fotovoltaica en zonas rurales y en sistemas de telecomunicaciones; Energías renovables y cooperación al desarrollo. aislados (Publicaciones: Ingeniería sin fronteras, NAP – Universidad Politécnica de Madrid)
- **Documentación del Programa de Naciones Unidas para el Desarrollo:** Información sobre el papel que toma el acceso a la energía eléctrica en el desarrollo humano de las sociedades, también la importancia de las energías sostenibles en cumplimiento de los objetivos del desarrollo del milenio.

4.2 Mediciones de magnitudes ópticas.

4.2.1 Espectrofotómetro Perkin-Elmer lambda 9³⁰.

Las mediciones de magnitudes ópticas reflectancia (R), transmitancia (T) y reflectancia trasera (Rt) que se han realizado para caracterizar láminas semiconductoras como una célula comercial de energía fotovoltaica para el desarrollo de este proyecto, se han llevado a cabo por medio del espectrofotómetro Perkin – Elmer Lambda 9. Las principales características de este dispositivo son las que se muestran en la tabla 4.1

Tabla 4.1- Principales características del espectrofotómetro Perkin Elmer Lambda 9.

Característica	Descripción
<i>Sistema de medida</i>	Dispersivo de doble haz con esfera integradora, doble monocromador
<i>Rango de medida</i>	$\lambda = 250\text{nm} - 2500\text{nm}$
<i>Fuentes</i>	UV: Deuterio VIS/NIR: W halógena
<i>Detectores</i>	UV/VIS: Fotomultiplicador NIR: PbS
<i>Rendija</i>	UV/VIS: fija(0.05 – 5nm) NIR: entre 0.2 y 20nm.

Este dispositivo también cuenta con una cavidad negra para evitar reflexiones detrás del sustrato. Las medidas de calibración se hacen rutinariamente para ambas configuraciones (reflectancia y transmitancia). Las medidas de transmitancia se realizan con una incidencia normal (0°), mientras que la reflectancia se mide con un ángulo de 7°.



Figura 4.1 - Imagen del espectrofotómetro Perkin Elmer Lambda 9, utilizado en las mediciones de las magnitudes ópticas para el proyecto.

Como se mencionó, el espectrofotómetro utilizado cuenta con un sistema de medidas dispersivo, el esquema interno de estos dispositivos de medida es el que se muestra en la figura 4.2.

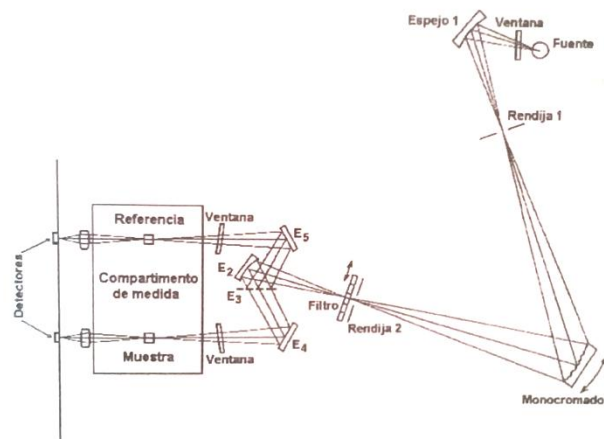
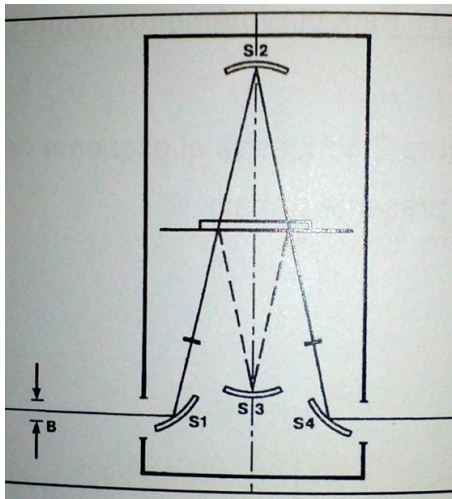


Figura 4.2 - Esquema óptico de un espectrofotómetro dispersivo de doble haz del tipo empleado en el proyecto. Figura extraída de la tesis doctoral: Diseño, Fabricación y caracterización del filtro paso-banda estrechos para infrarrojo.

En este dispositivo la luz emitida por la lámpara es dirigida mediante un espejo, tras atravesar una rendija de anchura definida, llega al monocromador que separa las distintas longitudes de onda presentes en el haz inicial. La radiación resultante se dirige, también mediante espejos y a través de otra rendija y un filtro, hacia el compartimiento de medida. Antes de entrar en el compartimiento de medida, el haz se separa en dos haces paralelos, haz de referencia y haz de muestra, focalizados en el punto de medida. El camino de ambos haces termina en los detectores. Cuando se sitúa una muestra en el camino del haz de la muestra, el cociente de señal de los dos haces proporciona la transmitancia de la muestra respecto al haz de referencia.

a)



b)

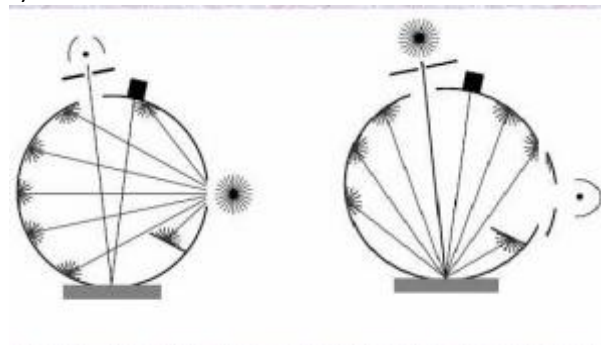


Figura 4.3 - a) Esquema para medida de reflectancia absoluta en configuración V-W. Figura extraída de la tesis doctoral: Diseño, Fabricación y caracterización del filtro paso-banda estrechos para infrarrojo. b) Esquemas para medidas de reflectancia total por medio de una esfera integradora. Figura extraída de www.google.es.

Para obtener espectros de reflectancia absoluta de las muestras, el espectroscopio cuenta con dos opciones, que son las que se representan en la figura 4.3.

El esquema 4.3a, mide en la configuración V-W por el camino que recorren los haces. En la medida del espectro de una muestra, el haz de referencia describe el mismo camino que le de calibración (V), mientras que el haz de la muestra describe una W al reflejarse dos veces en la superficie de la muestra. Se obtiene así el cuadrado de la reflectancia absoluta de la muestra en función de la longitud de onda. Las medidas de reflectancia no se pueden realizar con incidencia estrictamente normal, aunque el ángulo de incidencia como se comentó antes es lo más pequeño posible (7°).

El esquema 4.3b, Es una esfera integradora; es un elemento empleado en óptica, para sumar todo el flujo radiante reflejado o radiado, por una muestra sin importar la dirección hacia donde refleja o radia. La esfera integradora consiste en un cuerpo esférico con un interior hueco pintado de blanco, con pequeñas aberturas respecto a su tamaño. Las esferas suelen tener pocos centímetros de diámetro, cuando se utilizan para medir reflectancia de una muestra. El principio en que se basa es que después de la enésima reflexión en sus paredes interiores, si las mismas están recubiertas de un material altamente difusor, el flujo radiante reflejado, se uniformiza, por lo que es correcto medir el flujo luminoso que llega a un área pequeña y multiplicarlo proporcionalmente al área total de la esfera, para obtener así el flujo total.

La figura 4.3b, muestra el esquema de dos modos de medir con la esfera integradora. El de la izquierda de la figura, es de iluminación difusa y medición a 0° (Dif/ 0°). A veces es conveniente excluir la componente especular, por lo que no se hace incidir el haz radiante a 0° sino de 6° a 8° . El de la derecha de la figura muestra la configuración inversa (0° /Dif).

La principal ventaja de los espectrofotómetros dispersivos es la fiabilidad de sus medidas de transmitancia y su principal inconveniente es la lentitud para tomar un espectro, al medir cada longitud de onda por separado.

4.2.2 Espectrofotómetro AvaSpec-USB2 de Avantes⁴⁶.

El espectrofotómetro AvaSpec-USB2 de Avantes cuenta con dispositivos de fibra óptica que son: dos lentes colimadoras para medir la Transmitancia y una sonda para medir la Reflectancia; que tras las correspondientes calibraciones, mide espectros de 300 – 1100nm en pocos segundos.



Figura 4.4 - Imagen del espectrofotómetro AvaSpec-USB2, utilizado en las mediciones de las magnitudes ópticas de referencia para el proyecto.

Este dispositivo además cuenta múltiples canales de detección, donde cada uno de ellos maneja diferentes rangos de longitudes de onda; también el tiempo de integración puede ser seleccionado sin pérdida de sincronización entre los diferentes canales. Cuenta con detectores en los rangos UV/VIS y NIR.

Podemos realizar mediciones en tiempo real tanto de Reflectancia como de Transmitancia, sin embargo para medir estas magnitudes ópticas antes tenemos que tomar medidas de patrones de referencia, que se guardaran en el entorno de trabajo por medio del software AvaSoft, que es el que nos proporciona la interfaz gráfica y configuración de nuestro espectrofotómetro.

Las mediciones realizadas con este dispositivo son aceptables y muy rápidas, más sin embargo el rango de medición es un poco limitado y la estructura de fijación de material a medir no es muy fiable; por lo que los datos que tomamos con esta herramienta no los utilizamos para caracterizar nuestros materiales y célula; únicamente los dejamos como referencia, pero esperamos en trabajos futuros poder contar con una estructura de fijación más robusta ya que los resultados pueden mejorar, así como implementar nuevas medidas a distintos ángulos y polarizaciones.

4.3 Herramienta de simulación OPTICA.

4.3.1 Descripción general de OPTICA.

El programa OPTICA es el resultado de una serie de programas de simulación y diseño óptico generados en diferentes aplicaciones prácticas. OPTICA es un programa para simular medidas fotométricas como reflectancia, reflectancia trasera y transmitancia, a partir del diseño de películas delgadas de una o de varias capas de diversos materiales, también permite calcular constantes ópticas, espesor y rugosidad de películas delgadas de una capa o de varias capas a partir de medidas fotométricas directas experimentales como reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera realizadas con un determinado espectrofotómetro.

La herramienta cuenta con la unidad inicial de diseño de películas delgadas, que permite importar índices de refracción de diferentes materiales de un visor de librerías, que adopta el estándar (ESRF) introducido por programas de simulación como FilmStar^{©xiii}; para luego utilizarlos y determinar el número de capas de nuestra película a simular. Esta unidad puede diseñar películas sin límites de capas.

^{xiii} Programa diseñado y desarrollado por la compañía FTG Software Associates.

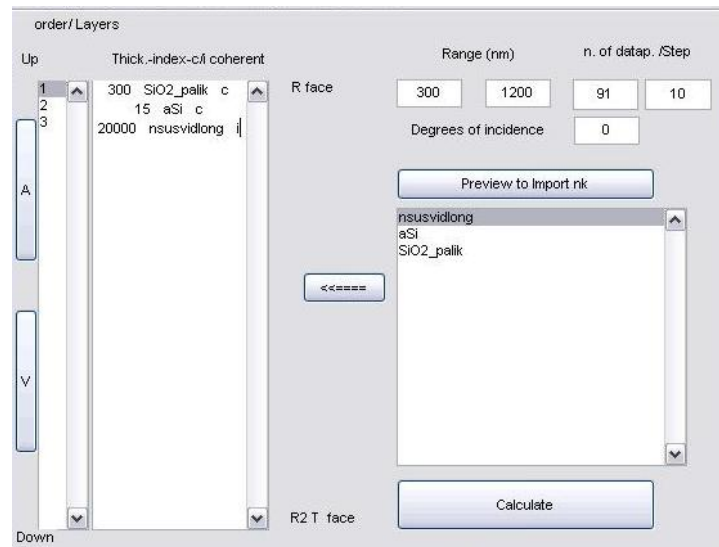


Figura 4.5 - Interfaz de la herramienta OPTICA en la unidad de diseño.

La unidad principal de cálculo de la herramienta, es una unidad de simulación y de obtención de resultados, enfocada en importar: diseños que se han elaborado en la unidad de diseño de la herramienta, medidas fotométricas experimentales realizadas en un espectrofotómetro, índices de refracción de una determinada librería; para luego calcular, ajustar por modelos físicos y representar datos de constantes ópticas o de medidas fotométricas con pequeñas diferencias de grosores y rugosidades.

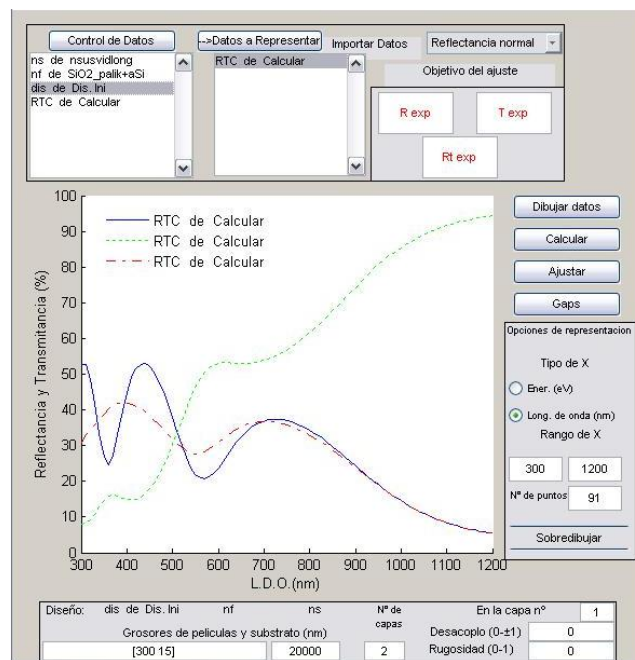


Figura 4.6 - Interfaz de la herramienta OPTICA en la unidad principal de cálculo.

La unidad modelos, que se encuentra dentro de la unidad principal de cálculo, permite seleccionar objetivos de ajuste; los cuales pueden ser medidas experimentales fotométricas o índices de materiales, el objetivo principal de esta unidad es ajustar los parámetros y cálculos iniciales a los objetivos seleccionados por medio de modelos no físicos como el de punto a punto

o con modelos físicos como los de Wemple-DiDomenico o Forouhi-Bloomer, resultado del ajuste obtenemos constantes ópticas; parámetros de diseño como: espesor, desacoplo, rugosidad; magnitudes ópticas ajustadas.

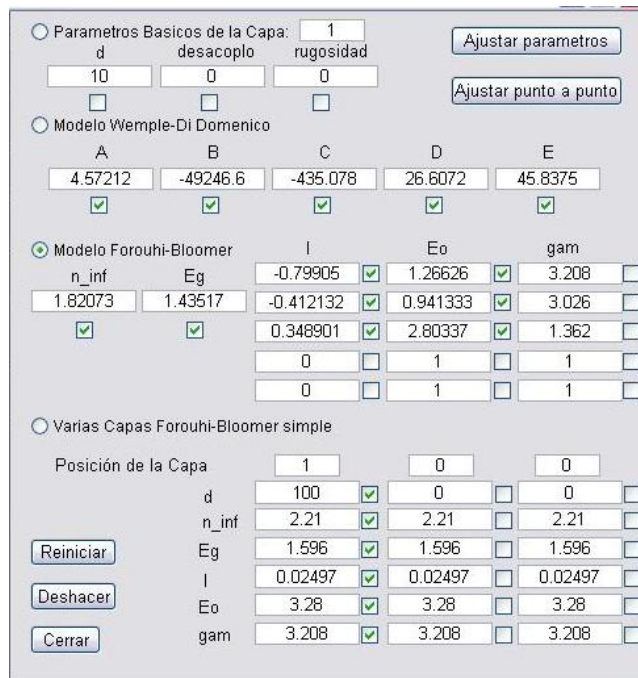


Figura 4.7 - Interfaz de la herramienta OPTICA en la unidad de ajustes por modelos.

Otra unidad importante de nuestra herramienta de simulación OPTICA es Gaps, la cual permite generar valores de absorción (α) para nuestra película, por medio de la representación de gap directos e indirectos en gráficos de Tauc.

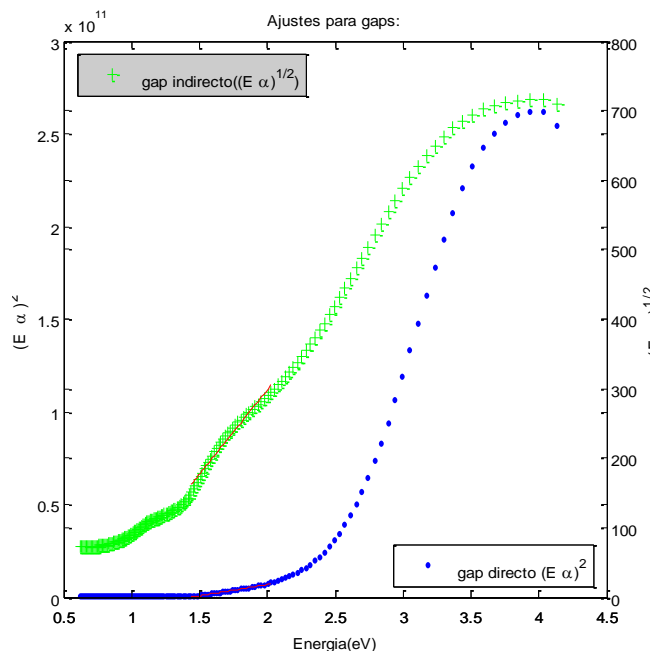


Figura 4.8 - Interfaz de la herramienta OPTICA en la unidad de cálculo de Gap.

Aunque OPTICA es la herramienta más “terminada”, son constantes sus modificaciones ya que el objetivo es “atacar” problemas concretos de los cuales pretendemos encontrar soluciones y por esta razón nuestra vocación es la de no dar por terminado este proyecto. No obstante por esa razón utilizaremos la herramienta para caracterizar películas de varias capas para aplicaciones fotovoltaicas en sistemas de telecomunicaciones.

4.3.2 Determinación de parámetros ópticos y básicos de una capa por medio del programa simulador OPTICA.

El programa OPTICA, cuenta con la posibilidad de caracterización óptica de sistemas o películas de múltiples capas, basándose en varios modelos físicos como no físicos para la determinación de parámetros ópticos, ajustando de una forma tal que los espectros teóricos de transmitancia y reflectancia del sistema sean lo más cercanos a los espectros experimentales de transmitancia y reflectancia.

El procedimiento para determinar los parámetros ópticos es similar al expuesto en el ítem 3.3.8.1, como primer punto consideramos las propiedades ópticas de los materiales por medio de modelos de funciones de dispersión.

Los modelos que utiliza OPTICA, son paramétricos y actúan en un rango de longitud de onda determinado; el simulador básicamente tiene cuatro modelos de ajuste que son:

- Modelo punto a punto, no paramétrico, ejecuta un ajuste en cada longitud de onda, no usa un modelo determinado, pero OPTICA lo tiene en la ventana de modelos con el fin de comparar; produce una solución ruidosa, se puede aplicar algunos criterios del artículo de Bueno para realizar un mejor ajuste.
- Modelo geométrico, se refiere a la estructura geométrica de la muestra, sólo ajusta grosor, rugosidad y desacoplo. La herramienta toma el desacoplo como una pequeña diferencia de grosor entre la medida de reflectancia y transmitancia, la rugosidad es un promediado a varios grosores que simula una capa rugosa, es decir el desacoplo es una variación de grosor y rugosidad son pequeñas oscilaciones dentro del rango de medida. La parte de simulación de OPTICA, utiliza el valor de rugosidad en valor absoluto, por lo que puede aparecer mayor a cero ó menor a cero, indistintamente tras un ajuste libre de su valor.
- Modelo Wemple-DiDomenico, cuenta con funciones de dispersión para el cálculo del índice de refracción (n) y el coeficiente de extinción (k), estas funciones dependen de cinco parámetros (A, B, C,D, E) como lo comentamos en el ítem 3.3.7.1. Este modelo es más “empírico” pues se sustenta en teorías clásicas, sin embargo es de gran ayuda para realizar nuestros primeros ajustes de películas con materiales de los cuales no tenemos mucho conocimiento sobre sus características ópticas.
- Modelo Forouhi-Bloomer contiene muchos parámetros para ajustar. Es un modelo sustentado en teorías cuánticas.

Como segundo punto para determinar los parámetros ópticos del sistema; consideramos los valores iniciales de índices y parámetros para cada modelo, estos valores son los que vienen por defecto en la ventana de modelos de OPTICA, cabe resaltar que el índice inicial proviene de los parámetros iniciales. Esto es para los modelos de Wemple-DiDomenico y Forouhi-Bloomer; en el caso del modelo geométrico los valores iniciales de los índices son los últimos valores calculados con la herramienta. Para los valores iniciales de grosor, desacoplo y rugosidad son los que se encuentran en la ventana de modelos para todos los casos.

Como tercer punto, obtenemos las funciones de dispersión de los materiales a un espesor, grosor y desacoplo ajustado, que proporcionen un espectro de reflectancia o transmitancia simulado muy próximo a el espectro experimental.

Una ventaja adicional en OPTICA es la capacidad de mezclar a voluntad, algunos parámetros de los modelos de materiales, con algunos parámetros geométricos de la muestra en un mismo ajuste.

4.3.3 Implementación de modelos paramétricos en OPTICA.

Esta implementación se realiza por medio de funciones de ajuste para cada modelo, el procedimiento a seguir es el que se muestra en el diagrama de flujo de la figura 4.8. Una función de ajuste para cada modelo tiene tres importantes fases que son:

- *Calculo inicial:* En esta fase, tomamos los valores iniciales de los parámetros que se desean ajustar como por ejemplo: espesor (d), índice de refracción (n), índice de extinción (k), coeficientes por modelos, rugosidad, desacoplo, etc. Para realizar un cálculo inicial del índice de refracción complejo $N(E)$ por medio de una determinada función para cada modelo, este valor servirá como punto de partida para calcular la reflectancia y transmitancia inicial de nuestro sistema y así poder representarlo en un dibujo inicial que servirá como base para un ajuste final.
- *Rutina de minimización:* En esta fase utilizamos una función de error por el modelo seleccionado, la cual se basa en el test de χ^2 o error cuadrático medio; por medio de esta función comparamos los valores de reflectancia y transmitancia teóricos (calculados en la anterior fase para el modelo) y experimentales, esperando que el resultado se encuentre dentro del rango de aceptación de nuestro test. Este valor de test de aceptación lo introducimos en una función de minimización de error por modelo, la cual varía los parámetros iniciales necesarios para que la función de error se minimice al máximo y se encuentre dentro del intervalo de aceptación elegido por el usuario.
- *Calculo final:* La etapa final de ajuste, toma los parámetros finales o ajustados que resultaron de la rutina de minimización, introduce estos parámetros en la función de cálculo del índice de refracción complejo $N(E)$ para el modelo que se selecciono para hacer el ajuste. Como en la fase inicial se calcula los valores de reflectancia y transmitancia en base a los nuevos parámetros ajustados, representamos esos valores en un dibujo final que se representa en conjunto con el dibujo inicial y los valores experimentales.

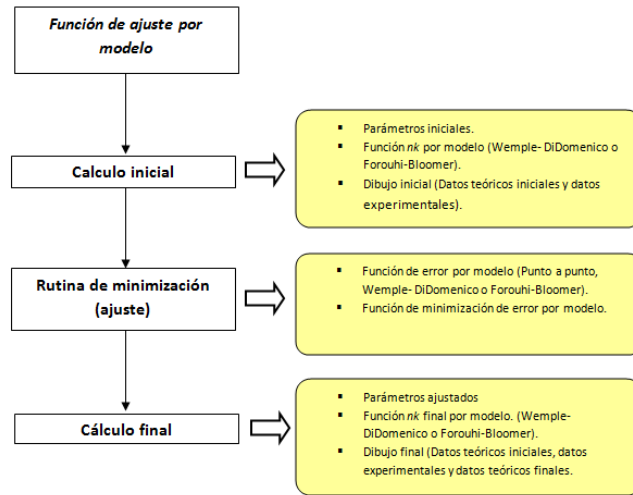


Figura 4.9 - Diagrama de flujo de las funciones utilizadas por el simulador OPTICA para la determinación de parámetros ópticos de una lámina o un sistema multicapa.

4.3.4 Ajuste de parámetros ópticos de los modelos de OPTICA.

El programa como se ha mencionó anteriormente, cuenta con modelos de ajuste de parámetros, en este ítem explicaremos modelo por modelo como ajusta los determinados parámetros para un sistema bajo estudio.

- *Modelo Wemple DiDomenico:* Este modelo se basa en una función de dispersión por medio de la cual calculamos el valor del índice de refracción (n) y el índice de extinción (k) por medio de la estimación de unos coeficientes determinados.

La implementación en OPTICA es similar a la teoría expuesta en el capítulo de función de dispersión, en donde se calcula el índice complejo de refracción $N(\lambda)$ a partir de cinco coeficientes que son: A,B para calcular el índice de refracción $n(\lambda)$ donde el modelo enuncia que son los coeficientes que hacen referencia a la zona transparente de la lámina o película; y los coeficientes C,D,E que se utilizan para calcular el índice de extinción $k(\lambda)$ y estos coeficientes hacen referencia a la zona de absorción de la lámina o película. La fórmula utilizada para el cálculo en OPTICA es la (4.1):

$$N(I) = \sqrt{1 + \frac{A}{1 + \frac{B}{I^2}}} + iCe^{-\frac{(I-D)}{E}} \tag{4.1}$$

Donde $N(I)$ es el índice de refracción complejo en función del parámetro I , parámetro que representa el número de datos o puntos en un rango determinado de longitud de onda (nm). Los parámetros A y B son los coeficientes para el cálculo del índice de refracción y los coeficientes C, D y E son los coeficientes par el cálculo del índice de extinción.

Para el ajuste de los parámetros ópticos utilizando este modelo, se sigue la jerarquía que se representa en el diagrama de flujo de la figura 4.8. En donde primero se realiza un cálculo inicial de los valores de n y k con valores de coeficientes iniciales que son ajustables por el usuario o que se tienen almacenados de otros ajustes, con estos valores de índices y los del sustrato se calcula los espectros de reflectancia, transmitancia iniciales. Luego lanzamos o ejecutamos el ajuste de parámetros seleccionando en este modelo, en esta fase se realiza una función de minimización del valor teórico del espectro RT y el RT experimental, cuando se alcance un valor mínimo la función de minimización de error del modelo ajusta los valores de los cinco coeficientes para calcular el nuevo valor de n y k , por último dibujar el nuevo espectro de reflectancia y transmitancia que debe ser muy parecido al experimental.

- *Modelo Forouhi-Bloomer:* Es un modelo que utiliza funciones de dispersión, donde calculamos el índice de extinción k y el índice de refracción n por medio de la estimación de varios parámetros. La implementación de este modelo en OPTICA se basa en la teoría expuesta en el capítulo de función de dispersión, donde calculamos un índice de refracción complejo $N(E)$ a partir de cinco parámetros, en los que hay dos que siempre aparecen (n_{inf} , E_g) y los otros que van en grupos de tres (I , E_0 , gam), cada grupo es una transición cuántica entre dos estados (ó bandas) que describen un pico de absorción. La I representa la intensidad del fotón, E_0 es la diferencia de energía entre el estado final del electrón y el estado inicial, gam es el inverso del τ (tiempo de excitación del electrón), n_{inf} es el índice de refracción cuando la energía E tiende al infinito y E_g es la energía del gap. La formulas que usa OPTICA para calcular el índice de refracción $n(E)$ y el coeficiente de extinción $k(E)$ son las siguientes:

$$N(E) = n - ik \quad (4.2)$$

Donde k y n están dados por las expresiones (3.54) y (3.58); en OPTICA, los valores de los parámetros de k son los similares a los teóricos, la única diferencia es que se cambia de nomenclatura, ya que al ajustar un coeficiente para este modelo, este valor depende de otros y no estaríamos dando un valor específico de un parámetro.

Los parámetros están dados por las siguientes expresiones:

$$A = I * gam \quad (4.3)$$

$$B = 2 * E_0 \quad (4.4)$$

$$C = \frac{(0,6582119 * gam)^2}{4 + E_0^2} \quad (4.5)$$

Los parámetros se basan en los parámetros que OPTICA ajusta en su ventana modelo, lo cual es más comprensible; pero el resultado no va ser diferente. Como se menciona en la teoría, el software permite ajustar varios valores para los parámetros I , gam , E_0 , ya que

como se mencionó, cada parámetro hace referencia a un valor crítico de k en su espectro, algo que es común en semiconductores cristalinos.

Para el ajuste de los parámetros ópticos, el procedimiento a seguir es similar al del modelo Wemple DiDomenico que se basa en el diagrama de flujo de la figura 4.9.

- *Modelo punto a punto*: Es un modelo que no experimenta todas las fases de manera completa de la función de ajuste del programa, ya que en la fase inicial de cálculo, toma los valores de n y k iniciales por defecto, no los calcula de forma tal que dependa de un modelo físico con un número determinado de coeficientes; como su nombre lo dice, hace el ajuste por cada punto en un rango de longitud de onda.

Ya calculado su espectro de reflectancia o transmitancia, se lleva a cabo la rutina de minimización, calculando la función de error del modelo y minimizando la función con respecto a sus valores experimentales. Para al final realizar un cálculo de espectro con los nuevos parámetros ajustados (n y k) y observar en el dibujo final que los espectros experimentales y teóricos son similares. Este modelo tiene el inconveniente de que nos proporciona soluciones muy “ruidosas” por lo que su uso es más instructivo, se está pensando en aplicar criterios del artículo de Bueno³⁵, para proporcionar soluciones menos “ruidosas”.

- *Modelo geométrico*: Es el modelo utilizado para ajustar los parámetros de espesor, rugosidad y desacoplo; usa el último índice con el que se realizan cálculos antes de ejecutar la opción de ajuste. El desacoplo es una pequeña diferencia de espesor entre la medida de R y T (Cuando utilizamos reflectancia trasera se queda con el grosor de R).

La rugosidad es un promedio a varios espesores que simula una capa rugosa, en conclusión el desacoplo es una variación de espesor y la rugosidad son pequeñas oscilaciones dentro del rango de medidas. El procedimiento de ajuste de parámetros con este modelo, no tiene una función de ajuste específica, lo que se lleva a cabo es que las funciones de minimización de error de los anteriores modelos tienen como parámetros a además de el índice de refracción complejo ($N=n+ik$) ajustar el espesor, desacoplo y rugosidad, donde sus valores iniciales se calculan como se mencionó anteriormente.

Los valores de estos parámetros se ajustan como los coeficientes de los modelos anteriores, de tal manera que el espectro de reflectancia y transmitancia teórico final se aproxime al experimental.

4.4 Láminas de nuevos materiales semiconductores para aplicaciones en energía solar fotovoltaica.

4.4.1 Lámina de sulfuro de Indio.

La lámina de sulfuro de indio (In_2S_3), se presenta como una nueva alternativa de uso como capa “buffer” o ventana en células de películas delgadas para aplicaciones en fotovoltaica; esta clase de láminas se están utilizando como substitutas de las láminas de sulfuro de cadmio (CdS) en células de película delgada de $\text{Cu}(\text{In,Ga})(\text{Se})_2$.

Una ventaja de la lámina de In_2S_3 , es evitar usar elementos tóxicos como el cadmio (Cd) para su fabricación, obteniendo así tecnología fotovoltaica con mayor protección del medio ambiente⁴⁷.

Para la preparación de esta lámina, se utilizan varios métodos, entre ellos: Deposición de baño químico (CBD), este método es interesante por usar tecnología sencilla y barata, ya que presenta los mejores resultados que con otros materiales. Otros métodos de preparación de esta lámina son los que utilizan técnicas en vacío por evaporación térmica (PVD), estos son interesantes por estar en la línea de procesos industriales de células fotovoltaicas.



Figura 4.10 - Imagen de una lámina de In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio, Lámina elaborada por el laboratorio de fotovoltaica del CIEMAT, utilizada en el proceso de caracterización de este proyecto.

En la literatura, las láminas de sulfuro de Indio (In_2S_3) tiene espesores en el rango de 68 a 470nm y gaps entre 2.46 y 2.73 eV⁴⁸; la diferencia de comportamiento óptico entre láminas elaboradas por el proceso CBD y PVD, se debe a diferencia estructural, morfológica y composicional que se observa en la fabricación de láminas por ambos métodos. Las láminas que se fabrican con el método PVD presentan un valor alto del índice de refracción, por lo que se adaptan mejor a reducir la reflectancia total de una típica célula solar como por ejemplo las CIGS.

4.4.2 Lámina Cobre-Indio-Galio-Azufre.

La lámina de Cobre-Indio-Azufre (Cu(In,Ga)S_2) está catalogada como candidata a substituir láminas absorbentes como las de Cu(In,Ga)Se_2 en células de aplicación fotovoltaica, debido a tener un gap directo de 1.55 eV y un coeficiente de absorción alto⁴⁹. El compromiso entre lograr mejores eficiencia teniendo en cuenta consideraciones económicas y medio ambientales, hace que este tipo de materiales tomen un papel importante a la hora de utilizarlo en diseños e implementaciones de dispositivos fotovoltaicos.

Existe una variedad de métodos usados para la fabricación de láminas CuInGaS_2 , incluyendo coevaporación de elementos constituyentes^{50,51}, pulverización catódica^{52,53}, sulfuración de precursores metálicos⁵⁴, vapor de deposición química⁵⁵, pirolisis de pulverización⁵⁶, etc. Estudios recientes se centran en la calidad del proceso de fabricación de láminas de Cu(In,Ga)S_2 y el intento de reducir costos favoreciendo la implementación industrial.

Uno de los principales objetivos es la fabricación de láminas absorbente con poco contenido de cobre (Cu), para no tener la necesidad de utilizar tratamientos tóxicos para eliminar el CuS de la superficie de la lámina.

La técnica de deposición de flujo modulada (MFD⁵⁷) está permitiendo crecimiento de poco cobre en láminas de Cu(In,Ga)S_2 con estructura policristalina CuAu para el ajuste de los flujos de evaporación.



Figura 4.11 - Imagen de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) sobre un sustrato de vidrio, Lámina elaborada por el laboratorio de fotovoltaica del CIEMAT⁵⁸, utilizada en el proceso de caracterización de este proyecto.

Se ha llegado a la conclusión que las láminas de película delgada CuInGaS_2 se fabrican usando la técnica MFD, donde la superficie de la lámina es relativamente suave con una rugosidad de aproximadamente 35nm, con una energía de gap de aproximadamente 1,54eV. La técnica MFD promete ser una técnica de producción de láminas absorbentes (Cu(In,Ga)S_2) que reduce costos, con métodos simples y versátiles.

4.4.3 Célula comercial fotovoltaica CIS.

Contamos con una célula fotovoltaica comercial SUPERCELL CIS, esta célula ha sido diseñada y usada por la industria espacial de Estados Unidos. Ver figura 4.12.



Figura 4.12 - Imagen de una célula comercial fotovoltaica (CIS), utilizada en el proceso de caracterización de este proyecto.

No contamos con información precisas de la estructura de la célula, sin embargo por teoría suponemos que aproximadamente está conformada con los materiales, numero de capas y espesores que se especifican en la figura 4.13⁵⁹.

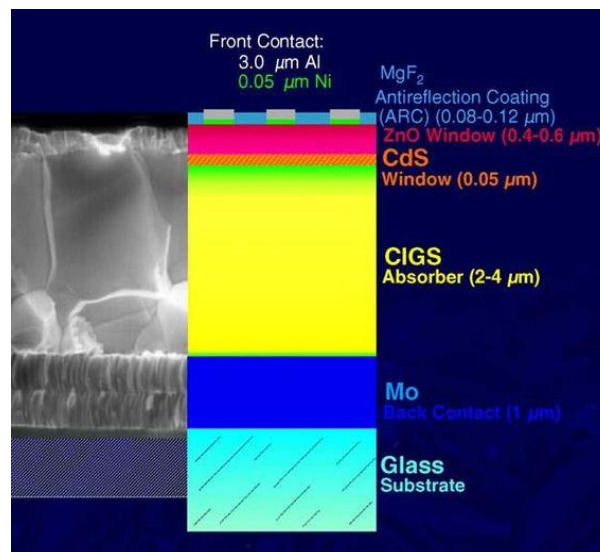


Figura 4.13 - Imagen de la estructura una célula comercial fotovoltaica (CIS), figura extraída de www.google.es.

En la parte experimental esperamos dar una aproximación de la estructura de la célula CIS, ya que contaremos con las mediciones de magnitudes ópticas de la célula; basándonos en ellas podremos precisar del número de capas y características de cada una de ellas.

III. Resultados.

5 Análisis experimental – teórico de láminas para aplicaciones en fotovoltaica.

5.1 Caracterización óptica de una lámina de vidrio como ejemplo de una capa de sustrato.

Como primer paso para el análisis de láminas para aplicaciones en fotovoltaica, debemos tener presente que todas las láminas que no sean flexibles se encuentran depositadas sobre una capa de un sustrato, ya que dichas láminas cuentan con espesores muy delgados y necesitan de una base como soporte. Por esta razón, nuestra primera caracterización es la de un sustrato de vidrio, que se realiza a partir de los espectros de transmitancia y reflectancia medidos en un espectroscopio de Perkin-Elmer Lambda9 en un rango de longitudes de onda entre 300nm y 2500nm. Los parámetros ópticos del sustrato, se estiman en función de un cálculo inicial de los espectros de magnitudes y constantes ópticas; que posteriormente se ajustaran por medio de OPTICA usando diferentes modelos de ajuste de parámetros, a los espectros experimentales. Finalmente se simulan los espectros con los parámetros ópticos estimados.

5.1.1 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de un sustrato de vidrio por medio de OPTICA usando el modelo de ajuste de parámetros punto a punto (PAP).

La figura 5.1 representa los espectros de transmitancia y reflectancia experimentales de un sustrato de vidrio de espesor de 1,5 mm, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo PAP.

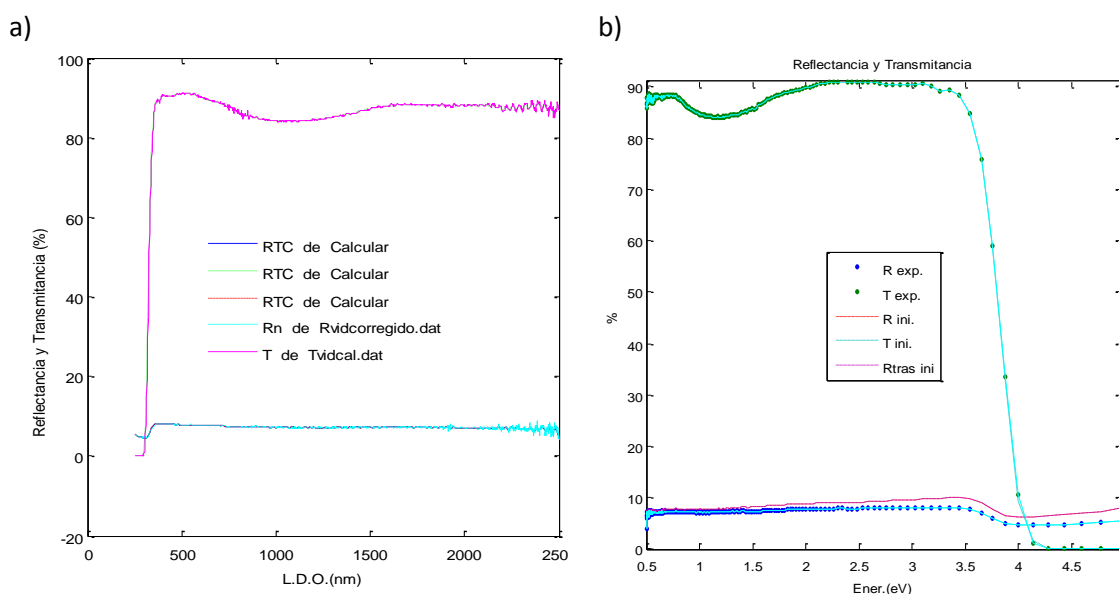


Figura 5.1 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a

la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales. Para este caso la reflectancia trasera inicial ($R_{\text{tras ini}}$) se calcula pero no se usa, debido a que en un sustrato teóricamente la reflectancia trasera es igual a la reflectancia normal.

Los espectros experimentales y simulados de transmitancia y reflectancia que se observan en la figura 5.1 son aproximadamente iguales, en consecuencia deducimos que los parámetros ópticos que se estimaron (índice de refracción n , índice de extinción k) con este modelo, son bastante acertados. La limitante que nos proporciona este modelo como lo comentábamos en capítulos anteriores, es que nos proporciona soluciones muy ruidosas; observando el resultado de los espectros de las magnitudes y constantes ópticas para un sustrato de vidrio, identificamos que para este caso, este modelo es el único que ajusta con mayor precisión el espectro de reflectancia simulado al experimental, ya que con los otros modelos no se logra esto.

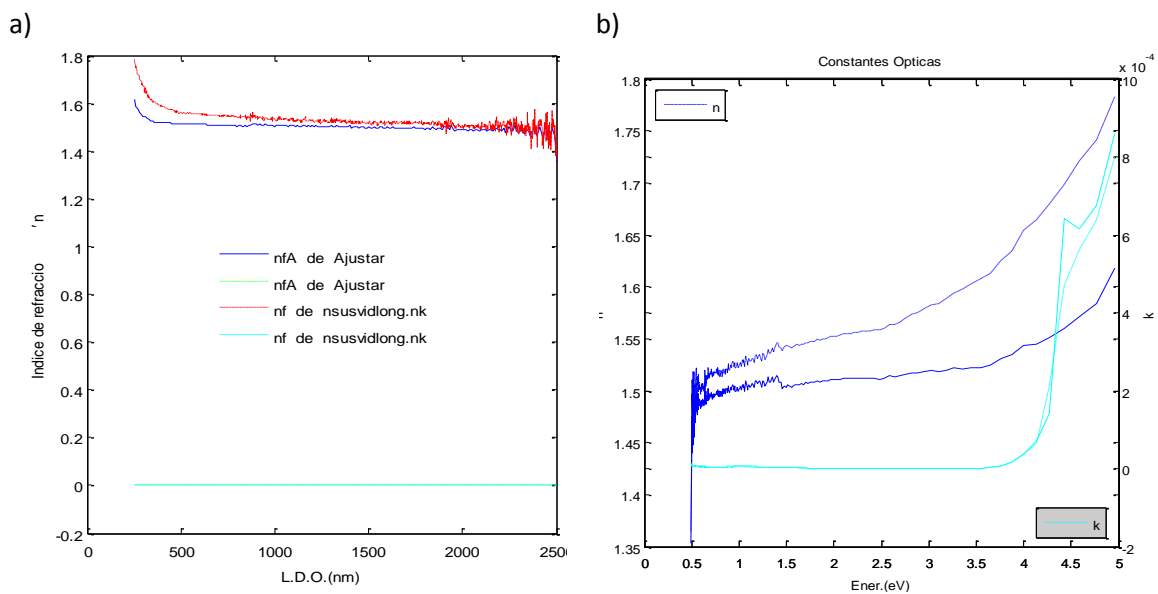


Figura 5.2 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

Sin embargo los extremos de los espectros de las constantes ópticas con respecto a la energía del fotón, presentan resultados ruidosos, debido a la baja señal del aparato de medida (Ruido en el extremo de la parte del espectro infrarrojo 2500nm) en los valores del índice de refracción y coeficiente de extinción como lo podemos observar en la figura 5.2.

Después de analizar todos los resultados de ajuste con todos los modelos de OPTICA, seleccionamos las constantes ópticas que estimamos con este modelo para utilizarla en el posterior análisis experimental - teórico de las demás láminas y célula.

5.1.2 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de un sustrato de vidrio por medio de OPTICA usando el modelo físico de ajuste de parámetros WEMPLE – DIDOMENICO (WD).

La figura 5.3 representa los espectros de transmitancia y reflectancia experimentales de un sustrato de vidrio de espesor de 1,5mm, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo WD.

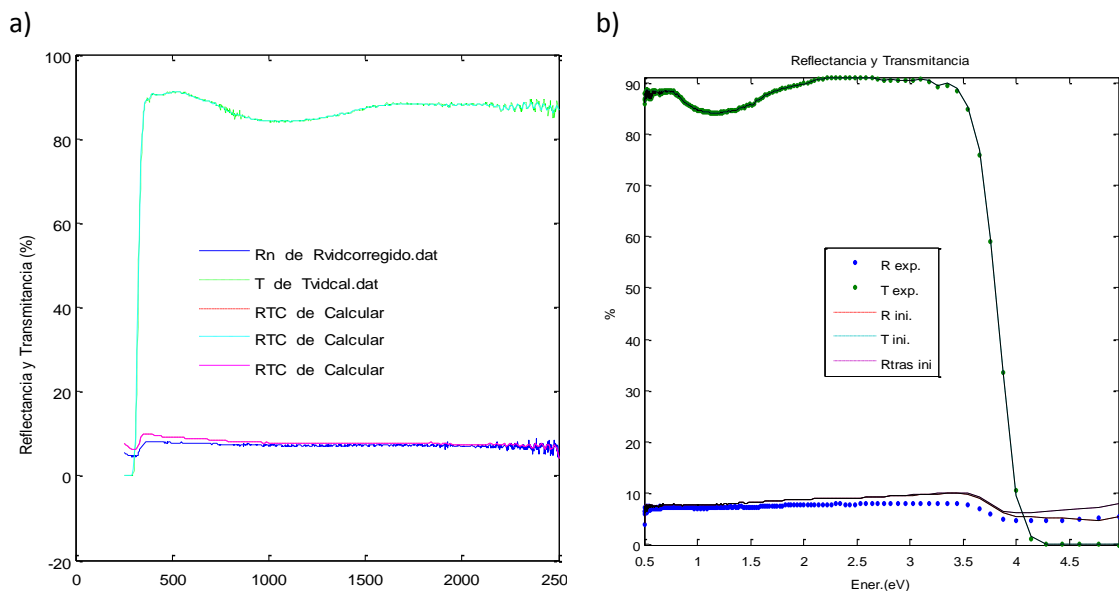


Figura 5.3 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales. Para este caso la reflectancia trasera inicial ($R_{tras\ ini}$) se calcula pero no se usa, debido a que en un sustrato teóricamente la reflectancia trasera es igual a la reflectancia normal.

Por medio de este modelo, podemos identificar que los espectros de magnitudes ópticas simulados y experimentales son parecidos, pero a diferencia del modelo PAP, encontramos una pequeña separación del espectro de reflectancia experimental con respecto al espectro de reflectancia ajustado figura 5.3b) y el espectro de reflectancia simulado figura 5.3a).

Los espectros de las constantes ópticas para este modelo, presentan soluciones no ruidosas y bien definidas para gran parte del espectro debido a que el sustrato de vidrio es un material muy transparente y este modelo es muy útil para ajustar parámetros ópticos en la parte del espectro de transparencia de los materiales, la figura 5.4 representa estos espectros.

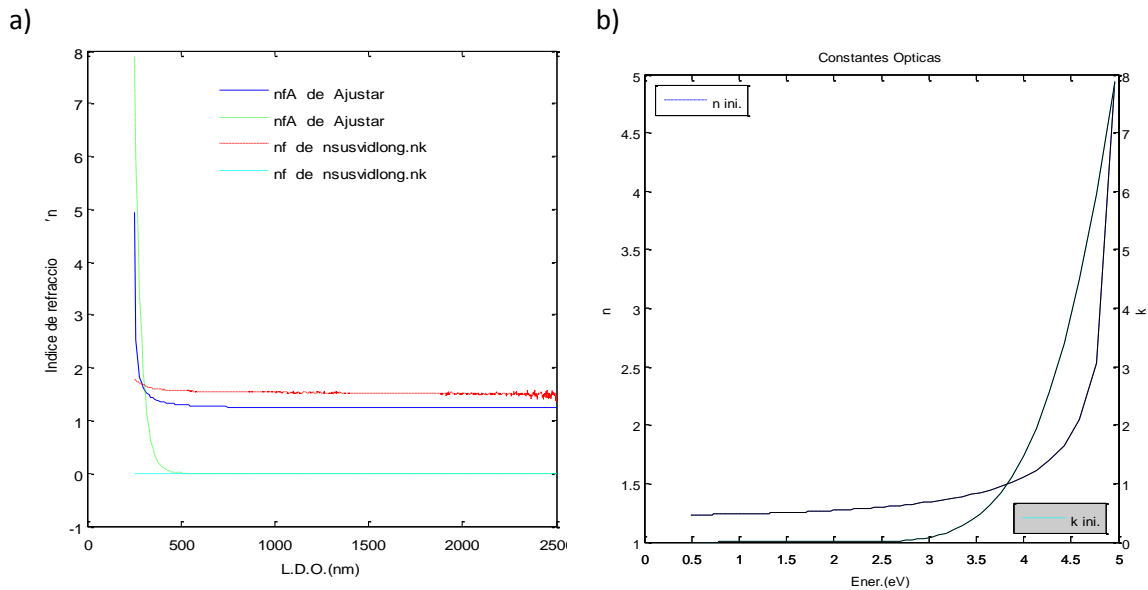


Figura 5.4 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

El modelo WD se basa en cinco coeficientes, donde los dos primeros determinan la parte del espectro transparente del material y los tres último determinan la parte del espectro de absorción, para el sustrato de vidrio los valores de estos coeficientes son los que se muestran en la tabla 5.1. Con estos coeficientes resultaron las anteriores graficas de magnitudes y constantes ópticas del sustrato.

Tabla 5.1- Valores de los coeficientes del modelo de Wemple–DiDomenico para un sustrato de vidrio

A	B	C	D	E
0.514895	-61125.4	-8589.3	0.458026	35.6702

El ajuste que proporciona este modelo para el sustrato de vidrio es correcto a pesar de que la simulación de la reflectancia basada en los índices ajustados no sea igual que la reflectancia experimental ya que se aprecia una mínima diferencia; para este tipo de materiales transparentes es muy útil este método.

5.1.3 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de un sustrato de vidrio por medio de OPTICA usando el modelo físico de ajuste de parámetros FOROUHI–BLOOMER (FB).

La figura 5.5 representa los espectros de transmitancia y reflectancia experimentales de un sustrato de vidrio de espesor de 1,5mm, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo FB.

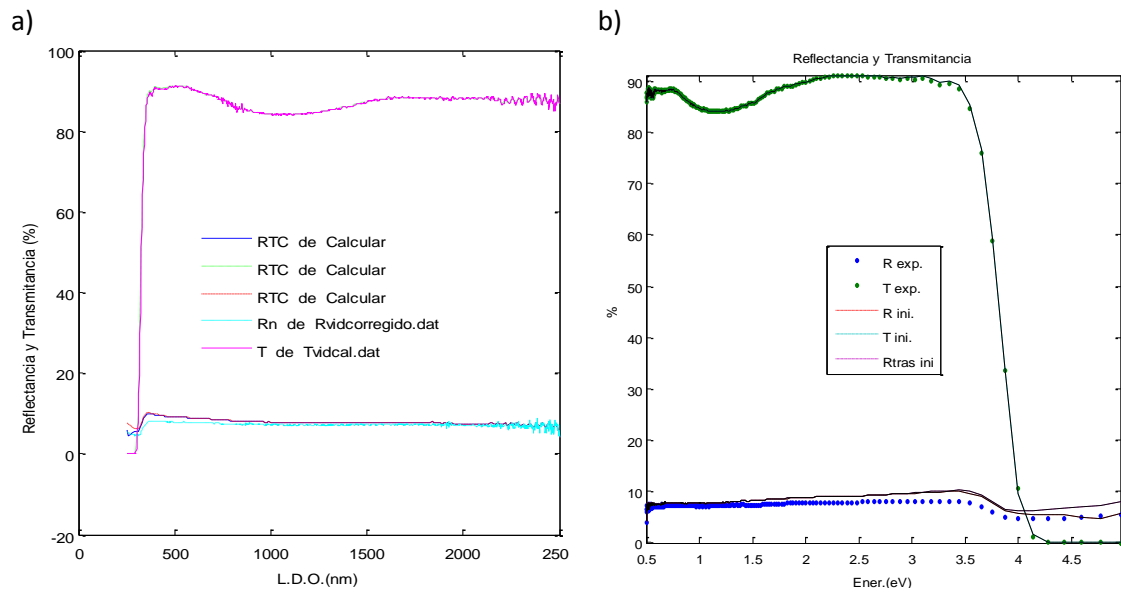


Figura 5.5 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales. Para este caso la reflectancia trasera inicial ($R_{tras\ ini}$) se calcula pero no se usa, debido a que en un sustrato teóricamente la reflectancia trasera es igual a la reflectancia normal.

Para este modelo, como se comentó en capítulos anteriores, cuenta con cinco parámetros A , B , C , $n(infinito)$, E_g , para calcular los índices del material. En OPTICA no se manejan directamente los parámetros A , B , C ; se manejan dos parámetros que siempre aparecen (n_{inf} , E_g) y otros que van en grupos de tres (I , E_0 , gam)^{xiv}. Ver tabla 5.2. Cada grupo de tres parámetros, produce una transición que produce un pico de absorción. Para el caso del sustrato de vidrio al no ser un material absorbente, el espectro del índice de extinción no va a presentar muchos picos, sólo tendrá uno, en valores muy altos de energía.

Tabla 5.2- Valores de los parámetros $n(infinito)$, E_g y grupo de tres parámetros I , E_0 , gam para el modelo de Forouhi-Bloomer para un sustrato de vidrio

$n(infinito)$	E_g	I	E_0	gam
5.78345	-10.34	0.304109	5.12419	1.69049

Lo anterior se comprobó y por eso sólo se utilizó una transición o un grupo de tres parámetros, ya que al utilizar más de una, los resultados de las simulaciones no eran correctos; más sin embargo con una transición, el resultado de las simulaciones de las magnitudes ópticas es similar al del modelo de WD pero más realista debido al comportamiento de la gráfica 5.6b) donde la constante de extinción k forma un “pico” de absorción y baja, no es posible obtener con el modelo WD. El ajuste de las constantes proporciona valores muy grandes y muy alejados de los valores iniciales figura 5.6; por lo que el ajuste con este modelo no se tiene en cuenta para el sustrato.

^{xiv} Esto se comentó en detalle en la sección 4.3.4. Modelo Forouhi-Bloomer.

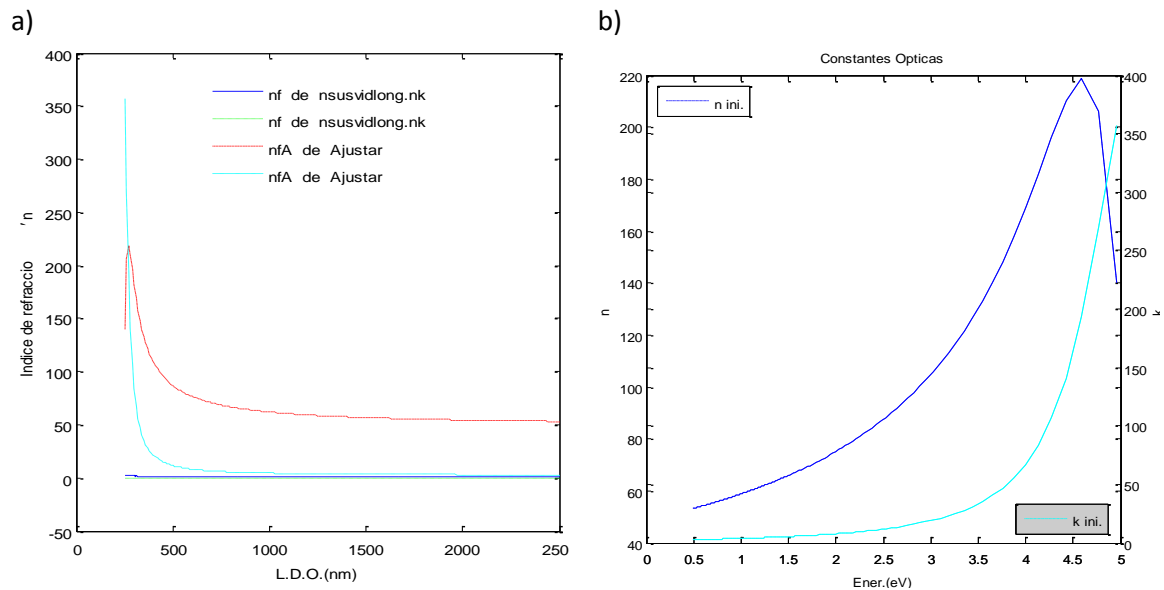


Figura 5.6 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

5.1.4 Análisis de resultados de constantes ópticas ajustadas para un sustrato de vidrio.

En la figura 5.7 observamos los resultados obtenidos para las constantes ópticas del sustrato de vidrio, por los tres modelos de ajuste del software OPTICA.

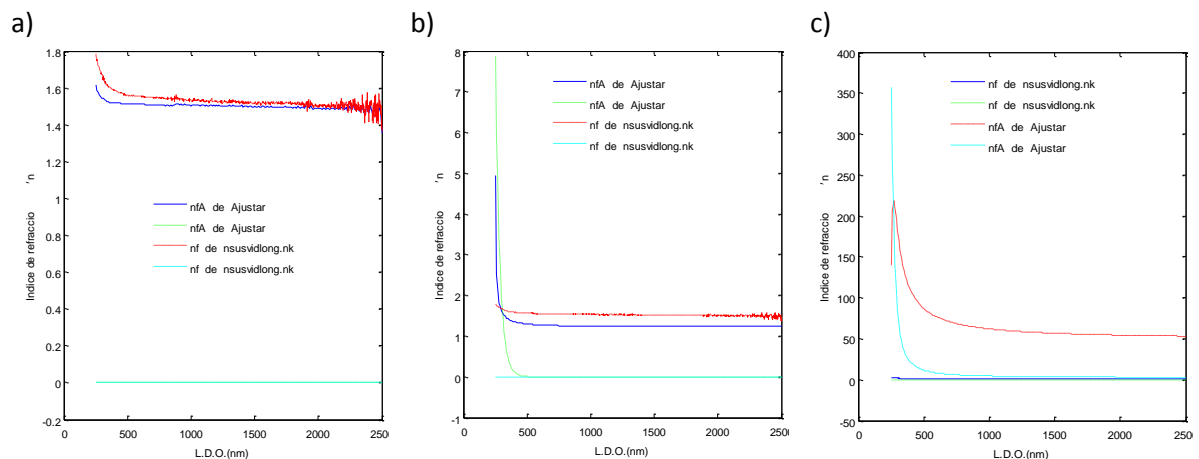


Figura 5.7 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo PAP; (b) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo WD; (c) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo FB. Donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales.

El resultado por el modelo PAP es el que mejor respuesta proporciona para el rango de espectro estudiado ya que el valor de n es similar al que conocemos, y el de la constante k permanece en cero; el modelo WD también proporciona una buena respuesta para n , más sin embargo el valor

de k en el espectro ultravioleta tiene un comportamiento de absorción brusco. El modelo FB brinda una respuesta con valores de n grandes y valores de k parecidos al modelo WD.

5.2 Caracterización óptica de una lámina de sulfuro de indio (In_2S_3) como ejemplo de capa ventana

La caracterización óptica de una lámina de sulfuro de indio se realiza a partir de los espectros de transmitancia y reflectancia; medidos en un espectroscopio de Perkin-Elmer Lambda9 en un rango de longitudes de onda entre 300nm y 2000nm. Los parámetros ópticos de la lámina de In_2S_3 sobre el sustrato de vidrio (caracterizado en el ítem anterior), se estiman en función de un cálculo teórico inicial de los espectros de magnitudes y constantes ópticas; que posteriormente, se ajustaran por medio de OPTICA usando diferentes modelos de ajuste de parámetros a los espectros experimentales, para finalmente simular los espectros con los parámetros ópticos estimados.

5.2.1 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de sulfuro de indio (In_2S_3) por medio de OPTICA, usando el modelo de ajuste de parámetros punto a punto (PAP).

La figura 5.8 representa los espectros de transmitancia y reflectancia experimentales de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo PAP.

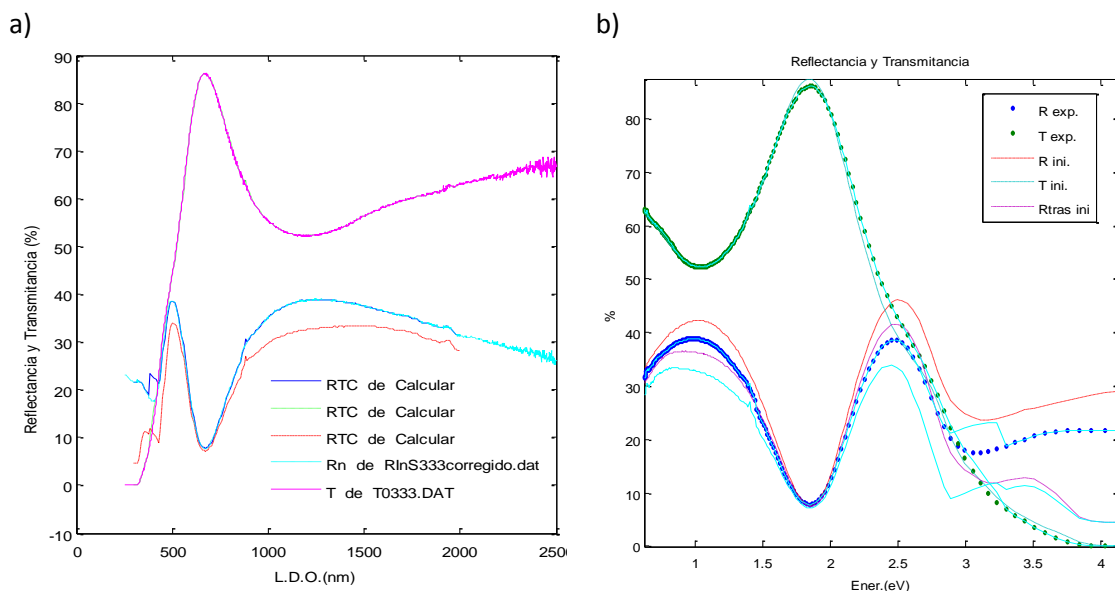


Figura 5.8 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

El resultado de ajuste y simulación de magnitudes y constantes ópticas de este modelo para la película de sulfuro de indio, nos proporcionan espectros ruidosos para todos los parámetros ópticos (figura 5.8 y 5.9), era lo esperado como se había comentado en capítulos anteriores; más

sin embargo observamos que los espectros ajustados y simulados son casi idénticos a los experimentales, y de los tres modelos, es el que mejor ajusta de forma general, pero la gran cantidad de picos de ruido (figura 5.8) es lo que no nos permite utilizar los valores finales. El resultado de este modelo es más de carácter instructivo que una respuesta final.

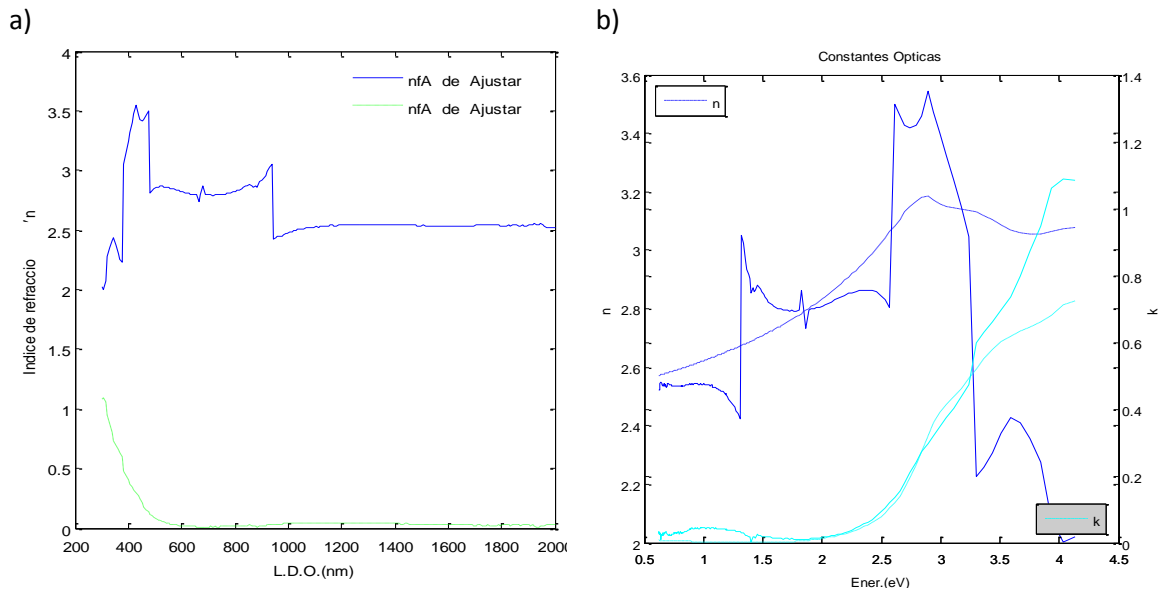


Figura 5.9 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

Los parámetros básicos que ajusta OPTICA con cada modelo, para este caso no se realizó ninguna modificación y se mantuvo los mismos valores iniciales como se muestra en la tabla 5.3.

Tabla 5.3 - Valores de los parámetros básicos ajustados por el modelo punto a punto, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.

<i>Espesor (d)</i>	<i>Desacoplo</i>	<i>Rugosidad</i>
120	0	0

5.2.2 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de sulfuro de indio (In_2S_3) por medio de OPTICA, usando el modelo físico de ajuste de parámetros WEMPLE – DIDOMENICO (WD).

La figura 5.10 representa los espectros de transmitancia y reflectancia experimentales de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo WD.

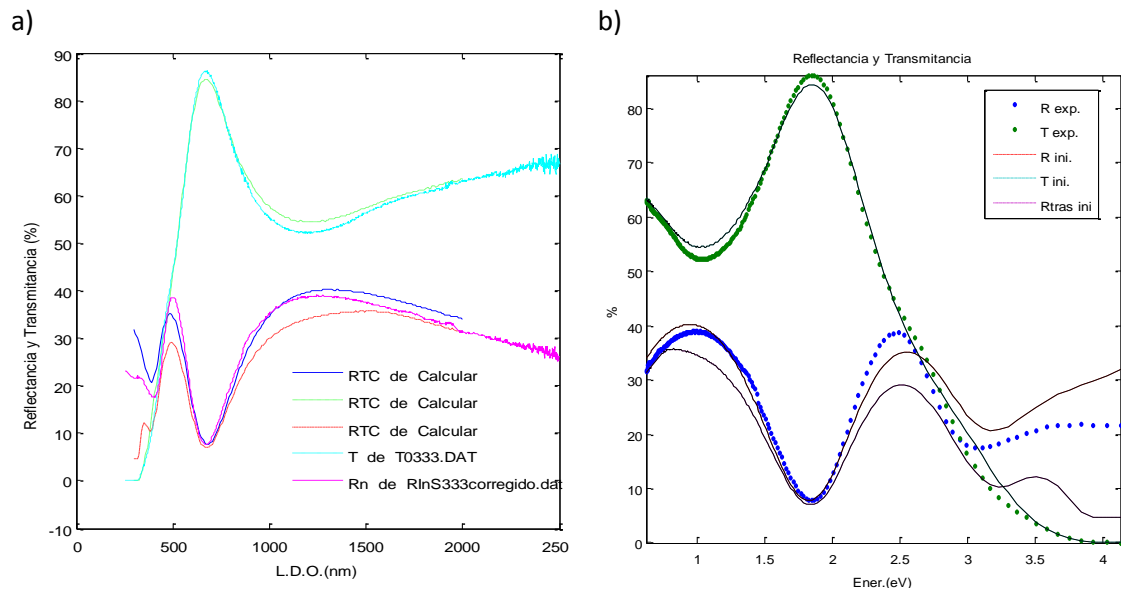


Figura 5.10 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

Como se sabe, el modelo de WD es correcto para ajustar la parte del espectro de transparencia de los diferentes materiales; ya que para la parte de absorción no presenta resultados óptimos, por esta razón quisimos ajustar primero con los dos primeros coeficientes del modelo (parte transparente); observamos que el resultado en el espectro de transparencia es aceptable, pero en la parte de absorción no es correcto, por lo que decidimos ajustar los cinco coeficientes del modelo y observamos que en la parte del espectro transparente no hubo modificaciones, pero en la parte del espectro de absorción mejoró, esto se representa en la figura 5.10.

Después de varios intentos de ajuste, se puede observar en la figura 5.10, que el modelo funciona de manera correcta para el espectro que se encuentra entre 450nm y 800nm (1,55 – 2,76 eV); es decir en la parte del espectro visible, la parte del espectro infrarrojo representa un ajuste aceptable más no el esperado y para el espectro ultravioleta (UV) el modelo no es viable ya que la respuesta de las funciones simuladas y las experimentales se alejan demasiado, intentaremos con el modelo FB poder realizar un mejor ajuste para este rango del espectro.

Los valores de los parámetros básicos de la capa como los coeficientes del modelo WD que ajusta OPTICA, se representan en la tabla 5.4.

Tabla 5.4 - Valores de los parámetros básicos y coeficientes ajustados por el modelo Wemple – DiDomenico, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.

Espesor (d)	Desacoplo	Rugosidad
127.123317997957	-0.0211811	9.10335e-010

A	B	C	D	E
5.3701	-35528.7	-63.6252	-52.6392	87.7291

Los espectros de las constantes ópticas que nos ajusta el modelo se representan en la figura 5.11. Podemos identificar que la parte del espectro UV (absorción) no ajusta como deseamos debido a que las gráficas sólo suben y no representan picos de absorción definidos.

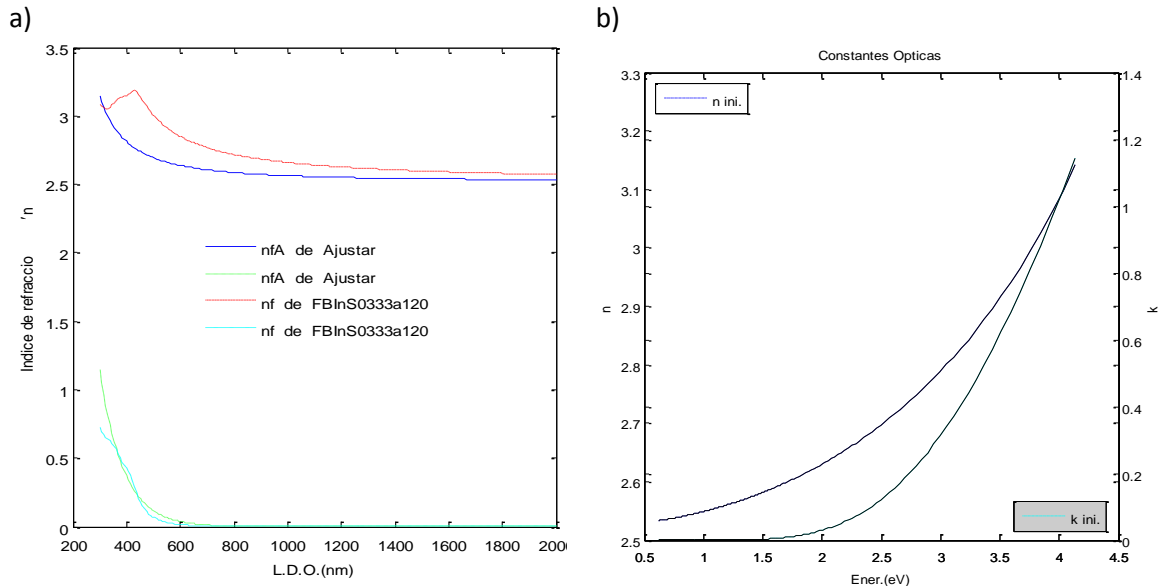


Figura 5.11 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

Un valor añadido que nos proporciona OPTICA es poder calcular el gap óptico de la lámina por medio del gráfico de Tauc, con transiciones directas e indirectas, el resultado es el de la figura 5.12, donde el resultado después de trazar linealidad, el gap óptico es de aproximadamente 2,7 eV. Es un valor cercano al teórico, ya que en la literatura el gap del In_2S_3 está entre 2.3 y 2.7eV⁶⁰

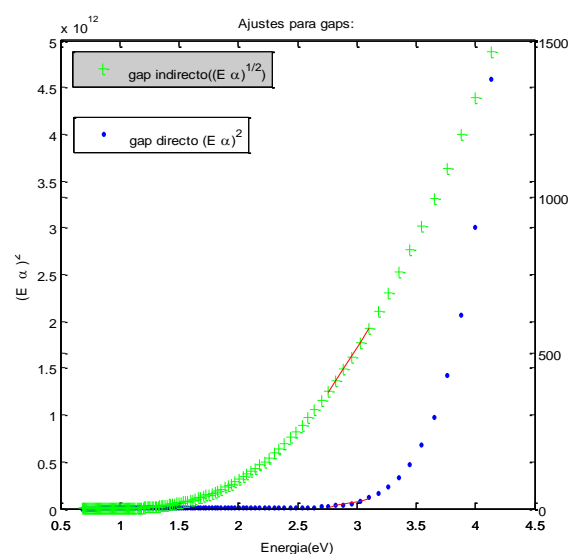


Figura 5.12 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Wemple–DiDomenico.

5.2.3 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de sulfuro de indio (In_2S_3) por medio de OPTICA, usando el modelo físico de ajuste de parámetros FOROUHI-BLOOMER (FB).

Para este modelo, realizamos ajustes de uno hasta cinco transiciones o picos de absorción, para poder encontrar el mejor ajuste posible; ya que por este modelo podremos encontrar espectros simulados y ajustados que sean más parecidos a los espectros experimentales tanto en el rango de transparencia como el de absorción. También encontrar constantes ópticas mucho mejor definidas que las proporcionadas por los anteriores modelos.

5.2.3.1 Ajuste con una transición.

La figura 5.13 representa los espectros de transmitancia y reflectancia experimentales de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo FB utilizando una transición.

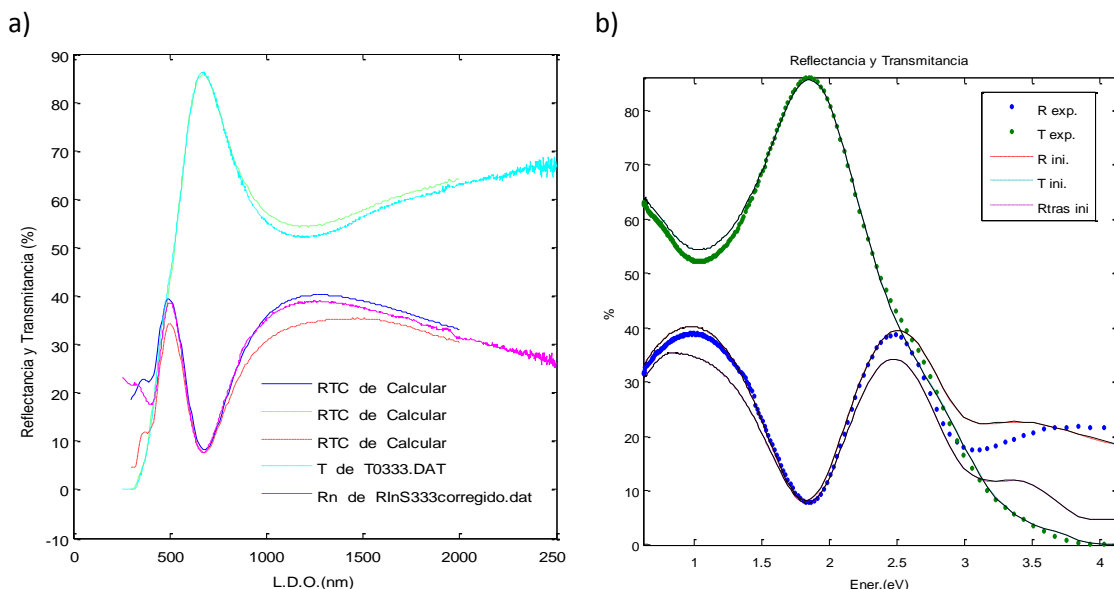


Figura 5.13 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

Con una transición, observamos que las simulaciones de las funciones ópticas es aceptable y que el espectro de reflectancia es hasta ahora el mejor ajustado, ver figura 5.13. El espectro de la constante óptica k , figura 5.14; posee un pico definido en el rango de absorción, en consecuencia de esto, intentamos con dos transiciones, para encontrar un índice de refracción mejor ajustado.

Los parámetros básicos de la capa como demás parámetros ($n(\text{infinito})$, E_g , I , E_o , gam) del modelo para este ajuste son los que se muestran en la tabla 5.5. El gap óptico para este modelo con una transición es de aproximadamente 2,6 eV. Es un valor cercano al teórico, ya que en la literatura el gap del In_2S_3 está entre 2.3 y 2.7eV⁶⁰; ver figura 5.15.

Tabla 5.5 - Valores de los parámetros básicos, parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.

Espesor (<i>d</i>)	Desacoplo	Rugosidad
125.243941845184	-0.0155311	-0.0291576

<i>n</i> (infinito)	<i>E_g</i>
2.33929	1.29297

<i>l</i>	<i>E₀</i>	<i>gam</i>
0.0392485	3.33441	2.65632

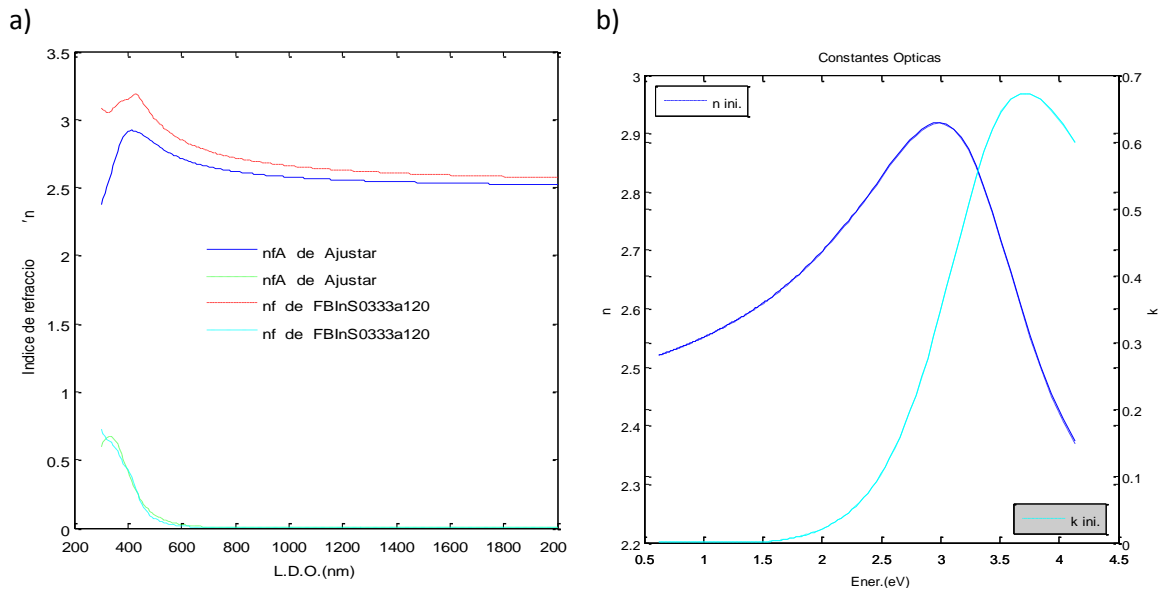


Figura 5.14 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción *n* – índice de extinción *k*) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con *nfA* son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

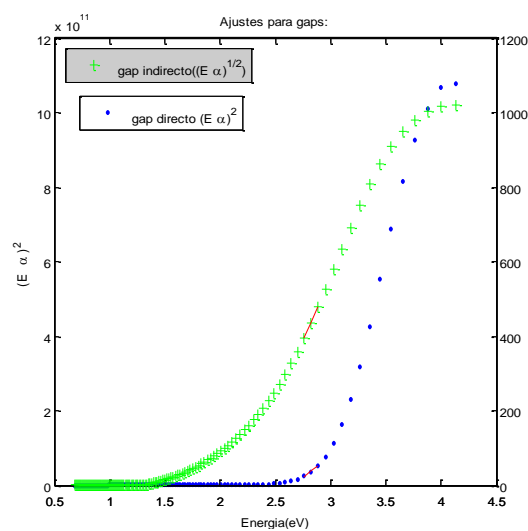


Figura 5.15 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con una transición.

5.2.3.2 Ajuste con dos transiciones.

La figura 5.16 representa los espectros de transmitancia y reflectancia experimentales de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo FB utilizando dos transiciones.

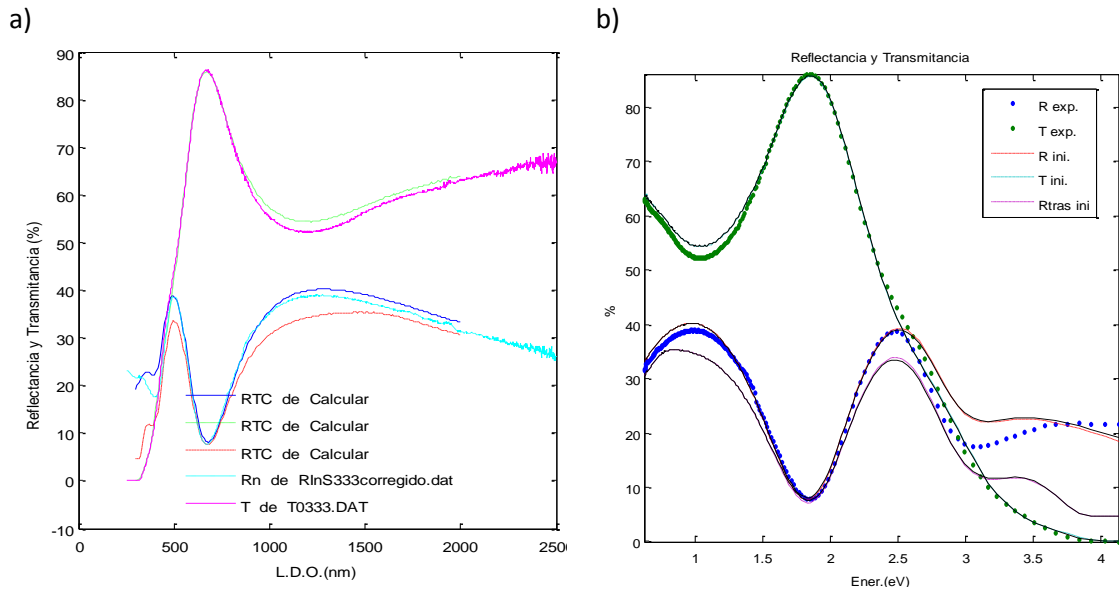


Figura 5.16 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

Con el ajuste de dos transiciones, el espectro de las magnitudes ópticas ajustadas y simuladas es similar al espectro experimental. Este resultado también es muy parecido al obtenido con una sola transición, la diferencia es que el espectro de K presenta dos absorciones debido a que se utilizan dos grupos de tres parámetros cada uno. Pero una de ellas, se encuentra fuera del rango de medida por lo que el ajuste por este número de transiciones no sería el apropiado. Los espectros de las constantes ópticas ver figura 5.17b, para este caso están mejor definidos para el rango de absorción.

Los parámetros básicos de la capa, como los parámetros del modelo que ajusta OPTICA, se representan en la tabla 5.6. El gap óptico que se obtiene por este ajuste es de aproximadamente 2,5 eV. Es un valor cercano al teórico, ya que en la literatura el gap del In_2S_3 está entre 2.3 y 2.7eV⁶⁰. Se representa en la figura 5.18.

Tabla 5.6 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.

Espesor (d)	Desacoplo	Rugosidad
125.43881157861	-0.0163928	0.0265966

$n(\text{infinito})$	E_g
2.66411	1.36519

I	E_0	gam
0.0486331	3.35852	3.03987
0.00966892	14.0349	22.1321

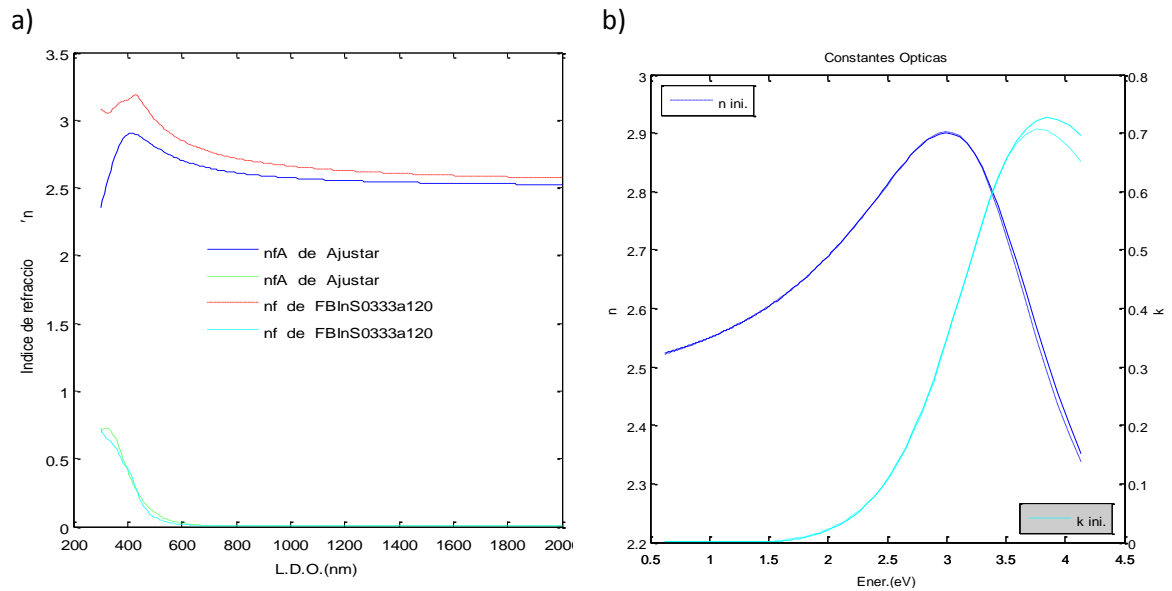


Figura 5.17 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

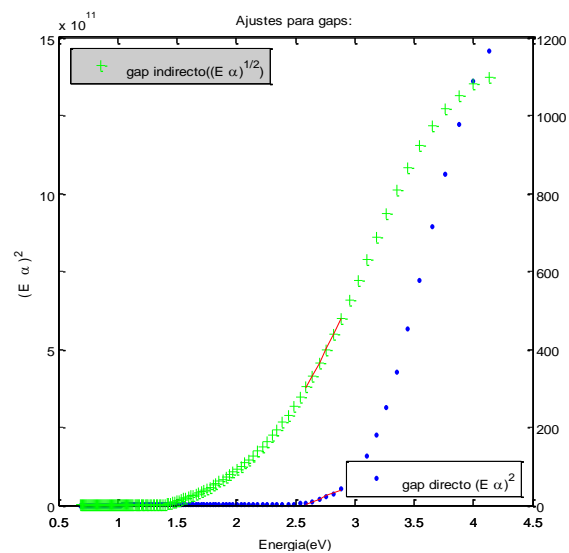


Figura 5.18 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con dos transiciones.

5.2.3.3 Ajuste con tres transiciones.

La figura 5.19 representa los espectros de transmitancia y reflectancia experimentales de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo FB utilizando tres transiciones.

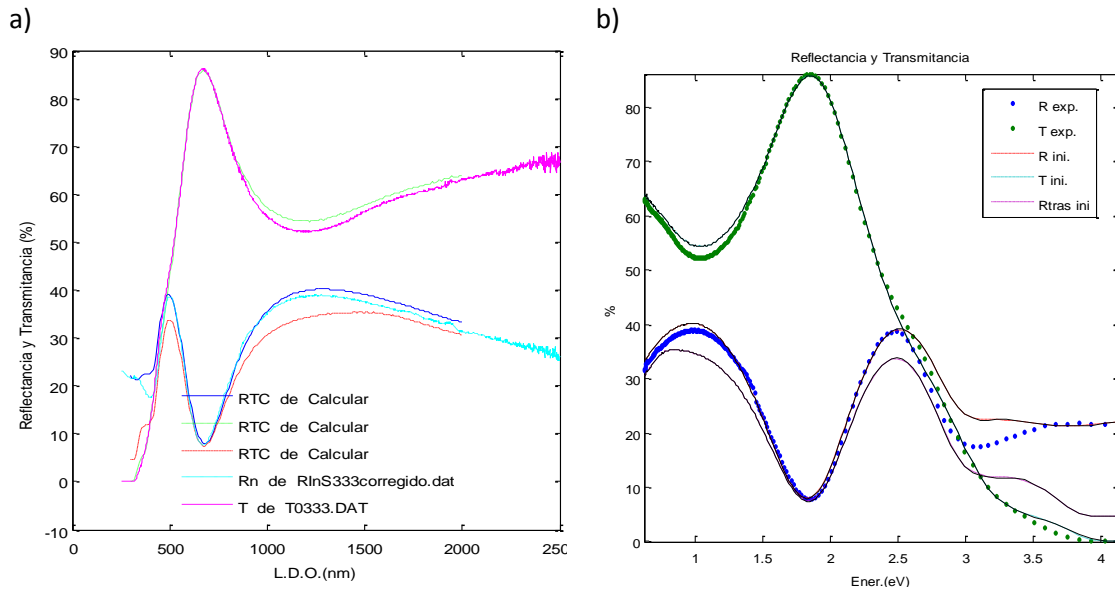


Figura 5.19 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

Se ajusta el modelo con tres transiciones, el resultado para las simulaciones y ajustes de las funciones ópticas es similar que los dos anteriores, sin embargo el espectro del coeficiente de extinción cuenta con tres absorciones, queriendo decir que tenemos tres puntos críticos, pero uno de ellos está fuera del rango de medida. Ver figura 5.20b.

Los parámetros básicos de la capa y parámetros ajustados por el modelo, se representan en la tabla 5.7. En este nuevo ajuste, los parámetros del segundo pico de absorción o transición, carecen de sentido físico al obtener una intensidad negativa y una energía fuera de rango. El gap óptico ajustado con tres transiciones en este modelo es también 3 eV. Es un valor cercano al teórico, ya que en la literatura el gap del In_2S_3 está entre 2.3 y 2.7eV⁶⁰. Ver figura 5.21.

Tabla 5.7 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.

<i>Espesor (d)</i>	<i>Desacoplo</i>	<i>Rugosidad</i>
125.483776401024	-0.0167801	-0.0203657

$n(\text{infinito})$	E_g
3.68973	1.43177

l	E_0	gam
0.12618	4.5018	20.9246
-0.10455	8.92853	1310.72
0.0203563	3.224	1.73259

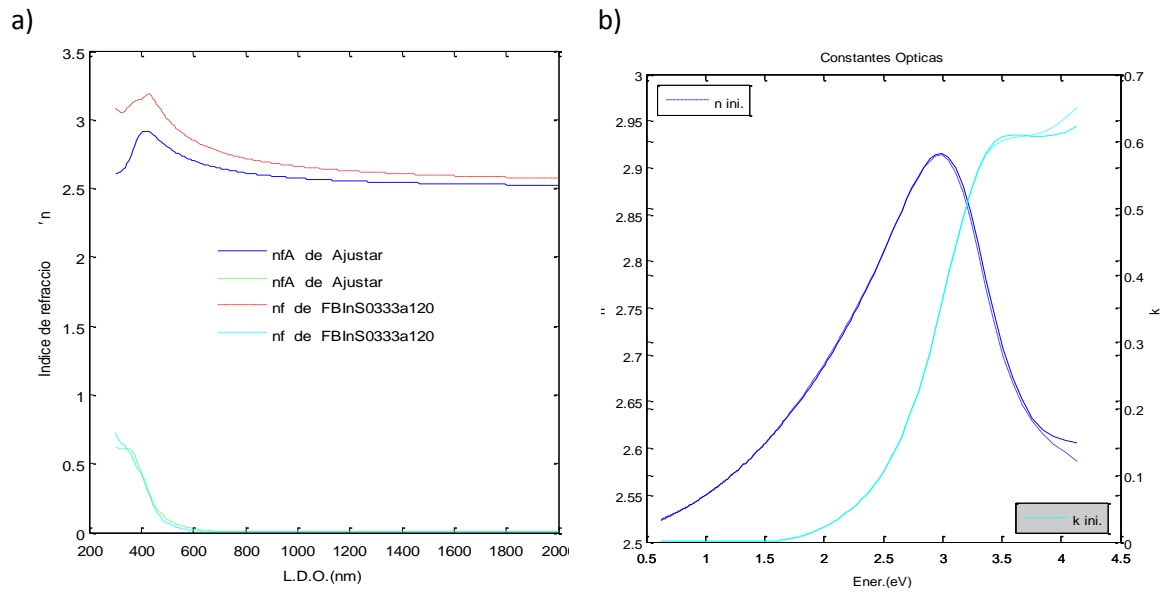


Figura 5.20 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y las demás son los espectros iniciales.

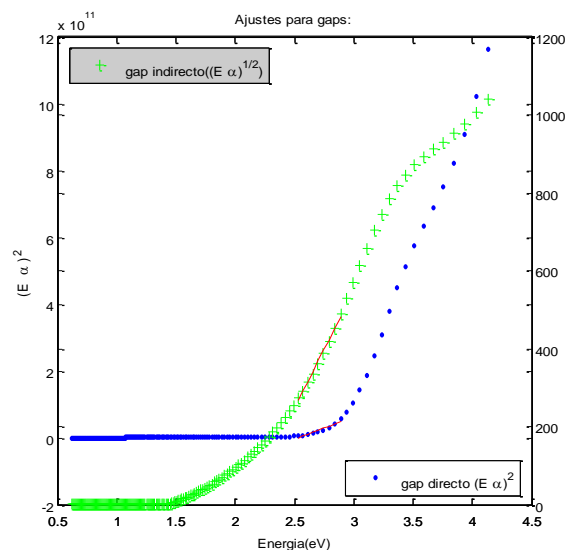


Figura 5.21 – Grafico de Tauc que determina el gap óptico de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi-Bloomer con tres transiciones.

5.2.3.4 Ajuste con cuatro transiciones.

La figura 5.22 representa los espectros de transmitancia y reflectancia experimentales de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo FB utilizando cuatro transiciones.

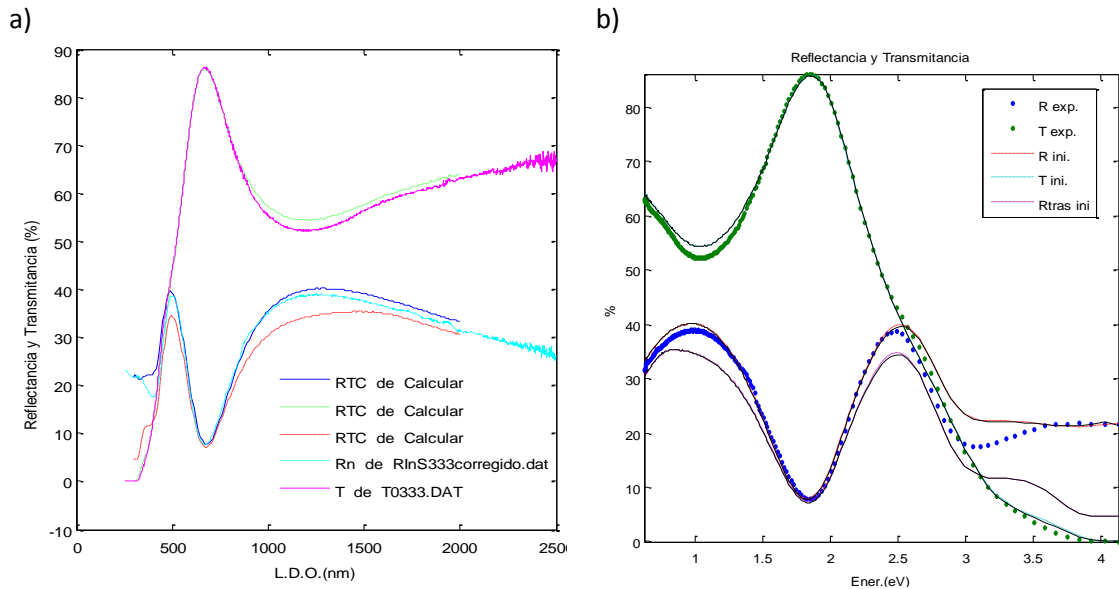


Figura 5.22 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

Cuando ajustamos con este modelo utilizando cuatro transiciones, observamos que el espectro de la lámina en la parte de absorción del coeficiente de extinción k , se representa cuatro puntos de absorción que se encuentran dentro del rango de medida, algo que no se había podido encontrar con los anteriores ajustes ver figura 5.23b. Los ajustes como simulaciones de las magnitudes ópticas son muy similares a las medidas experimentales como a los resultados de los anteriores ajustes ver figura 5.22.

Los parámetros básicos de la capa y parámetros ajustados del modelo se representan en la tabla 5.8. El gap óptico de la lámina es de aproximadamente 2,6 eV, similar al de los anteriores ajustes. . Es un valor cercano al teórico, ya que en la literatura el gap del In_2S_3 está entre 2.3 y 2.7eV⁶⁰. Ver en la figura 5.24.

Tabla 5.8 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.

<i>Espesor (d)</i>	<i>Desacoplo</i>	<i>Rugosidad</i>
125.811997820923	-0.0161583	0.00245009

$n(\text{infinito})$	E_g
2.32465	0.606907

l	E_0	gam
0.00996813	2.27346	1.57069
-0.0199211	2.33749	2.12455
0.0290421	3.2061	2.88823
0.00191361	4.15401	0.620789

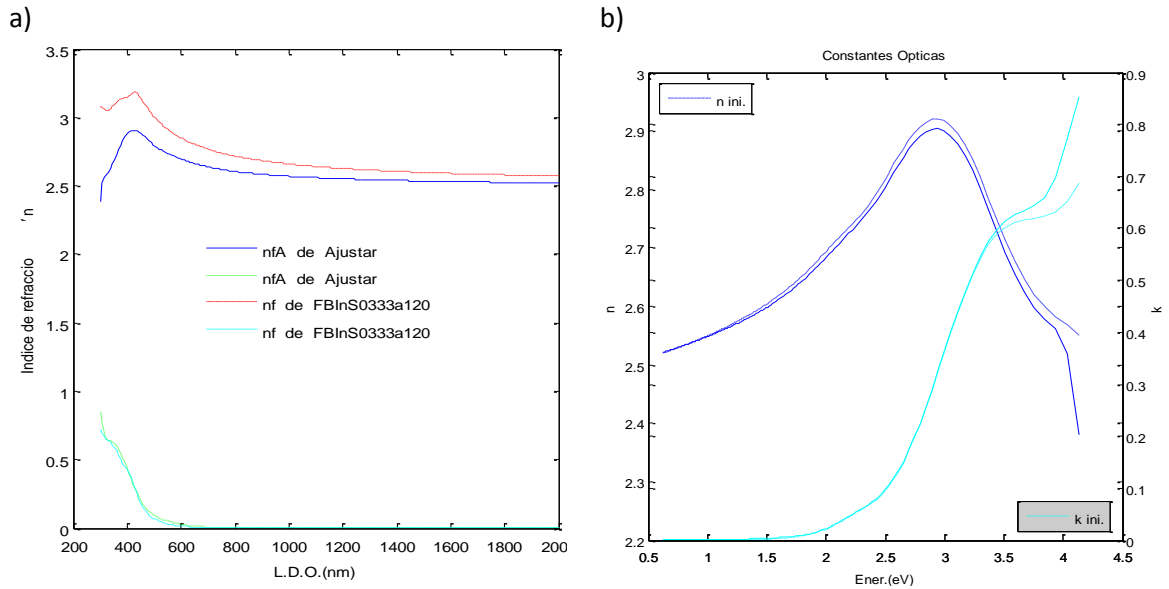


Figura 5.23 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

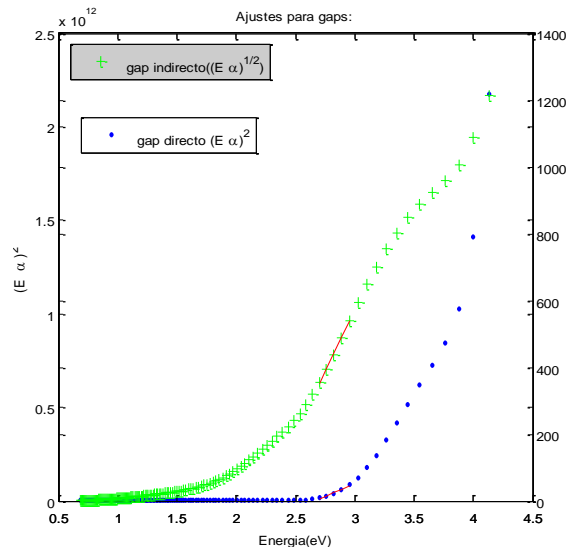


Figura 5.24 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con cuatro transiciones.

5.2.3.5 Ajuste con cinco transiciones.

La figura 5.25 representa los espectros de transmitancia y reflectancia experimentales de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo FB utilizando cinco transiciones.

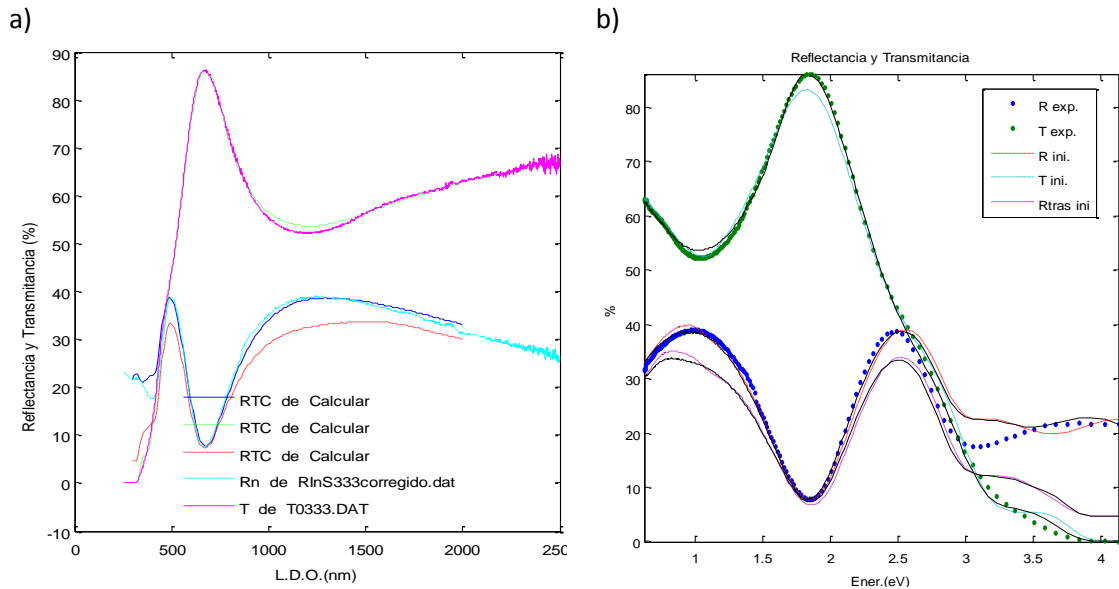


Figura 5.25 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia y transmitancia) de una película de sulfuro de indio (In_2S_3) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

Ajustamos con cinco transiciones, el resultado de las magnitudes y constantes ópticas son similares a los valores de magnitudes experimentales. Ver figura 5.25; El espectro de la constante de extinción cuenta con cinco absorciones que están dentro del rango de medida. Ver figura 5.26b.

Los parámetros básicos de la capa, parámetros ajustados del modelo se representan en la tabla 5.9. El gap óptico de la lámina es de aproximadamente 2,6 eV, similar al de los anteriores ajustes. Es un valor cercano al teórico, ya que en la literatura el gap del In_2S_3 está entre 2.3 y 2.7eV⁶⁰. Ver figura 5.27.

Tabla 5.9 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio.

Espesor (d)	Desacoplo	Rugosidad
126.84872748379	-0.0163375	-0.00432399

$n(\text{infinito})$	E_g
2.31076	0.00571755

l	E_0	gam
0.00548004	0.691802	0.965371
0.00875886	4.09245	1.76479
0.00513844	3.1858	1.22964
-0.0006663	1.71215	0.672935
-0.000292382	0.249774	1.13789

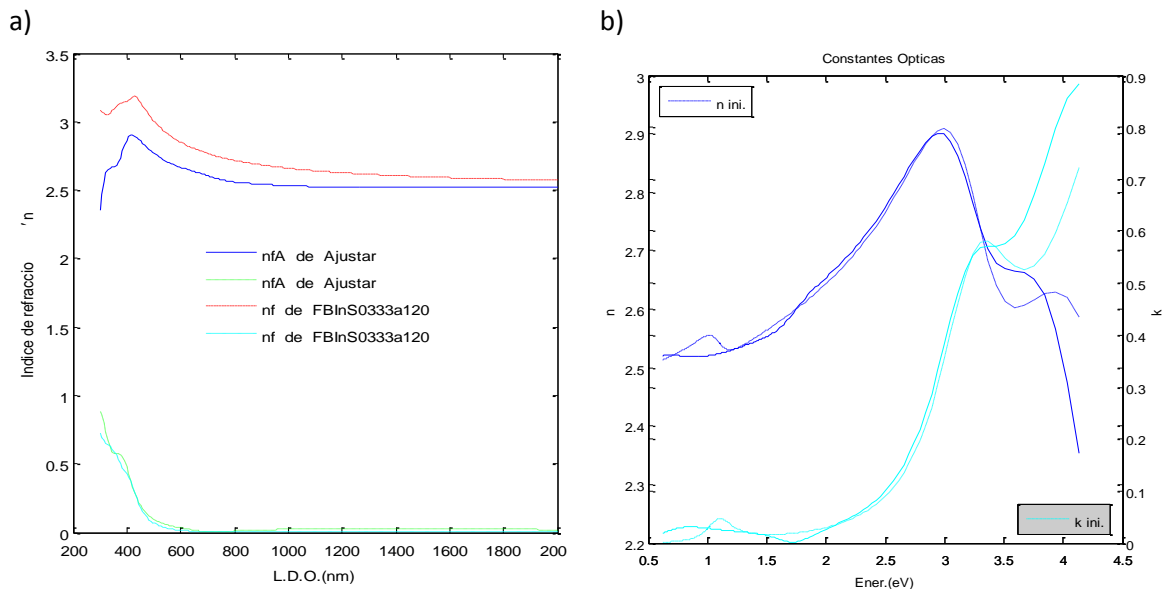


Figura 5.26 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de sulfuro de indio In_2S_3 sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

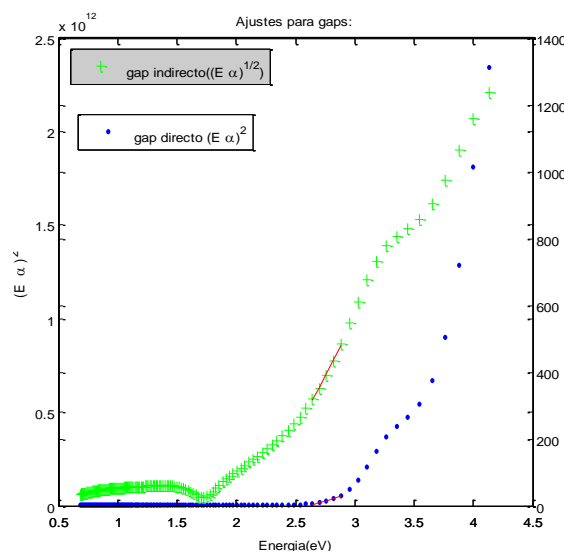


Figura 5.27 – Grafico de TAUC que determina el gap ópticos de la lámina de sulfuro de indio sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con cinco transiciones.

5.2.4 Análisis de resultados de constantes ópticas ajustadas de una lámina de In_2S_3 .

En la figura 5.28 observamos los resultados obtenidos para las constantes ópticas de la lámina de sulfuro de indio (In_2S_3), por los tres modelos de ajuste del software OPTICA.

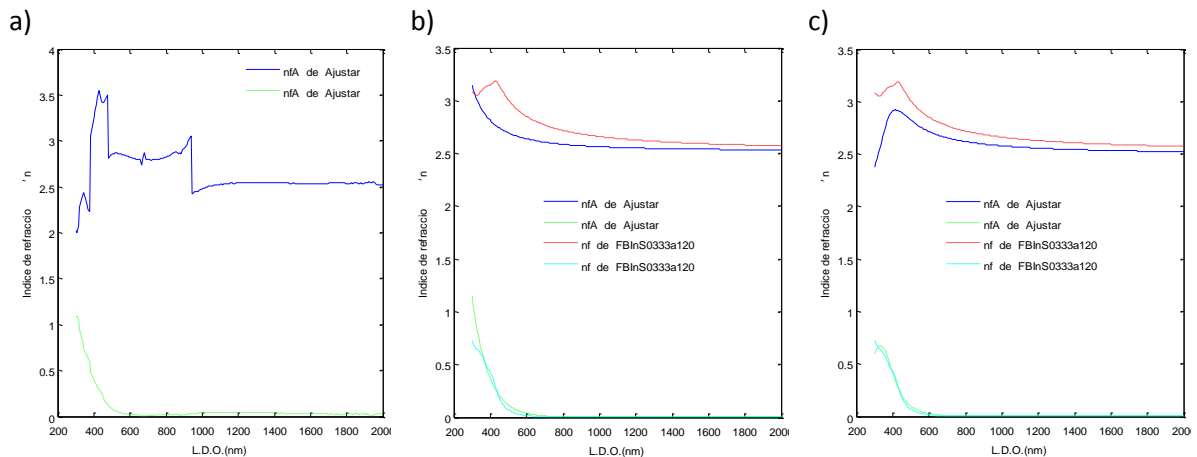


Figura 5.28 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una lámina de sulfuro de indio (In_2S_3) en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo PAP;(b) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo WD; (c) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo FB. Donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales.

El resultado obtenido para las constantes ópticas de la lámina In_2S_3 por el modelo de ajuste PAP, no es muy bueno ya que la solución es ruidosa; el obtenido por el modelo WD es aceptable ya que la parte de absorción de la lámina no se representa de la mejor forma porque no resalta un valor de absorción. El resultado obtenido por el modelo FB ajustando un término por variable para cada parámetro es el de mejor respuesta, debido a que los valores ajustados tienen sentido físico representando de forma clara una transición en el espectro k de la constante de extinción.

Respecto al número de transiciones en el ajuste de la lámina de In_2S_3 por el modelo FB, vemos que aparece un pico de absorción o transición principal en 3.35eV, que al añadir nuevas posibles transiciones, se desdobra en 2: una en aproximadamente 3,2eV y otra en aproximadamente en 4,1eV. El resto de transiciones de los siguientes ajustes, no parecen tener sentido físico y sólo contribuyen a disminuir mínimamente el de valor de χ^2 .

5.3 Caracterización óptica de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) como ejemplo de capa absorbente.

La caracterización óptica de esta lámina, se realiza a partir de los espectros de transmitancia, reflectancia y reflectancia trasera; medidos en un espectroscopio de Perkin Elmer Lambda9 en un rango de longitudes de onda entre 300nm y 2000nm. Los parámetros ópticos de la lámina absorbente sobre el sustrato de vidrio (caracterizado en el ítem 5.1), se estiman en función de un cálculo teórico inicial de los espectros de funciones y constantes ópticas; que posteriormente, se ajustaran por medio de OPTICA usando diferentes modelos de ajuste de parámetros a los

espectros experimentales, para finalmente simular los espectros con los parámetros ópticos estimados.

5.3.1 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) por medio de OPTICA, usando el modelo de ajuste de parámetros punto a punto (PAP).

La figura 5.29 representa los espectros de transmitancia, reflectancia y reflectancia trasera experimentales de la lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo PAP.

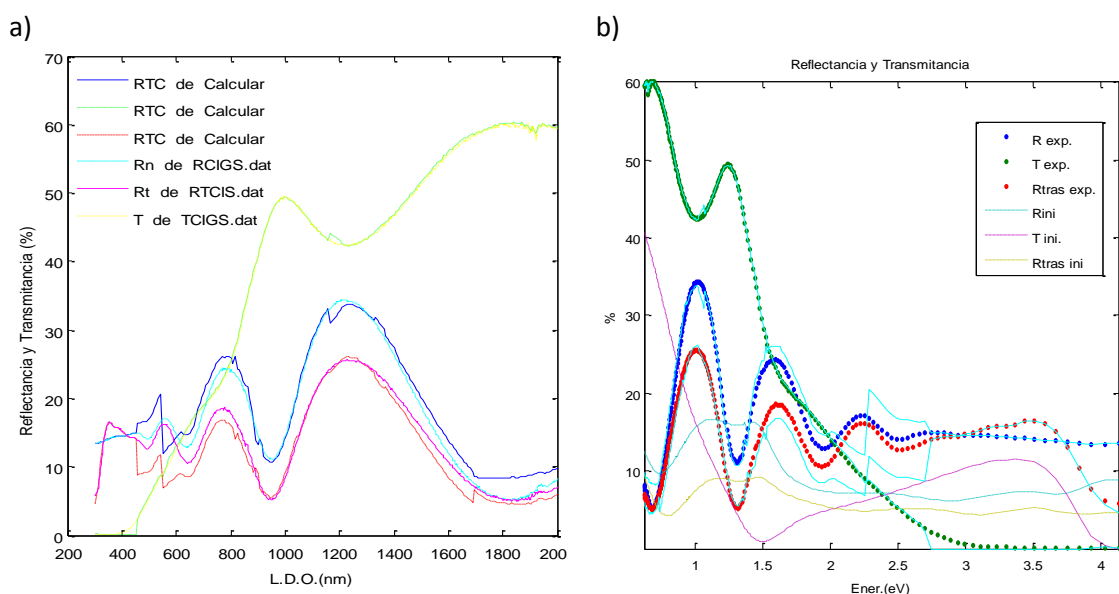


Figura 5.29 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

El ajuste en principio se realizó con un espesor pequeño, pues el ajuste con los índices que teníamos en las librerías daban razón de esto; pero luego de ajustar por los distintos modelos, identificamos que el espesor de la lámina que se midió no es tan pequeño debido a que esta lámina contiene poco cobre (Cu) por lo que el índice del material está entre el CIGS estequiométrico y el sulfuro de Indio.

Cuando realizamos el ajuste con este modelo, podemos observar en la figura 5.29 que los espectros de reflectancia y transmitancia son aceptables, más sin embargo los espectros de índices de refracción n y k que resultan de la función de minimización de la herramienta presentan demasiado ruido como podemos observar en la figura 5.30.

Por esta razón identificamos y valoramos que no es viable utilizar este modelo para caracterizar láminas con estas características.

Los parámetros básicos que ajusta OPTICA con cada modelo, para este caso no se realizó ninguna modificación y se mantuvieron los mismos valores iniciales como se muestra en la tabla 5.10.

Tabla 5.10 - Valores de los parámetros básicos ajustados por el modelo punto a punto, para una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio.

<i>Espesor (d)</i>	<i>Desacoplo</i>	<i>Rugosidad</i>
375	0	0

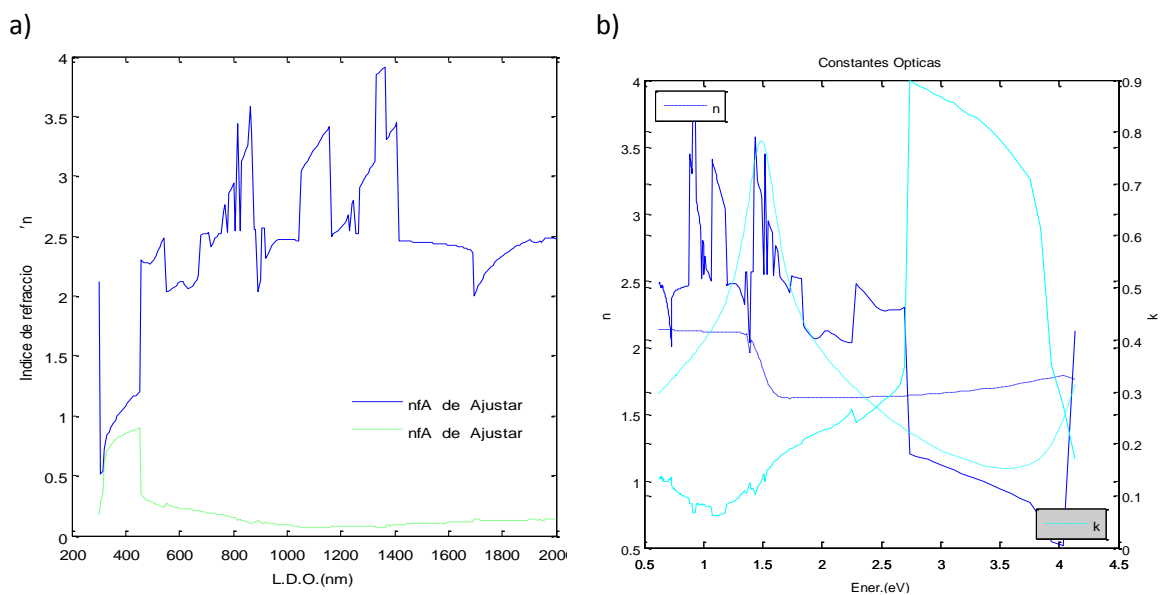


Figura 5.30 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

5.3.2 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) por medio de OPTICA, usando el modelo de ajuste de parámetros WEMPLE – DI DOMENICO (WD).

La figura 5.31 representa los espectros de transmitancia, reflectancia y reflectancia trasera experimentales de una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo WD.

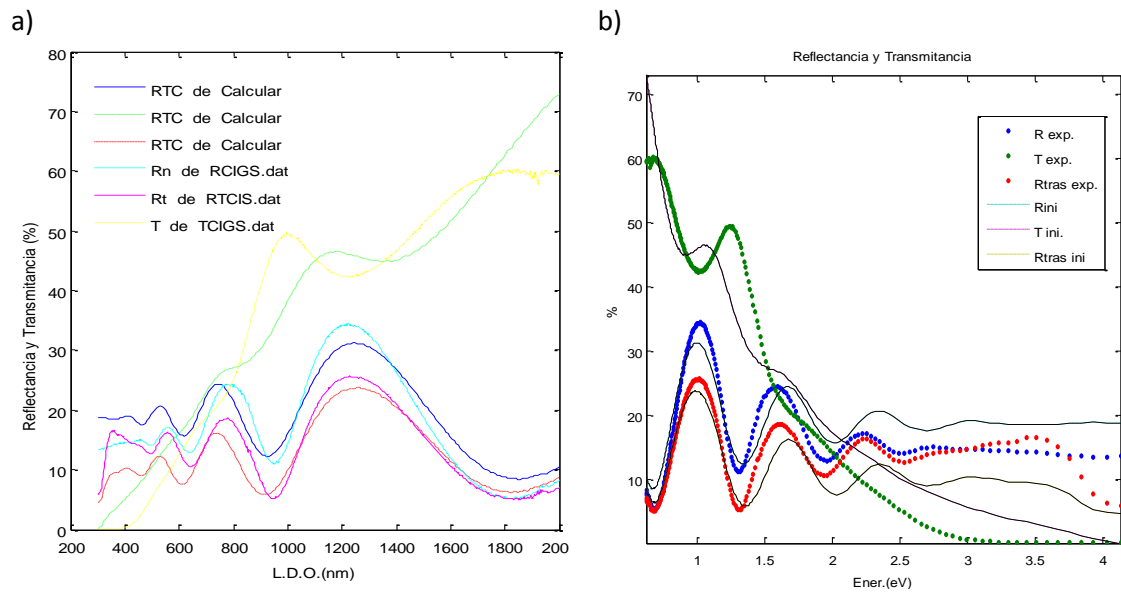


Figura 5.31 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

El ajuste por este modelo, nos proporciona resultados muy regulares, ya que los espectros de las magnitudes ópticas calculados no son muy parecidos a los espectros experimentales, esperaríamos con este modelo que aunque fuera el espectro de transmitancia se ajustara mejor a los datos experimentales, pero no se consiguió. Tomando como punto de partida un espesor de 375nm ya que el que nos proporciona el índice inicial del cálculo no es viable por lo que se comentó en el modelo anterior (PAP).

El espectro de las constantes ópticas n y k es muy lineal y poco absorbente, por lo que es un poco “sospechoso”; ya que como sabemos, este modelo es óptimo para estudiar la parte transparente del material más no es válido, cuando estudiamos la zona de absorción del mismo. Tampoco es viable el ajuste de esta lámina por este modelo, por lo que únicamente nos basaremos en el resultado del modelo FB.

Los valores de los parámetros básicos de la capa como los coeficientes del modelo WD que ajusta OPTICA, se representan en la tabla 5.11.

Tabla 5.11 - Valores de los parámetros básicos y coeficientes ajustados por el modelo Wemple–DiDomenico, para una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio

<i>Espesor (d)</i>	<i>Desacoplo</i>	<i>Rugosidad</i>
402.912344643	0.0797025	-0.0469534

<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>E</i>
5.13771	-2153.02	-6.17684	-3337.05	1083.24

Los espectros de las constantes ópticas que nos ajusta el modelo se representan en la figura 5.32. Podemos identificar que en ninguna parte del espectro tiene un pico de absorción definido, y que los valores de k son bajos aún en la parte del espectro UV.

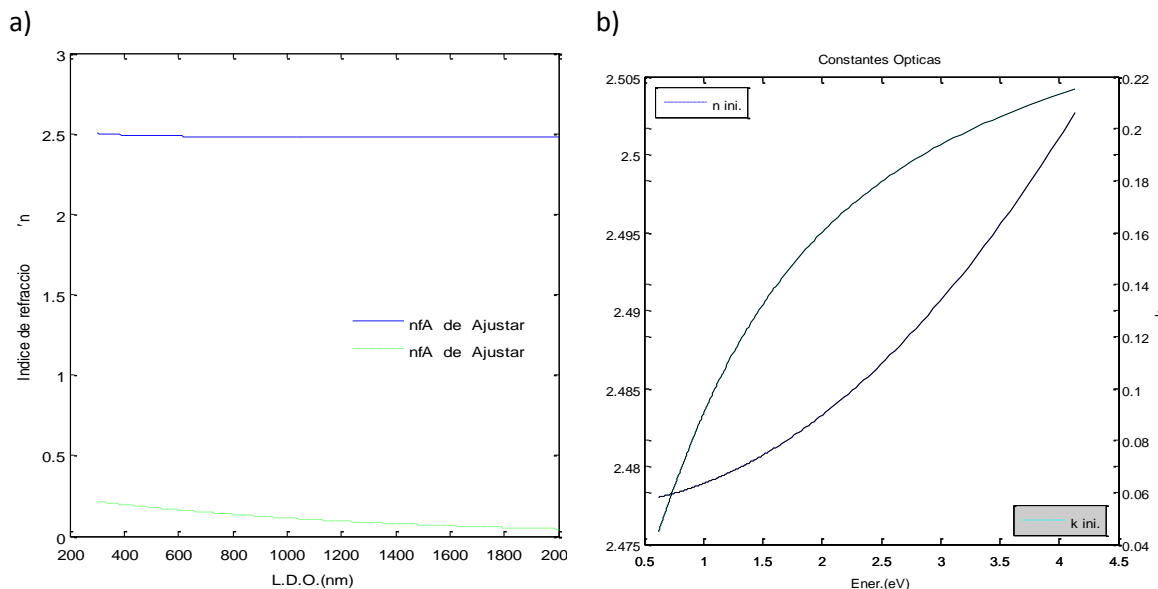


Figura 5.32 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

5.3.3 Análisis de espectros de magnitudes y constantes ópticas de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) por medio de OPTICA, usando el modelo físico de ajuste de parámetros FOROUHI - BLOOMER (FB).

Para este modelo, realizamos ajustes de dos hasta cinco transiciones o picos de absorción, para poder encontrar el mejor ajuste posible; ya que por este modelo podremos encontrar espectros simulados y ajustados que sean más parecidos a los espectros experimentales tanto en el rango de transparencia como el de absorción. También encontrar constantes ópticas mucho mejor definidas que las proporcionadas por los anteriores modelos.

5.3.3.1 Ajuste con dos transiciones.

La figura 5.33 representa los espectros de transmitancia, reflectancia y reflectancia trasera experimentales de una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo FB utilizando dos transiciones.

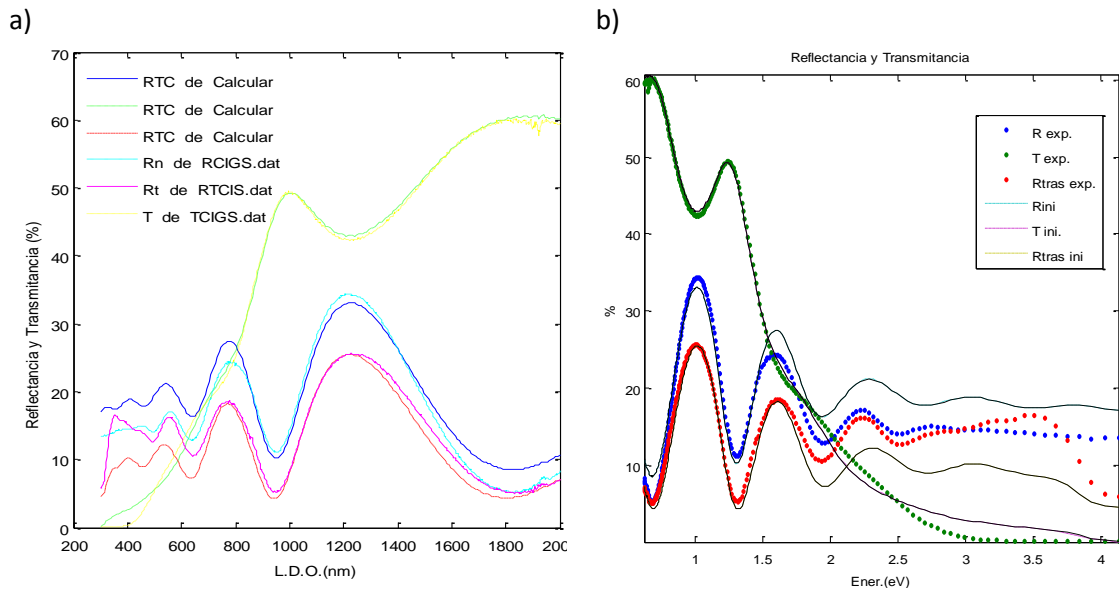


Figura 5.33 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

En principio ajustamos con una transición, al ver que los resultados no eran satisfactorios, decidimos continuar con dos transiciones, al ver que los resultados obtenidos son aceptables decidimos publicarlos en esta memoria.

Con dos transiciones obtenemos un espectro de transmitancia muy parecido al espectro experimental, pero con los demás espectros no pasa lo mismo, para los espectros de reflectancia normal y trasera la parte infrarroja es muy parecida al experimental, pero la parte del espectro visible no es parecida y la parte del espectro ultravioleta aumenta su valor en porcentaje, esto lo podemos observar en la figura 5.33.

Los espectros de las constantes ópticas para este ajuste son aceptables ver figura 5.34, pero suponemos que esta lámina debe contar con más puntos de absorción por lo que analizaremos el resultado con más transiciones, aunque el resultado con dos transiciones es una buena base y se podría utilizar.

Los parámetros básicos de la capa como parámetro del modelo para este ajuste, son los que se muestran en la tabla 5.12. El gap óptico para este modelo con dos transiciones es de aproximadamente 1,5 eV; ver figura 5.35. La literatura reporta valores de gap para esta lámina de 1,26 a 1,54 eV⁵⁸.

Tabla 5.12 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio.

<i>Espesor (d)</i>	<i>Desacoplo</i>	<i>Rugosidad</i>
369.958716490324	0.00384407	-0.0123864

$n(\text{infinito})$	E_g
2.32306	-3.32644

I	E_0	gam
0.0163702	0.572945	6.2766
-0.00532841	1.00907	2.63052

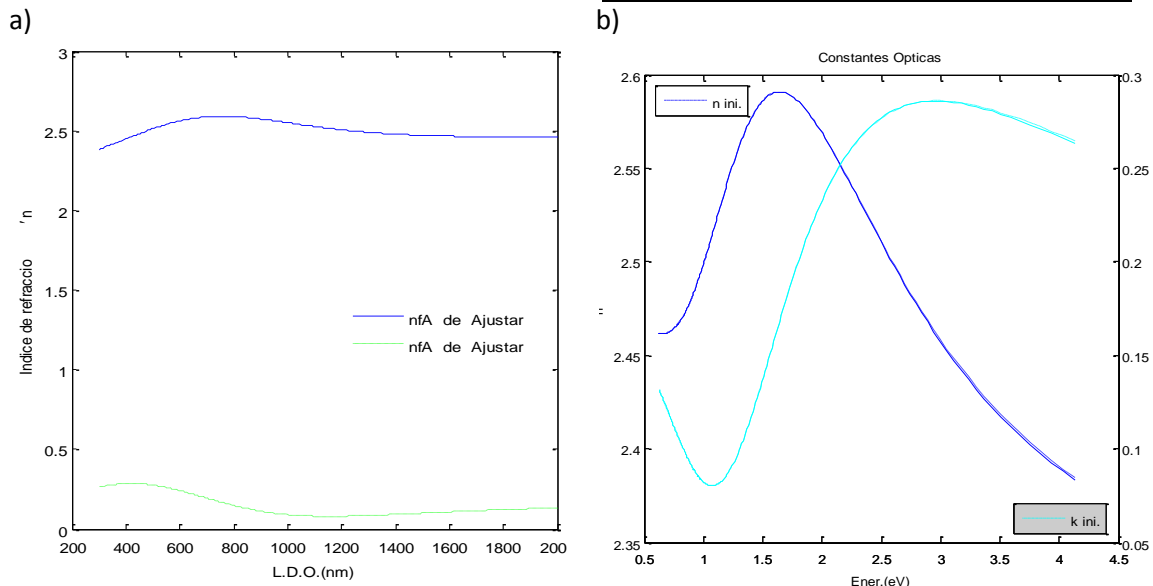


Figura 5.34 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

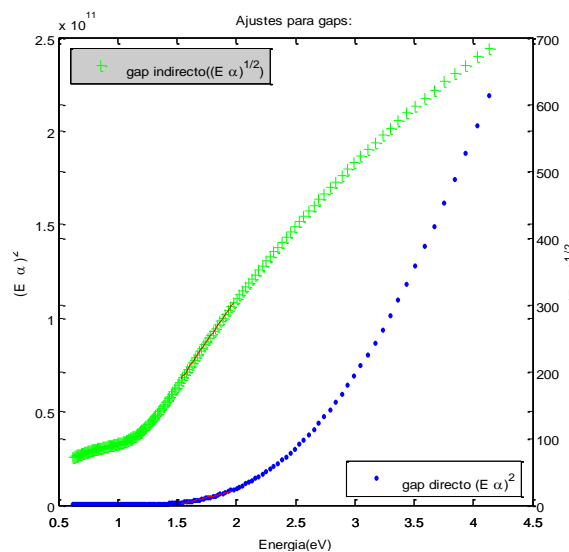


Figura 5.35 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con dos transiciones.

5.3.3.2 Ajuste con tres transiciones.

La figura 5.36 representa los espectros de transmitancia, reflectancia y reflectancia trasera experimentales de una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo FB utilizando tres transiciones.

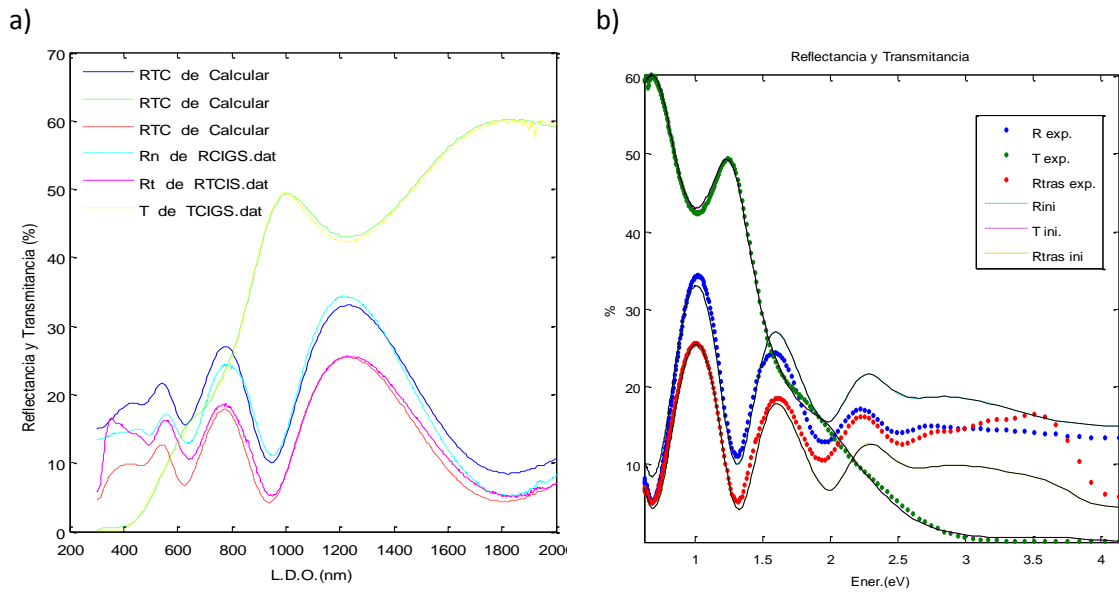


Figura 5.36 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

Ajustamos con tres transiciones, partiendo del ajuste anterior (espesor de 369nm), el resultado de las magnitudes ópticas son bastante buenos ver figura 5.36; la constante de extinción k , su espectro es más acorde con el material ya que podemos identificar un pico de absorción bien definido, por lo que nos ratifica que este es el modelo óptimo para caracterizar la lámina de este material. Ver figura 5.37.

Los parámetros básicos de la capa como parámetros del modelo para este ajuste, son los que se muestran en la tabla 5.13. El gap óptico para este modelo con tres transiciones es de aproximadamente 1,5 eV; ver figura 5.38. La literatura reporta valores de gap para esta lámina de 1,26 a 1,54 eV⁵⁸.

Tabla 5.13 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina semiconductor *tipo p* (CIGS) sobre un sustrato de vidrio.

<i>Espesor (d)</i>	<i>Desacoplo</i>	<i>Rugosidad</i>
373.334993859635	0.0113343	0.00890478

<i>n(infinito)</i>	<i>Eg</i>
2.32783	-2.51448

<i>I</i>	<i>E0</i>	<i>gam</i>
0.00139175	0.445724	0.736115
0.000421034	1.74352	0.890346
0.0046488	2.93027	3.49582

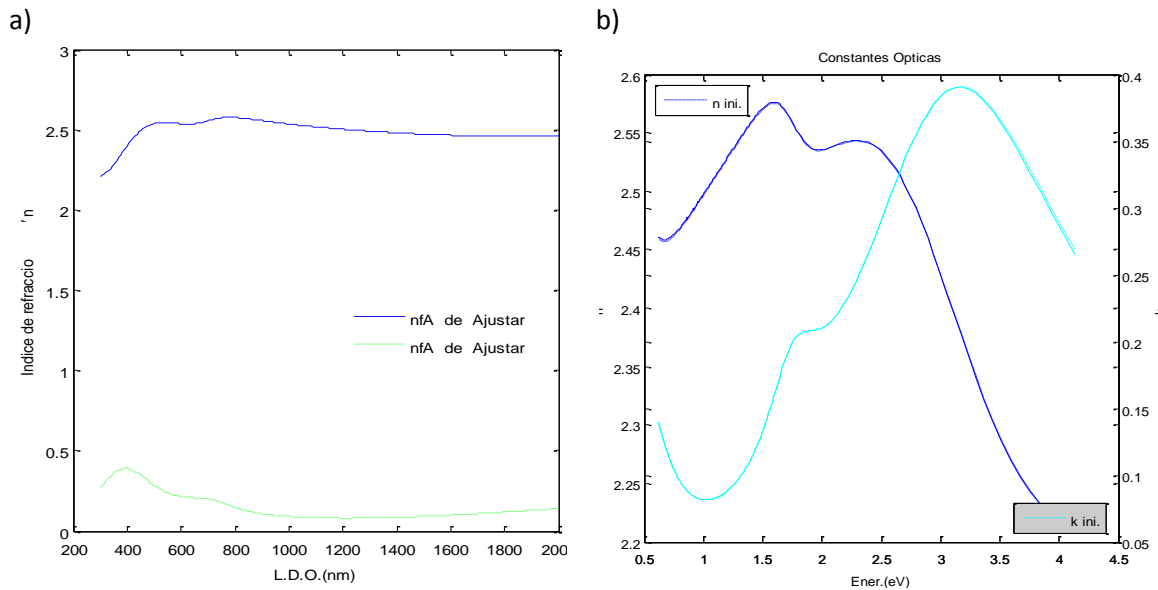


Figura 5.37 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nFA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

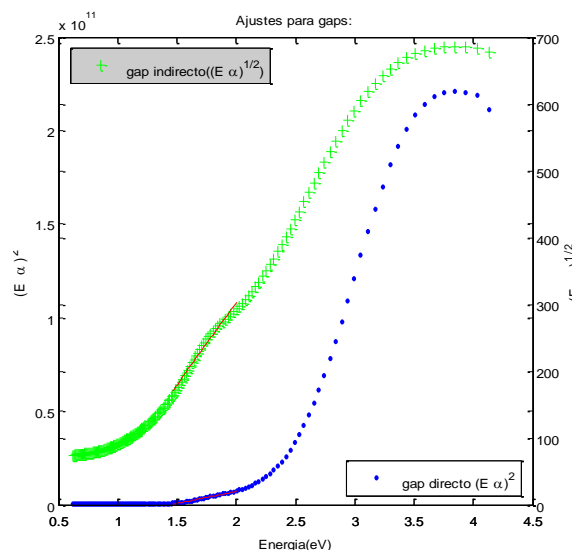


Figura 5.38 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con tres transiciones.

5.3.3.3 Ajuste con cuatro transiciones.

La figura 5.39 representa los espectros de transmitancia, reflectancia y reflectancia trasera experimentales de una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo FB utilizando cuatro transiciones.

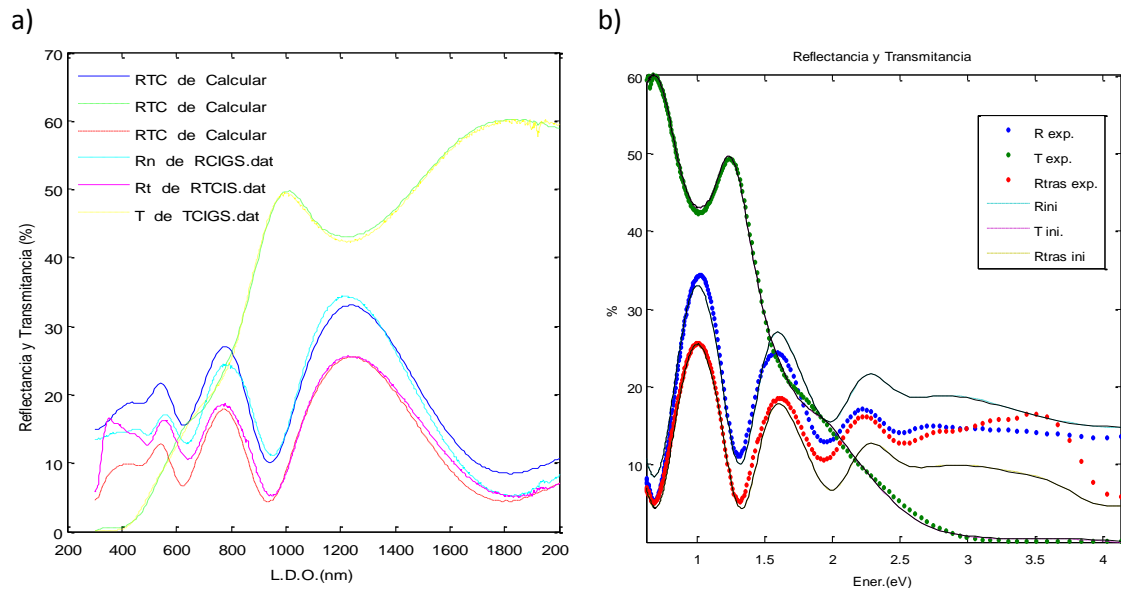


Figura 5.39 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

Cuando ajustamos con cuatro transiciones, el espectro de transmitancia mejora aún más que los dos anteriores, sin embargo para los demás espectros, presenta resultados muy similares al anterior ajuste donde para energías de fotón mayores a 2eV, se mantiene la separación de los espectros de reflectancia ajustados y simulados con los experimentales. El espesor aumenta a 375,9nm, y aparece un nuevo punto de absorción que se encuentra en el rango del espectro de las constantes ópticas. Ver figura 5.40.

Los parámetros básicos de la capa como parámetros del modelo para este ajuste, son los que se muestran en la tabla 5.14. El gap óptico para este modelo con cuatro transiciones es de aproximadamente 1,5 eV. Ver figura 5.41. La literatura reporta valores de gap para esta lámina de 1,26 a 1,54 eV⁵⁸

Tabla 5.14 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio.

Espeor (d)	Desacoplo	Rugosidad
375.908156748519	0.0173436	0.0122223

$n(\text{infinito})$	E_g
2.32028	-2.29427

I	E_0	gam
0.00147013	0.463998	0.665548
0.000489737	1.74133	0.874562
0.00499623	2.94281	3.41141
3.32058e-005	1.09518	0.29098

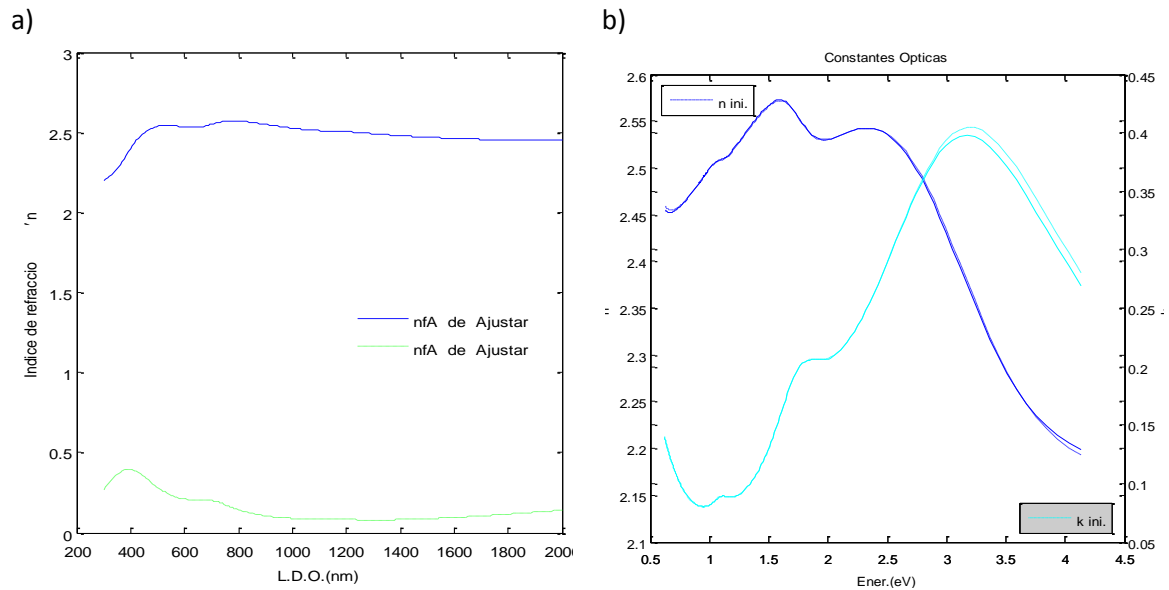


Figura 5.40 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

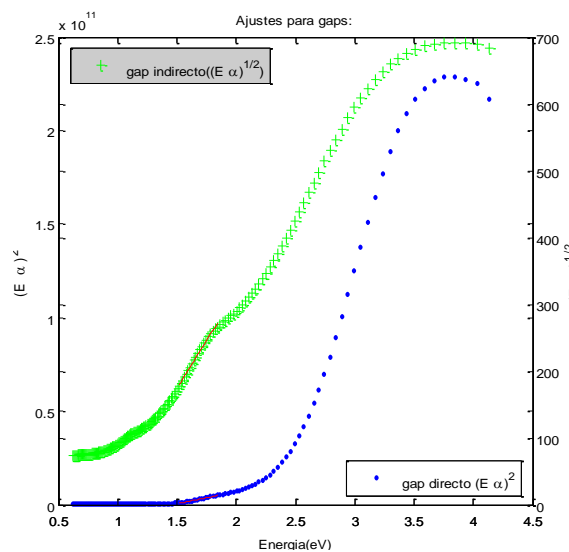


Figura 5.41 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con cuatro transiciones.

5.3.3.4 Ajuste con cinco transiciones.

La figura 5.42 representa los espectros de transmitancia, reflectancia y reflectancia trasera experimentales de una lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio, junto con los espectros ajustados y simulados con los parámetros ópticos estimados por el modelo FB utilizando cinco transiciones.

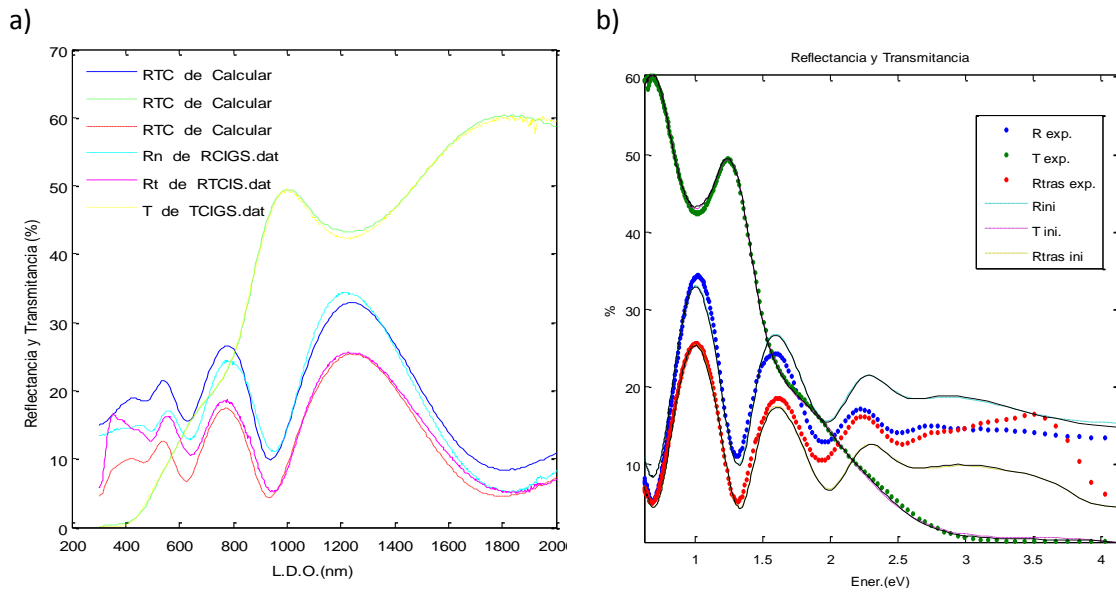


Figura 5.42 – Espectros de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia y reflectancia trasera) de una lámina absorbente (CIGS) sobre sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y los demás son los experimentales; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

Ajustamos con cinco transiciones y los resultados son similares que cuando utilizamos cuatro transiciones ver gráfico 5.42, lo diferente es que aumenta el espesor de la lámina y lógicamente aparece un nuevo punto de absorción en el espectro de extinción k , que se puede aceptar ya que se encuentra dentro del rango de medida de los espectros de las constantes ópticas ver gráfico 5.43; más sin embargo los espectros de reflectancia no presentan cambios.

Los parámetros básicos de la capa como parámetros del modelo para este ajuste, son los que se muestran en la tabla 5.15. El gap óptico para este modelo con cinco transiciones es de aproximadamente 2,5 eV; ver figura 5.44. . La literatura reporta valores de gap para está lámina de 1,26 a 1,54 eV⁵⁸

Tabla 5.15 - Valores de los parámetros básicos y parámetros ajustados por el modelo Forouhi–Bloomer, para una lámina semiconductor *tipo p* (CIGS) sobre un sustrato de vidrio.

Esesor (<i>d</i>)	Desacoplo	Rugosidad
379.17585510	0.024764	0.0140638

<i>n</i> (infinito)	<i>E_g</i>
2.3094	-2.26272

<i>I</i>	<i>E₀</i>	<i>gam</i>
0.00130643	0.476087	0.549172
0.000893356	1.65563	1.32133
0.00504668	3.02228	3.5631
3.54808e-005	1.10137	0.291343
-0.000141408	1.39592	0.483117

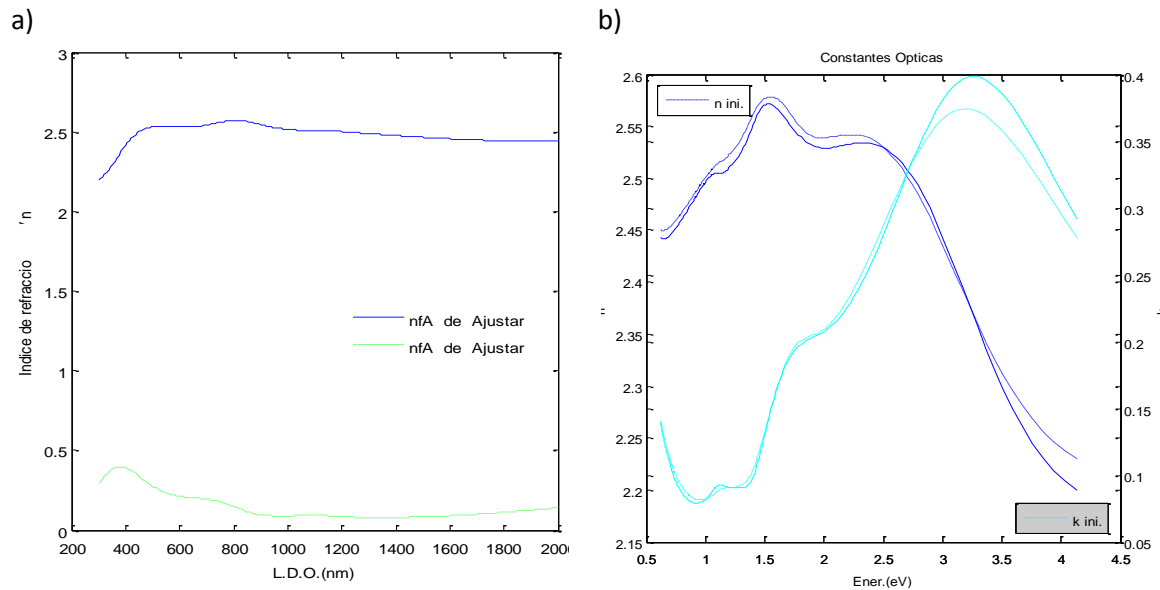


Figura 5.43 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una película de lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio en el rango entre 300nm y 2000nm, donde: (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros iniciales.

Las transiciones en 1,6 y 3,02eV parecen intrínsecas del material, mientras que la absorción en 0,47eV está por debajo del gap y puede tratarse de una absorción por portadores libres ó defectos. El resto son artefactos del ajuste. El resultado es similar al que presentamos ajustando sólo con tres transiciones.

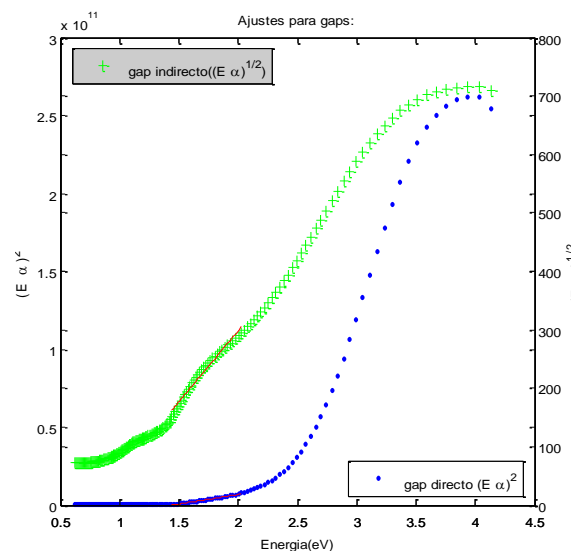


Figura 5.44 – Grafico de Tauc que determina el gap ópticos de la lámina absorbente (CIGS) sobre un sustrato de vidrio por medio del modelo de ajuste de Forouhi–Bloomer con cinco transiciones.

5.3.4 Análisis de resultados de constantes ópticas ajustadas de una lámina de CIGS.

En la figura 5.45 observamos los resultados obtenidos para las constantes ópticas de la lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre, por los tres modelos de ajuste del software OPTICA.

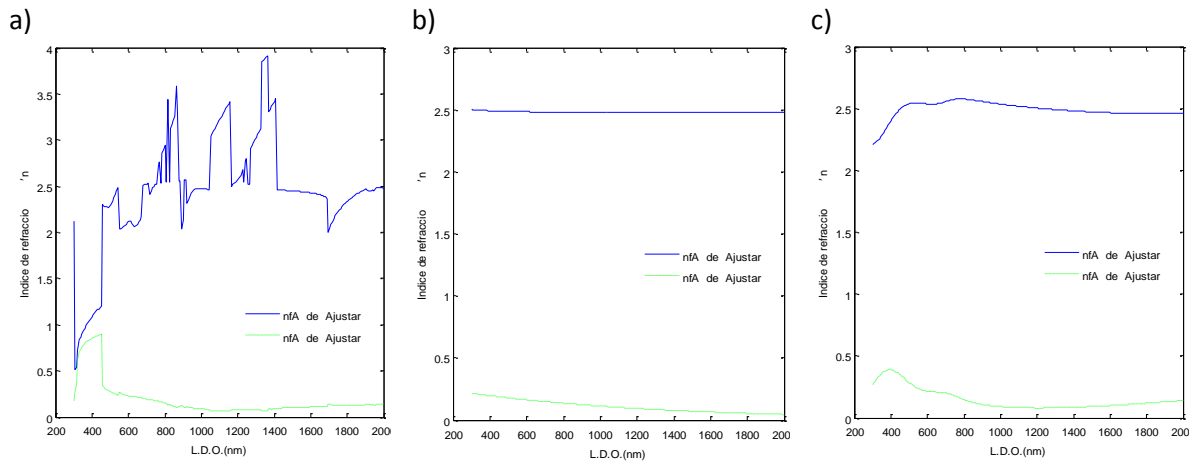


Figura 5.45 – Espectros de constantes ópticas (índice de refracción n – índice de extinción k) de una lámina de Cobre-Indio-Galio-Azufre (CIGS) en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo PAP;(b) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo WD; (c) valores de constantes ópticas ajustadas por el modelo FB. Donde las líneas etiquetadas con nfA son los espectros ajustados y los demás son los iniciales.

Para esta lámina, que se puede utilizar como capa absorbente, notamos la diferencia en ajustar con los tres modelos del software. El primer modelo (PAP) identificamos el mismo comportamiento que con la anterior lámina en donde la solución o resultado de las constantes ópticas presenta demasiado ruido, por lo que no la tomaremos, solo la tendremos como referencia; el ajuste con el modelo WD nos caracteriza bien la lámina en la parte transparente del espectro, sin embargo la parte de absorción no presenta los resultados óptimos (No obtenemos valores precisos de absorciones). Debido a que los dos modelos anteriores no proporcionan un resultado satisfactorio, el modelo FB sí nos proporciona resultados con sentidos físicos y datos reales. Ajustamos con todas las transiciones posibles para los parámetros del modelo e identificamos que cuando caracterizamos con tres transiciones es cuando mejor respuesta obtenemos, ya que tanto la parte transparente como la absorbente de los espectros de las magnitudes y constantes son los óptimos, además los valores de los parámetros son los más realistas. Identificamos que con mayor número de transiciones existe mayor número de absorciones, pero algunas son circunstanciales y no del mismo material ya que toman valores próximos en energía.

5.4 Simulación de célula comercial fotovoltaica (CIS).

Para completar el capítulo experimental de esta memoria, seleccionamos la célula comercial fotovoltaica SuperCell (CIS) Fabricada en Estados Unidos, utilizada en varias aplicaciones para sistemas de telecomunicaciones, en donde representaremos su espectro de reflectancia (pues la transmitancia es nula) medido con un espectrofotómetro de Perkin Elmer lambda9 en un rango de longitudes de onda de 300nm y 2000nm. Estas medidas experimentales las utilizaremos para identificar los posibles espesores de cada una de las capas que conforman esta célula por medio del software OPTICA, como también las posibles rugosidades de cada una de ellas; para luego simular las supuestas capas con los valores de espesores, rugosidades ajustadas y contrastarlos con las medidas experimentales.

La célula fotovoltaica bajo estudio, por teoría estimamos que consta de aproximadamente cinco capas, en las que están una capa antirrefleitora (ITO), capa ventana semiconductor *tipo n* (CdS), capa absorbente semiconductor *tipo p* (CIS), capa metálica (Mo) y un sustrato.

5.4.1 Análisis de espectros de magnitudes ópticas y parámetros básicos de las capas de una célula comercial fotovoltaica CIS por medio de OPTICA.

Para el análisis de los espectros de las magnitudes ópticas simulados junto con los experimentales y lograr que sean los más cercanos posibles, ajustaremos los parámetros básicos (espesor y rugosidad) de cada capa de la célula que por teoría estimamos su composición; para luego encontrar los valores más apropiados para que las simulaciones sean similares a los valores reales. Estimaremos valores iniciales de espesores y rugosidades de cada capa, para luego realizar las aproximaciones necesarias y lograr espectros simulados óptimos. El espectro que ajustaremos será el de la reflectancia ya que este tiene toda la información de la célula, el de transmitancia siempre valdrá cero por lo que no lo tendremos en cuenta en nuestros ajustes

5.4.1.1 Simulación con valores iniciales teóricos.

En la figura 5.46 observamos el espectro experimental de la reflectancia de la célula fotovoltaica, junto con la primera simulación magnitudes ópticas calculadas con OPTICA del conjunto de capas de célula. Los valores de los parámetros de cada capa se basan en la teoría y conocimientos de esta clase de células. Ver tabla 5.16

Tabla 5.16- Valores iniciales de los parámetros básicos para una célula fotovoltaica CIS

	<i>Material</i>	<i>Espesor (nm)</i>	<i>Rugosidad</i>
<i>Capa 1</i>	ITO	1468	0
<i>Capa 2</i>	CdS	50	0
<i>Capa 3</i>	CIS	1000	0
<i>Capa 4</i>	Mo	367	0
<i>Capa 5</i>	Vidrio	3000000	0

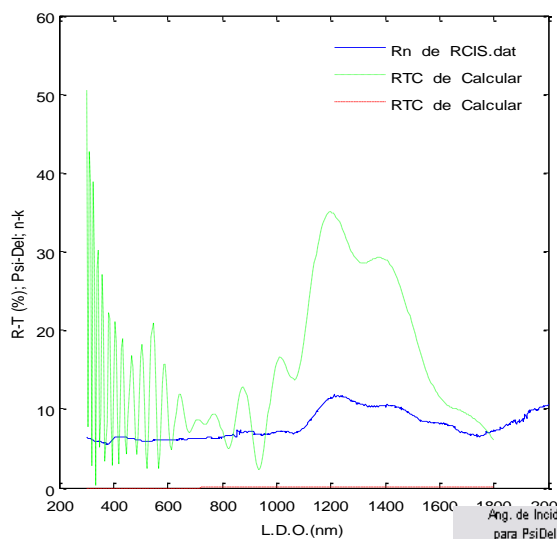


Figura 5.46 – Espectros iniciales de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia) de una célula fotovoltaica CIS en el rango entre 300nm y 2000nm, donde está con respecto a una longitud de onda, donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y el otro es el espectro experimental.

Podemos observar que los espectros de reflectancia simulado con estos valores iniciales presentan soluciones con amplias oscilaciones en las zonas ultravioleta, visible del espectro y alejadas en la zona de infrarrojo, con respecto al espectro experimental, por lo que debemos ajustar los valores de espesor junto con la rugosidad de cada capa ya que el valor inicial de estas rugosidades es cero y por consecuencia de esto observamos que el espectro de reflectancia posee un mayor porcentaje que el experimental.

5.4.1.2 Simulación con ajuste de espesores para cada capa (primera aproximación)

En principio tomamos los valores iniciales de la primera simulación, los ajustamos con OPTICA con rugosidades nulas, pero el resultado no mejora, por lo que seleccionamos los valores ya ajustados de espesores y colocamos valores de rugosidades para cada capa diferentes de cero, debido a que esta clase de células presentan rugosidades en sus capas para poder captar la mayor cantidad de energía, el primer resultado del ajuste de primera aproximación de espesores es el mostrado en la figura 5.47 con los valores de espesores y rugosidades de la tabla 5.17.

Tabla 5.17 - Valores de primera aproximación de los parámetros básicos para una célula fotovoltaica CIS.

	<i>Material</i>	<i>Espesor (nm)</i>	<i>Rugosidad</i>
<i>Capa 1</i>	ITO	1465.42622634577	20
<i>Capa 2</i>	CdS	50.2142924133145	50
<i>Capa 3</i>	CIS	-5.99681813397442	30
<i>Capa 4</i>	Mo	716.186577411207	60
<i>Capa 5</i>	Vidrio	3341581.93898957	0

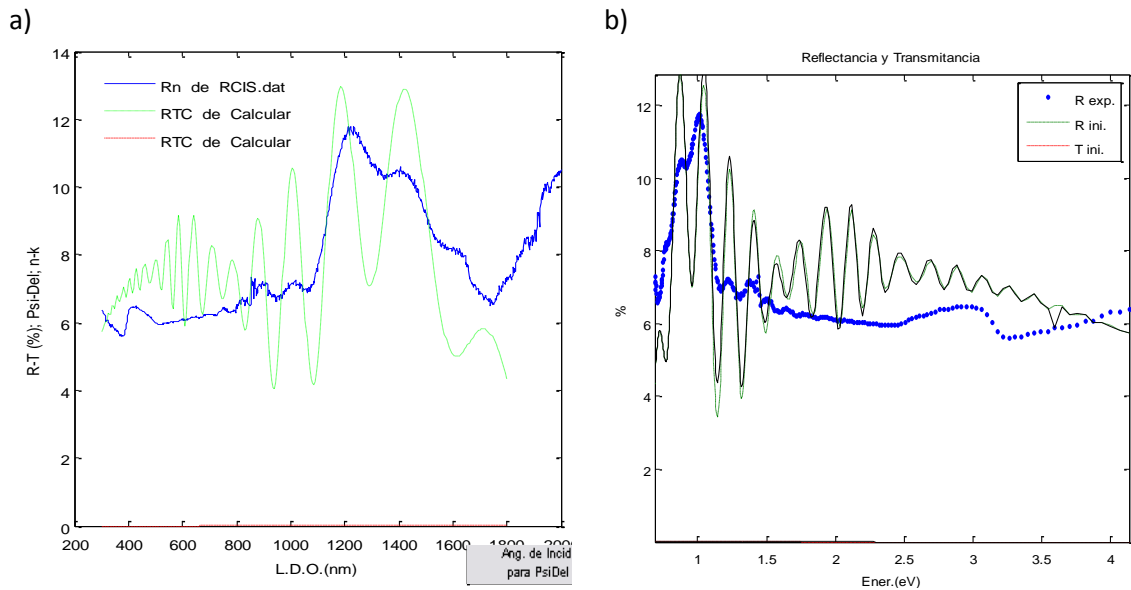


Figura 5.47 – Espectros en primera aproximación de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia) de una célula fotovoltaica CIS en el rango entre 300nm y 2000nm, donde (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y el otro es el experimental; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los otros son los espectros experimental e iniciales.

El ajuste de espesores con rugosidades se aproxima un poco más a los valores experimentales como lo podemos ver en la figura 5.47, aunque la respuesta sigue siendo no buena pero nos da una idea de que la mayoría de capas de esta célula fotovoltaica posee rugosidades para atrapar los fotones que los materiales no pueda absorber y así proporcionar una mejor eficiencia del conjunto de capas. Tomando como referencia las rugosidades, la segunda aproximación se basará en este parámetro.

Los espesores de las capas más gruesas y rugosas (Vidrio, CIS) no pueden averiguarse a partir del ajuste de la reflectancia, pero identificamos que los espesores de las capas externas (capas ventana y contactos) si es posible averiguar su espesor con el ajuste de la reflectancia.

5.4.1.3 Simulación con ajuste de rugosidades para cada capa (segunda aproximación).

Para esta simulación redondeamos algunos valores de espesores, como también cambiamos otros porque cuando se ajustan dan valores incoherentes como lo comentamos en el anterior ítem; únicamente ajustamos las rugosidades de cada capa, en la figura 5.48 se puede observar el resultado de la magnitud óptica de la reflectancia comparada con el valor experimental, en la tabla 5.18 observamos los valores de rugosidades para cada capa.

Tabla 5.18 - Valores de segunda aproximación de los parámetros básicos para una célula fotovoltaica CIS.

	Material	Espesor (nm)	Rugosidad
Capa 1	ITO	1467.1	24.5798
Capa 2	CdS	53.2	65.5893
Capa 3	CIS	500	44.1055
Capa 4	Mo	300	54.6135
Capa 5	Vidrio	3000000	0

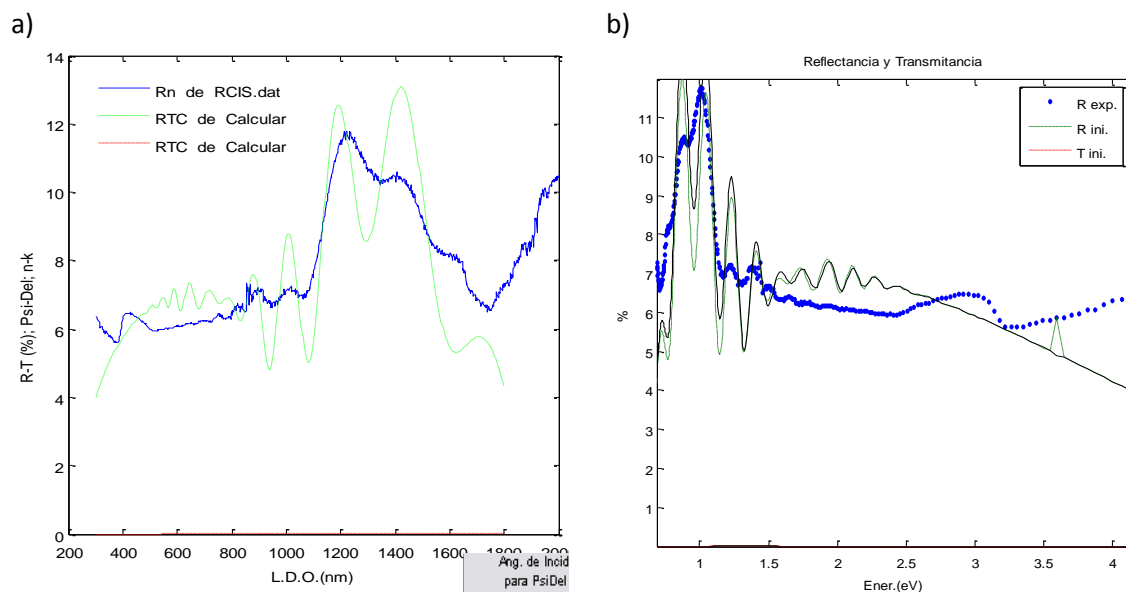


Figura 5.48 – Espectros en segunda aproximación de magnitudes ópticas (reflectancia, transmitancia) de una célula fotovoltaica CIS en el rango entre 300nm y 2000nm, donde (a) está con respecto a una longitud de onda donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y el otro es el experimental; (b) con respecto a la energía del fotón, donde las líneas continuas son los espectros ajustados y los demás son los espectros experimentales e iniciales.

Con este ajuste de rugosidades, identificamos que la reflectancia simulada se acerca un poco más a los valores de la experimental en el rango de 400nm a 1000nm que es donde mejor desempeño tienen esta clase de células, más sin embargo sigue existiendo diferencias, finalmente esta simulación proporciona información importante sobre la célula tal que ratifica la teoría de su composición, como también ratificamos que parámetros como espesor y rugosidad cumplen un gran papel en la elaboración de células fotovoltaicas.

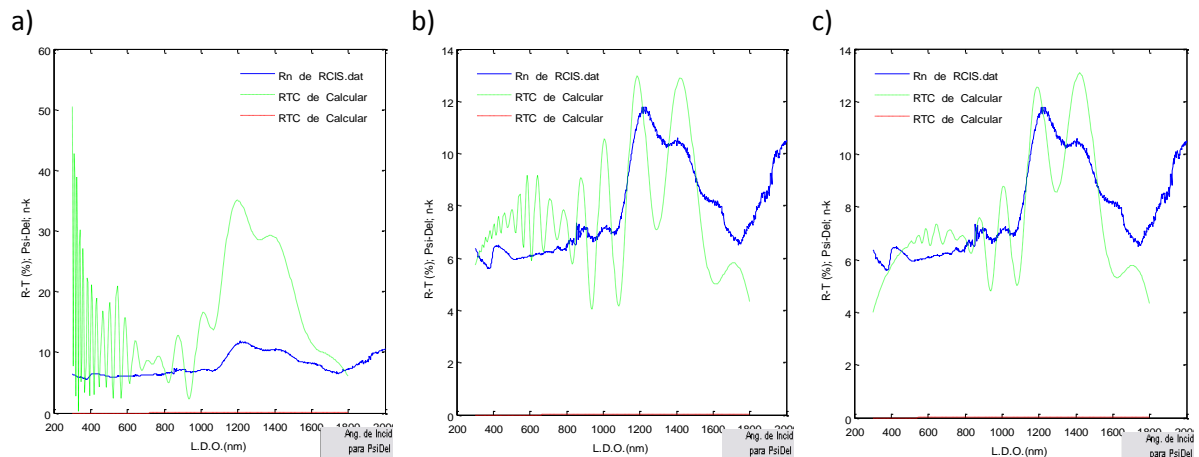


Figura 5.49 – Espectros de reflectancia de una célula fotovoltaica comercial (CIS) en el rango entre 300nm y 2500nm, donde: (a) simulación de reflectancia con valores iniciales;(b) simulación de reflectancia con valores de primera aproximación; (c) simulación de reflectancia con valores de segunda aproximación. Donde las líneas etiquetadas con RTC son los espectros simulados y el otro es el espectro experimental.

En la figura 5.49, observamos la evolución la simulación de reflectancia de la célula comercial CIS con respecto a la medida experimental; identificamos la mejoría del resultado de segunda aproximación (figura 5.49c) con respecto al de valores iniciales (figura 5.49a), como mencionamos con anterioridad, esa mejoría del espectro simulado se debe al ajuste de rugosidades en cada una de las capas.

Las oscilaciones de la capa teórica de CdS necesitan ser atenuadas, probablemente se debe a que las constantes ópticas de este cristal que utilizamos, sean lo menos realista de todo el conjunto de capas de la célula fotovoltaica.

El resultado de esta simulación no es un muy buen ajuste de la reflectancia de la célula fotovoltaica CIS estudiada, aunque es un buen punto de partida para sucesivas aproximaciones, ya que no se disponía de medidas experimentales de varias de las capas que componen la célula, porque como lo comentamos anteriormente es una célula comercial.

Cuando medimos magnitudes ópticas de una célula comercial fotovoltaica para luego simular dichas magnitudes y poder identificar los parámetros básicos de las capas de esta célula, por los resultados que obtuvimos aprendimos que las células reales precisan de la simulación realista de fuertes procesos de dispersión de la luz producida por una gran rugosidad interna. Esta rugosidad interna es intencionada y se diseña en función de la optimización de un proceso de recolección de luz

IV. Conclusiones y trabajos futuros.

6 Conclusiones.

Debido al desarrollo de este proyecto, se ha adquirido amplio conocimiento sobre caracterización de materiales semiconductores con aplicaciones fotovoltaicas, así como también sobre el funcionamiento de una herramienta de simulación que nos permite llevar a cabo la tarea de caracterización.

El objetivo pretendía realizar un aporte al desarrollo de la tecnología fotovoltaica como soporte de alimentación a sistemas de telecomunicaciones en zonas rurales, por medio de la caracterización de nuevos materiales semiconductores, basándonos en la implementación de una herramienta simuladora capaz de realizar estas funciones.

Finalizado este proyecto, podemos afirmar, que la caracterización de nuevos materiales, utilizando la herramienta de simulación OPTICA, presenta resultados satisfactorios. De igual forma en el estudio en profundidad de las características ópticas de láminas semiconductoras, como también de sistemas de múltiples capas que pueden asemejarse a células fotovoltaicas reales. También presenta resultados satisfactorios cuando intentamos caracterizar ópticamente por medio de modelos físicos, nuevos materiales de los que conocemos solamente las medidas espectrofotométricas realizadas. Por último cuando se desea realizar un ajuste de una magnitud óptica como la reflectancia de una célula fotovoltaica real de capa delgada, el resultado no está lejos de ser un muy buen ajuste, siendo un punto de partida esperanzador para sucesivas aproximaciones.

Los resultados obtenidos en este proyecto sobre las láminas caracterizadas, son alentadores, debido a las ventajas encontradas a nivel de eficiencia óptica, coste, cuidado del medio ambiente y peso en general debido al hecho de trabajar con láminas delgadas. En consecuencia el estudio realizado es base y podrá servir como punto de partida para próximas investigaciones en esta área de aplicación.

Uno de los mayores atractivos, que nos motiva a seguir desarrollando y perfeccionando la herramienta de simulación OPTICA, es que aun existiendo programas de uso público con capacidades de simulación muy generales, la característica diferenciadora y fundamental que inspira el diseño de óptica, es la máxima funcionalidad en el análisis frecuente de medidas fotométricas de películas delgadas.

El presente proyecto final de máster, materializa con esta herramienta de simulación una opción muy atractiva que contribuye al desarrollo de la tecnología de energía solar fotovoltaica para aplicaciones en sistemas de telecomunicaciones rurales. Que la información expuesta en esta memoria sea base para futuros proyectos de investigación en estas áreas.

7 Trabajos futuros.

Para dar continuidad al trabajo de este proyecto, identificamos algunas líneas futuras que podrían desarrollarse:

Contar con herramientas de simulación para el diseño de una aplicación determinada, es de gran ayuda en el campo de la ingeniería. Estas herramientas nos permiten realizar diseños básicos o con ciertos grados de complejidad para poder ubicarlos en un escenario virtual, muy similar al real, e identificar su funcionamiento, posibles fallos o mejoras. La posibilidad de presentar un simulador de diseño de células solares fotovoltaicas para aplicaciones en ingeniería (donde se simulen características ópticas y eléctricas de células fotovoltaicas) sería una herramienta muy útil, ya que cada disciplina podría diseñar sus propias células según la necesidad y aplicación que necesiten.

Perfeccionar en el programa OPTICA, el cálculo de los procesos de difusión que permita simular perfiles fiables de absorción de luz en el interior de cada capa. Sería un primer paso (simulación de generación de portadores) a completar con una simulación muy desarrollada del comportamiento eléctrico de los semiconductores con objeto de calcular la corriente extraída de una célula simulada. De esta forma la herramienta tendría la capacidad de realizar optimización de los diseños previos a la fabricación de células.

El campo de los simuladores ópticos y de comportamiento eléctrico de los semiconductores tiene aún mucho recorrido, pues hasta ahora todos los diseños están optimizados para una condición: Máxima producción eléctrica en condiciones de iluminación solar óptima. Pero recientemente han aparecido nuevas aplicaciones con nuevos condicionantes. Tal es el caso de, las nuevas células orgánicas, no tan eficientes en condiciones de iluminación solar óptima, pero sí muy eficientes recogiendo luz en interiores (Luz artificial o filtrada) permitiendo así alimentar pequeños dispositivos autónomos.

8 Bibliografía.

- ¹ Asamblea general del 16 de febrero de 2011, Publicación de Naciones Unidas, <http://www.un.org/es/comun/docs/?symbol=A/RES/65/151>, febrero, 2011.
- ² Sitio web del Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT), <http://www.ciemat.es>, Julio, 2012.
- ³ Sitio web de la Organización de las Naciones Unidas, <http://www.un.org/es> julio, 2012.
- ⁴ Objetivos de desarrollo del milenio, informe 2010. Publicación del departamento de Asuntos Económicos y Sociales de las Naciones Unidas, Junio, 2010.
- ⁵ E. García, J. Oria, J. Ayats, *Energía, participación y sostenibilidad*, Ingeniería sin fronteras, febrero, 2006.
- ⁶ C. Escudero, *PFC: Instalación fotovoltaica aislada para torres de comunicaciones*, Universidad Politécnica de Catalunya. junio, 2010.
- ⁷ *Energía Solar Fotovoltaica*, Grupo NAP, Colegio Oficial Ingenieros de Telecomunicaciones, 2002.
- ⁸ *Componentes de una instalación fotovoltaica*, McGrawHill, 2002.
- ⁹ M.A. Green. *Solar cells-Operating Principles, Technology and SystemApplications*, Published by The University of New South Wales Australia, (1996).
- ¹⁰ *Renewable Energy World. Photovoltaic technology, performance manufacturing, cost and markets*, pp. 62. Renewable Energy World, James & James (Science Publishers) Ltd, (1999).
- ¹¹ M.A. Stan, D.J. Aiken, P.R. Sharps, N.S. Fatemi, F.A. Spadafora, J.Hills. *27.5% Efficiency InGaP/InGaAs/Ge advanced triple junction(ATJ) space solar cells for high volume manufacturing*, Proc. 29th. IEEE PVSC, (2002).
- ¹² A.W. Bett, *Development of GaInP/GaAs Tandem Solar Cells on anIndustrial Size MOVPE Reactor*, 16th.European Photovoltaic SolarEnergy Conference and Exhibition, Glasgow, United Kingdom, (2000).
- ¹³ A.F. Hepp, S.G. Bailey, R.P. Raffaele, *Inorganic Photovoltaic Materials and Devices: Past, Present and Future*, NASA/TM—213341, (2005).
- ¹⁴ S.S. Sun, N.S. Sariciftici, *Organic Photovoltaics. Mechanisms, Materialsand Devices*, CRC Press. (2005).
- ¹⁵ A. Gregg, R. Blieden, A. Chang, H. Ng, *Performance Analysis of Large Scale, Amorphous Silicon Photovoltaic Power Systems*, 31st IEEE, Photovoltaic Specialist Conference and Exhibition, Lake Buena Vista, Florida USA, (2005).
- ¹⁶ B.S. Richards, K.R. McIntosh, *Enhancing the Efficiency of Production of CdS/CdTe PV Modules by Overcoming Poor Spectral Response at Short Wavelengths Via Luminescence Down-Shifting*, 4th World Conference IEEE Photovoltaic Energy Conversion, vol. 1, pp.213, (2006).

-
- ¹⁷ R. Noufi, K. Zweibel, *High- Efficiency CdTe and CIGS Thin film Solar Cells: Highlights and Challenges*, WPEC4 Conference Paper, Hawaii, (2006).
- ¹⁸ H.-W. Schock, R. Noufi, *CIGS-based solar cells for the next millennium* Progress in Photovoltaics: Research and Applications, vol. 8, pp. 151, (2000).
- ¹⁹ B. Dimmlera, R. Wachter, *Manufacturing and application of CIS solar modules*, Thin Solid Films, (2007).
- ²⁰ H. Spanggaard, F.C. Krebs, *A brief history of the development of organic and polymeric photovoltaics*, Solar Energy Materials and Solar Cells, vol. 83, pp. 125, (2004).
- ²¹ M. Grätzel, *Perspectives for dye-sensitized nanocrystalline solar cells*, Progress in Photovoltaics: Research and Applications, vol. 8, 1, pp. 171- 185, (2000).
- ²² B.Drevillon, J. Perrin, R. Marbot, A. Violet y J.L. Dalby, *Rev.Sci. Instrum.* 53(7), 969,1982.
- ²³ B.Drevillon, J.Y.Parey, M.Stchakovosky,R. Benferhat, Y. Josserand y B. Schlayen, *Proc.SPIE*, 1188, 1990.
- ²⁴ Juan Francisco Trigo Escalera, *Tesis Doctoral*. Universidad Autónoma de Madrid, 1998.
- ²⁵ R.M.A Azzam y N.M. Bashara, *"Ellipsometry and Polarized Light"* (North-Holland, Amsterdam, 1977).
- ²⁶E. Pelleiter, *"Handbook of optical Constants of Solid II"*, 57. Ed: E.D.Palik (Academic. San Diego, 1991)
- ²⁷ R.E. Denton, R.D. Campell y S.G. Tomlin, *J. Phys D: Appl. Phys.* **5**, 852, 1972.
- ²⁸ E. Khawaja y S.G. Tomlin, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **8**, 581, 1975.
- ²⁹ J.L. Cisneros, G.B. Rego, M. Tomiyama, S. Bilac, J.M. Gonçalves, A.E. Rodríguez y Z.P. Argüello, *Thin Solid Films* 100, 155, 1982.
- ³⁰ Gloria Pérez Álvarez-Quiñones, *Tesis Doctoral*. Universidad Autónoma de Madrid. Junio, 2004.
- ³¹ E.D. Palik, *Handbook of Optical Constants of Solids II*, Academic Press. 1991.
- ³² D.P. Arnt, R.M.A. Azzam, J.M. Bennet, J.P. Borgono, C.K. Caniglia, W.E. Case, J.A. Dobrowolski, U.J. Gibson, T. Tuttle Hart, F.C. Ho, V.A. Hodkin, W.P. Klapp, H.A. McLeod, E. Pelletier, M.K. Purvis, D.M. Quinn, D.H. Strome, R. Swenson, P.A. Temple, T.F. Thonn, *Appl.Opt.* **23** (1984) 3571.
- ³³ J.M. Bennett, E. Pelletier, G. Albrand, J.P. Borgogno, B. Lazarides, C.K. Carnoglia, R.A. Schmell, T.H. Allen, T. Tuttle-Hart, k.h. Guenther, A. Saxer, *Appl. Opt.* **28** (1989)3303.
- ³⁴ J.M. del Pozo, L. Díaz, *Thin Solid Fims* 209. (1992) 137.
- ³⁵ R.M. Bueno, J.F. Trigo, J.M. Martínez- Duart, E. Elizalde, J.M. Sanz, *J. Vac. Sci. Technol. A* (1995) 2378.

-
- ³⁶ J.L. Hernández-Rojas, M.L. Lucía, I. Mártel, G. González-Díaz, J. Santamaría, F. Sánchez-Quesada, *Appl. Opt.* 31 (1992) 1606.
- ³⁷ A.S. Valeev, *Opt. Spectrosc.* 15 (1963) 269; A.S. Valeev, *Opt. Spectrosc.* 17 (1965) 498.
- ³⁸ J.C. Kushev, N.N. Zheleva, Y. Demakopoulou, D. Siapakas, *Infrared Phys.* 26 (1986).
- ³⁹ S. H. Wemple, M. DiDomenico Jr., *Phys. Rev. B* 3 (1971) 1338.
- ⁴⁰ S. H. Wemple, *Phys. Rev. B* 7 (1973) 3767.
- ⁴¹ H. M. Nussenzveig, *Causality and Dispersion Relations*. (Academic, New York, 1972).
- ⁴² R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids* (Wiley, New York, 1983).
- ⁴³ A. R. Forouhi, I. Bloomer, *Phys. Rev. B* 38, 3 (1988).
- ⁴⁴ J. S. Toll, Ph.D. thesis, Princeton University, New Jersey, 1952.
- ⁴⁵ *Fundamentos, dimensionado y aplicaciones de la energía solar fotovoltaica*, Serie Ponencias, Editorial CIEMAT, 2005.
- ⁴⁶ *AvaSpec operating manual*, Avantes, 2008.
- ⁴⁷ D. Hariskos, S. Spiering, M. Powalla, *Thin Solid Films* 480-481 (2005) 99.
- ⁴⁸ J.F. Trigo, B. Asenjo, J. Herrero, M.T. Gutiérrez, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 1145-1148 (2008) 92.
- ⁴⁹ B. Tell, J.L. Shay, H.M. Kasper, *Phys. Rev. B* 4 (1971) 2463.
- ⁵⁰ R. Scheer, T. Walter, H.W. Schock, M.L. Feartheiley, H.J. Lewerenz, *Appl. Phys. Lett.* 63 (1993) 3294.
- ⁵¹ S. Bandyopadhyaya, S. Chaudhuri, A.K. Pal, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 60 (2000) 323.
- ⁵² H.L. Hwang, C.L. Cheng, L.M. Liu, C.Y. Sun, *Thin Solid Films* 67 (1980) 83.
- ⁵³ Y.B. He, W. Kriegseis, B.K. Meyer, A. Polity, *Appl. Phys. Lett.* 83 (2003) 1743.
- ⁵⁴ Y. Ogawa, A. Jäger-Waldau, Y. Hashimoto, K. Ito, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 35 (1994) 157.
- ⁵⁵ J.A. Hollingsworth, K.K. Banger, M.H. C. Jin, *Thin Films* 431-432 (2003) 63.
- ⁵⁶ O. Kijatkina, M. Krunks, A. Mere, B. Mahrov, L. Dloczik, *Thin Solid Films* 431-432 (2003) 105.
- ⁵⁷ C. Sanz, C. Guillén, M.T. Gutiérrez, *Thin Solid Films* 511-512 (2006) 121.
- ⁵⁸ A. Bollero, J.F. Trigo, J. Herrero, M.T. Gutiérrez, *Thin Solid Films* 2167-2170 (2009) 517.
- ⁵⁹ A. Campa, J. Krc, J. Malmström, M. Edoff, F. Smole, M. Topic, *Thin Solid Films* 5968-5972 (2007) 515.

⁶⁰ E.B. Yousfi, T. Asikainen, V. Pietu, P. Cowache, M. Powalla, D. Lincot, *Thin Solid Films* 183-186 (2000) 361-362.