






Theoretical estimation of the conversion efficiency of a GaAsP/GaAs quantum dot intermediate band solar cell






Angel E. Obispo, Dr.¹ , Jhon Torres Huarcaya, Estudiante², Carlos Hugo Coronado Villalobos, Dr.³ , William C. Algoner, Dr.⁴ , Cristofher Zuñiga Vargas, Dr.⁵  y Juan Carlos Quispe, Mg.⁶ 
^{1,6}Universidad Tecnológica del Perú, Lima, Perú,
aobispo@utp.edu.pe

Abstract— The theoretical efficiency of a quantum dot intermediate band solar cell is estimated from a mathematical model based on the Kronig-Penney equation. The spectrum solutions for the two lowest energy states are calculated numerically using Wolfram Mathematica software. These energies determine the boundaries of the intermediate band produced by GaAs. With these results, the energy conversion efficiency is calculated. The behavior of the efficiency is analyzed based on the concentration of As, the dimensions of the quantum dot and the separation distance between them. The results obtained show an improvement in efficiency.

Keywords—Solar cell, Intermediate band, Quantum dots.

Digital Object Identifier: (only for full papers, inserted by LACCEI).
ISSN, ISBN: (to be inserted by LACCEI).
DO NOT REMOVE

Estimación teórica de la eficiencia de conversión de una celda solar de banda intermedia GaAsP/GaAs con puntos cuánticos

Angel E. Obispo, Dr.¹ , Jhon Torres Huarcaya, Estudiante², Carlos Hugo Coronado Villalobos, Dr.³ , William C. Algoner, Dr.⁴ , Cristofher Zuñiga Vargas, Dr.⁵  y Juan Carlos Quispe, Mg.⁶ 
^{1,6}Universidad Tecnológica del Perú, Lima, Perú,
aobispo@utp.edu.pe

Resumen— La eficiencia teórica de una celda solar de banda intermedia con puntos cuánticos es estimada a partir de un modelo matemático basado en la ecuación de Kronig-Penney. Las soluciones del espectro para los dos estados de más baja energía son calculadas numéricamente usando el software Wolfram Mathematica. Estas energías determinan las fronteras de la banda intermedia producida por el GaAs. Con estos resultados, la eficiencia de conversión de energía es calculada. El comportamiento de esta eficiencia es analizado en función de la concentración de As, las dimensiones del punto cuántico y la distancia de separación entre ellas. Los resultados obtenidos muestran una mejora de la eficiencia para condiciones específicas de los parámetros.

Palabras claves—Celda solar, Banda intermedia, Puntos cuánticos.

I. INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas, encontrar recursos energéticos limpios que puedan sustituir las energías provenientes de la quema de combustibles fósiles se ha convertido en un desafío para las políticas gubernamentales en la mayoría de los países del mundo, debido a la preocupación ambiental sobre la contaminación y el cambio climático global. En este contexto, las celdas fotovoltaicas son una de las tecnologías más desarrolladas y prometedoras, ya que representan la opción más beneficiosa en términos de costo, mantenimiento y simplicidad [1]. Las celdas fotovoltaicas, también conocidas como celdas solares, son dispositivos capaces de transformar la energía de la radiación solar en energía eléctrica mediante el efecto fotovoltaico [1-2]. Las celdas solares tradicionales son construidas con materiales semiconductores basados en placas de silicio, siendo las más comunes y utilizadas en la industria de la energía solar debido a su eficiencia, bajo costo de producción y durabilidad [3]. No obstante, al ser una celda de unión simple, solo es capaz de absorber los fotones incidentes que se encuentren en un cierto intervalo de longitudes de onda, mientras que otra parte se disipa como calor y el resto simplemente se pierde [4]. Esta relación entre la cantidad de energía eléctrica que se puede obtener de la celda solar y la cantidad de energía solar que incide sobre ella, es la que define a la llamada *eficiencia de la celda solar* [5], la cual, en el caso de la celda de silicio, es de aproximadamente 30% [6].

En la última década, nuevas tecnologías fotovoltaicas entraron al mercado, siempre con la consigna de ofrecer un producto que supere la eficiencia de la celda tradicional de silicio. Dentro de este grupo, existe una familia de celdas llamadas *emergentes* [7], que se caracterizan por poseer tecnologías en desarrollo y que buscan mejorar la eficiencia y reducir el costo de la conversión de la energía solar en electricidad. Solo por citar algunas, tenemos las celdas solares de perovskita [8,9], celdas solares orgánicas [10,11], celdas solares de película delgada [12,13] y, más recientemente, las celdas solares de puntos cuánticos [14,15]. Este último tipo de celda representa el objeto de estudio de este artículo. Las celdas solares de puntos cuánticos utilizan nanocristales semiconductores llamados puntos cuánticos para la conversión de la energía solar en electricidad. Estas celdas tienen el potencial de ser más eficientes y baratas que las celdas solares convencionales de silicio [16], y también pueden ser ajustadas para absorber diferentes longitudes de onda de luz solar. Esto ocurre debido a la aparición de bandas intermedias formadas por los estados adicionales creados por los puntos cuánticos. Estas bandas se posicionan entre las bandas de conducción y de valencia, y sirven como puentes energéticos para que fotones de baja energía puedan ser absorbidos por la celda, aumentando, de esta manera, la cantidad de electrones inducidos [15,16]. La máxima eficiencia alcanzada por estas celdas solares de banda intermedia fue calculada por Luque y Martí [17], llegando a obtener 63.2% de eficiencia, superando ampliamente el límite de Shockley-Queisser de 43.5% [18]. En esa misma línea, las celdas solares basadas en GaAsP (fosforo de arseniuro de galio) han despertado un creciente interés debido a su perfil de alta eficiencia ($\cong 42\%$) [19]. No obstante, con el fin de reducir costos, estas celdas requieren mezclarse con otros materiales semiconductores de bajo presupuesto.

En ese sentido, en este trabajo se considera una celda solar de banda intermedia producida por puntos cuánticos de GaAs (arseniuro de galio), inmersos en una matriz de GaAsP. Esta unión pretende obtener resultados positivos por ambos frentes, es decir, aumentar la eficiencia debido a la banda intermedia, al mismo tiempo que se reducen costos de fabricación, ya que la celda matriz de GaAsP ya no encuentra en estado puro. La metodología que se propone en esta investigación se basa en la construcción de un modelo matemático que nos permita analizar el comportamiento de la eficiencia de conversión de la

Digital Object Identifier: (only for full papers, inserted by LACCEI).
ISSN, ISBN: (to be inserted by LACCEI).
DO NOT REMOVE

energía solar en electricidad. Esto permitirá, no solo determinar el máximo potencial de eficiencia que esta celda pueda tener, sino también, determinar las condiciones en que estos picos de máximo rendimiento ocurren. Estas ideas serán desarrolladas a continuación.

II. ASPECTOS CONCEPTUALES

En esta sección, se desarrolla un modelo que describe cómo se comportan los fotoelectrones que inciden en una celda solar con una banda intermedia. La inclusión de niveles de banda intermedia en la zona de banda prohibida (o gap de energía) de una celda solar convencional tiene como objetivo reducir la cantidad de energía que necesitan los fotones que inciden en la celda. De esta forma, los fotones de baja energía pueden promover portadores de carga adicionales de manera escalonada a la banda de conducción. Este trabajo examina un modelo de celda solar que cuenta con una banda intermedia generada por la presencia de puntos cuánticos. Este tipo de celda se denomina "celda solar de puntos cuánticos de banda intermedia" (QD-IBSC, por sus siglas en inglés). En este caso específico, la QD-IBSC se compone de una secuencia de materiales semiconductores ternarios y binarios (GaAsP/GaAs) que se alternan a lo largo de las tres direcciones de los ejes coordenados, como se muestra en el diagrama de la Figura 1a.

Se parte de la premisa de que la celda solar tiene una simetría ortorrómbica, donde se considera que los puntos cuánticos de GaAs tienen una estructura cúbica de longitud L , y se encuentran distribuidos simétricamente en una celda matriz de GaAsP, separados entre sí por una distancia H en dirección a los ejes coordenados (ver Fig. 1b). Por lo tanto, se puede considerar que la estructura cristalina de esta celda solar es isotrópica.

El gap de energía E_g del $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ que compone el material de la celda matriz, puede ser modulado a través de la concentración x de As. De esta manera, la estructura de banda de la QD-IBSC con $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaAs}$ puede ser optimizada a través de la modulación del parámetro x , con la finalidad de mejorar el rendimiento del dispositivo. No obstante, para el cálculo numérico de este rendimiento, formalmente denominado *eficiencia de conversión de energía* (η), es necesario cumplir los siguientes postulados:

- se considera una celda lo suficientemente amplia y gruesa como para absorber completamente todos los fotones incidentes provenientes del sol;
- cada fotón crea solo un par electrón-hueco;
- la recombinación debe ocurrir a través de transiciones predominantemente radiativas, con la finalidad de alcanzar la eficiencia de conversión lo antes posible;
- existe absorción fotónica sin superposición entre dos de las tres bandas;
- el dispositivo debe poseer una resistencia óhmica despreciable;
- la celda solar debe ser considerada como un cuerpo negro a temperatura $T_c = 300 \text{ K}$.

- la temperatura del sol debe ser $T_s = 6000 \text{ K}$, mientras que la temperatura ambiente es $T_a = T_c = 300 \text{ K}$.

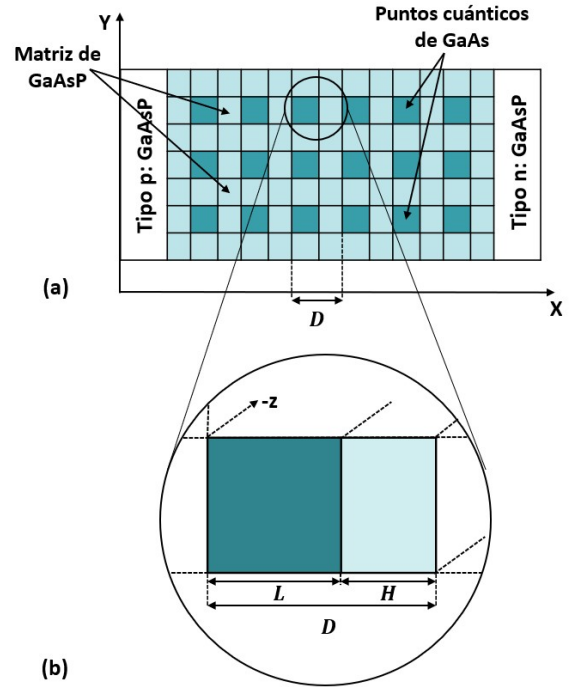


Fig. 1 Estructura ortorrómbica del QD-IBSC.

En el proceso del cálculo numérico, el gap de energía y la masa efectiva del $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ pueden ser calculados a partir del gap y la masa efectiva de los compuestos binarios GaAs y GaP. Los valores numéricos correspondientes a los parámetros físicos y químicos de estos compuestos fueron tomados de [19]. Estas expresiones son presentadas en la Tabla 1.

TABLA I
PRINCIPALES PARÁMETROS USADOS EN LA SIMULACIÓN

| Parámetros del material | $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ | GaAs | GaP |
|-------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|------------|
| Gap de energía [eV] | $1.42x + 2.78(1-x) - 0.19x(1-x)$ | 1.42 | 2.78 |
| Masa efectiva | $x \cdot m_{\text{GaAs}}^* + (1-x) \cdot m_{\text{GaP}}^* - 0.19 \cdot x \cdot (1-x)$ | $0.067m_0$ | $0.014m_0$ |
| Densidad de estados efectiva en la banda de conducción $N_c [\text{cm}^{-3}]$ | $5.6 \times 10^{19} (0.08 - 0.39x)^{1.5}$ | 2.8×10^{19} | - |
| Densidad de estados efectiva en la banda de Valencia $N_v [\text{cm}^{-3}]$ | $2.9 \times 10^{19} (0.6 - 0.18x)^{1.5}$ | 1.04×10^{19} | - |

Es importante mencionar que, según algunos estudios experimentales [14,15,16], los puntos cuánticos que se encuentran inmersos en un material semiconductor tienen la capacidad de generar niveles de energía discretos para las distribuciones de estados localizados de electrones y huecos. Es decir, dentro de una celda solar, un arreglo espaciado de material semiconductor asociado a los puntos cuánticos (atractivo, asociado a pozos potenciales) produciría estados de banda adicionales, actuando como un puente energético entre las bandas de valencia y conducción (ver Figura 2). Esta estructura actúa como la banda intermedia que se encuentra en el espacio de energía prohibida del material de la celda matriz (asociado a barreras potenciales). En el contexto de este trabajo, la región de barrera de potencial puede ser considerado como un cubo hueco de material GaAsP, el cual rodea un cubo central (punto cuántico) hecho de GaAs, asociado al pozo potencial.

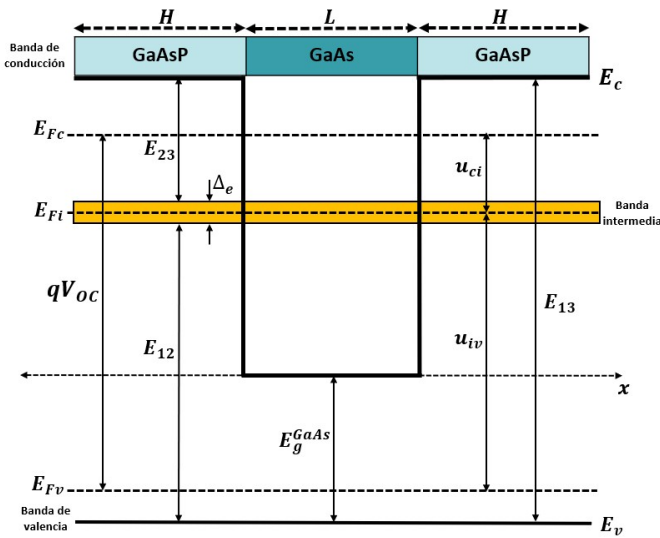


Fig. 2 Diagrama de bandas de energía de una QD-IBSC GaAsP/GaAs a lo largo de la dirección del cuasi cristal [100].

II. DESCRIPCIÓN DEL MODELO

La dinámica de los portadores de carga asociados a los estados adicionales mencionados anteriormente puede ser descrita utilizando la ecuación de Schrödinger, una ecuación fundamental en la mecánica cuántica que describe la evolución temporal de las partículas cuánticas. En este caso, la ecuación de Schrödinger se expresa en una forma específica que es relevante para describir la dinámica de los portadores en los estados discretos creados por los puntos cuánticos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \left(\frac{1}{m^*} \vec{\nabla} \right) + V(r) \right] \Psi(r) = E \Psi(r). \quad (1)$$

En la ecuación (1), \hbar es la constante de Planck reducida, mientras que m^* y E son la masa efectiva y la energía total del electrón, respectivamente. $V(r) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$ es el potencial efectivo correspondiente a la secuencia infinita de pozos potenciales (puntos cuánticos) de ancho L , los cuales se

extienden a lo largo de los tres ejes coordenados (x, y, z). Note de la Fig. 2, que estos pozos están separados por barreras de potencial de ancho H . En particular, para el eje x tenemos:

$$V_x(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } |x - n_x D| \leq L/2, \\ V_0, & \text{si } |x - n_x D| > L/2. \end{cases} \quad (2)$$

La parte del potencial efectivo correspondiente a los ejes (y, z) se expresa de manera similar a (2). Esta configuración permite suponer que la energía total del electrón es la suma de las energías obtenidas con respecto a cada eje coordenado. Es este punto, soluciones aproximadas pueden ser obtenidas usando un método numérico [20]. No obstante, el modelo de Kronig-Penny [21,22] permite obtener soluciones de la ecuación de Schrödinger (1) para el espectro de energía en una dirección específica (por ejemplo, el eje x) mediante las siguientes ecuaciones transcendentales:

- Si $E_x \geq V_0$:

$$\cos(Dq_x) = \cos(k_x^L L) \cos(k_x^H H) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_x^L m_L}{k_x^H m_H} + \frac{k_x^H m_H}{k_x^L m_L} \right) \sin(k_x^L L) \sin(k_x^H H), \quad (3)$$

- Si $0 < E_x < V_0$:

$$\cos(Dq_x) = \cos(k_x^L L) \cosh(k_x^H H) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_x^L m_L}{k_x^H m_H} - \frac{k_x^H m_H}{k_x^L m_L} \right) \sin(k_x^L L) \sinh(k_x^H H). \quad (4)$$

Las ecuaciones (3) y (4) describen, en conjunto, la dispersión de los fotoelectrones generados. Las cantidades m_L y m_H representan las masas efectivas que adopta el electrón en la región del punto cuántico (pozo) y en la región de la celda matriz (barrera), respectivamente. Además:

$$k_x^L = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_L |E_x|} \quad \text{y} \quad k_x^H = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_H |V_0 - E_x|} \quad (5)$$

En el presente estudio se ha contemplado la inclusión de una sola banda intermedia en la región del pozo potencial relacionado con el GaAs. En una celda solar ideal, la fotocorriente generada es directamente proporcional a la diferencia entre la cantidad de fotones absorbidos por el dispositivo y la cantidad de fotones emitidos del mismo. Por lo tanto, a partir del diagrama de bandas de energía presentado en la Fig. 2, es posible expresar la densidad de corriente de cortocircuito J_{sc} en una QD-IBSC de la siguiente manera:

$$\frac{J_{sc}}{|e|} = [N(E_{13}, \infty, T_s, 0) - N(E_{13}, \infty, T_c, u_{CV})] + [N(E_{23}, E_{12}, T_s, 0) - N(E_{23}, E_{12}, T_c, u_{CI})]. \quad (6)$$

Donde e es la carga elemental del electrón, u_{CV} y u_{CI} son los potenciales químicos entre la banda de conducción (E_C) y la banda de valencia (E_V), y entre E_C y la banda intermedia (BI), respectivamente. La primera expresión dentro de los corchetes en (6) representa la densidad de flujo de fotones en una celda solar convencional, la cual se genera debido a la transferencia

de fotoelectrones directamente desde la banda de valencia a la banda de conducción. En cambio, la segunda expresión entre corchetes representa la densidad de corriente producida por la transferencia de electrones desde la banda intermedia hacia la banda de conducción. De acuerdo con la fórmula de Roosbroeck-Shockley [23], este flujo de fotones $N(E_a, E_b, T, u)$ es calculado de la siguiente forma:

$$N(E_a, E_b, T, u) = \frac{2\pi}{h^3 c^2} \int_{E_b}^{E_a} \frac{E^2 dE}{\exp\left[\frac{E-u}{k_B T}\right] - 1} \quad (7)$$

Donde E_a y E_b representan los límites de energía superior e inferior, respectivamente, u es el potencial químico, c es la velocidad de la luz y k_B es la constante de Boltzmann. Por lo tanto, para determinar J_{sc} , es necesario determinar el valor de cada uno de los parámetros que aparecen en (6).

Con respecto a los potenciales químicos, de acuerdo con lo que se muestra en la Fig. 3, podemos identificar la siguiente relación:

$$qV_{oc} = u_{CV} = u_{CI} + u_{IV} \quad (8)$$

V_{oc} es el voltaje de salida y u_{CV} es el potencial químico entre las bandas de valencia y conducción. Las cantidades u_{CI} y u_{IV} pueden ser calculados a partir de las siguientes expresiones:

$$u_{CI} = E_{23} + 0.5\Delta_e - E_c + E_{FC}, \quad (9)$$

$$u_{IV} = E_{12} + 0.5\Delta_e - E_{FV} + E_v, \quad (10)$$

En las ecuaciones (9) y (10), Δ_e denota el ancho de la banda intermedia, mientras que E_{FC} y E_{FV} representan los cuasi-niveles de energía de Fermi de la banda de conducción y de valencia, respectivamente. Estos últimos pueden ser calculados de (11) y (12):

$$E_c - E_{FC} = k_B T L n \left(\frac{N_c}{n} \right), \quad (11)$$

$$E_{FV} - E_v = k_B T L n \left(\frac{N_v}{p} \right), \quad (12)$$

donde N_c y N_v son respectivamente las densidades de partículas de las bandas de conducción y de valencia que aparecen en la Tabla 1. Con respecto a la concentración de electrones (n) y huecos (p), se considera una buena aproximación asumir que:

$$n = p = \frac{10^{-5}}{(H+L)^3 - L^3}. \quad (13)$$

En este punto, es clara la importancia de determinar los valores de E_{13} , E_{12} y E_{23} , los cuales participan, tanto en el cálculo de los potenciales químicos en (9), como en la determinación de la densidad de corriente de cortocircuito J_{sc} en (6). De acuerdo con la Fig. 2, estos gaps de energía obedecen la relación:

$$E_{13} = E_{12} + E_{23} + \Delta_e, \quad (14)$$

donde E_{13} es la energía de gap E_g de la celda matriz de GaAsP. Por otro lado,

$$E_{12} = E_{GaAs} + 3E_i, \quad (15)$$

donde E_{GaAs} es la energía de gap del GaAs y E_i denota la frontera inferior de la banda intermedia. En esta notación, el ancho de banda intermedia Δ_e es definido como:

$$\Delta_e = 3(E_s - E_i). \quad (16)$$

En la ecuación anterior, E_s representa la frontera superior de la banda intermedia. El factor 3 en las ecuaciones (15) y (16) es un recordatorio de que el sistema se desarrolla en tres dimensiones espaciales (x, y, z). Los valores para E_i y E_s son obtenidos de la ecuación (4), considerando las dos soluciones con más baja energía, las cuales definen las fronteras de la banda intermedia.

Finalmente, con estos resultados, es posible calcular la eficiencia porcentual de conversión de energía fotovoltaica para una QD-IBSC, de la siguiente forma:

$$\eta = \frac{V_{oc} \cdot J_{sc} \cdot FF}{P_{in}} \times 100, \quad (17)$$

donde $P_{in} = \sigma T_s^4$ es la potencia por unidad de área de la radiación incidente proveniente del sol, la cual depende de la constante de Stefan-Boltzmann σ , y FF es el factor de llenado (caso ideal, $FF = 1$).

III. RESULTADOS Y DISCUSIONES

En este apartado se muestran los resultados obtenidos a partir de la metodología y conceptos abordados en secciones anteriores. Para eso, son requeridos los datos específicos de los parámetros asociados a la QD-IBSC con GaAs_xP_{1-x}/GaAs, los cuales se encuentran en la Tabla 1. Además, fue requerido resolver la ecuación (4) para calcular las fronteras energéticas de la banda intermedia. Ese proceso fue realizado de forma numérica usando el software Wolfram Mathematica. Otras herramientas computacionales fueron usadas en el cálculo de las soluciones, sin mostrar incidencias en los resultados.

A continuación, se muestran los resultados divididos en cuatros casos particulares.

A. Efecto de la distancia de separación entre puntos cuánticos sobre el ancho de banda intermedia, considerando L fijo

Para este caso se analiza el comportamiento del ancho de la banda intermedia Δ_e en función de la separación H entre puntos cuánticos, manteniendo fijo el valor de $L = 3 \text{ nm}$. Se sabe, que un ancho de banda intermedio más grande permite capturar más estados localizados de fotoelectrones adicionales, lo que aumenta la densidad de corriente de cortocircuito J_{sc} . Este aumento de la densidad de corriente de cortocircuito mejora la eficiencia del dispositivo QD-IBSC. Por lo tanto, el rendimiento de la QD-IBSC se ve beneficiado por un ancho de banda intermedia más grande. La Fig. 3 nos muestra el perfil de ancho de banda para tres diferentes valores de la concentración de As, $x = 0.4, 0.5$ y 0.6 . Note que para cualquier valor de la concentración x , el ancho de banda intermedia Δ_e aumenta exponencial para valores pequeños de H . Esto significa que los

puntos cuánticos aumentan el rendimiento de la celda cuando éstos se encuentran más próximos uno del otro. Por otro lado, a medida que H aumenta (puntos cuánticos separándose), el ancho de banda disminuye, aproximándose a cero para $H > 10 \text{ nm}$. Esto quiere decir, que una celda de puntos cuánticos se comporta como una celda convencional para valores grandes de H (puntos cuánticos muy separados uno del otro). Con respecto a la concentración x , en la Fig. 3 se aprecia que solo en el intervalo $2 \text{ nm} < H < 8 \text{ nm}$, existe una variación ligeramente significativa en el ancho de banda intermedia para diferentes valores de x . En resumen, esta QD-IBSC podría mostrar un alto rendimiento si los puntos cuánticos dentro de la celda se encuentran próximos uno de los otro en un intervalo experimentalmente recomendado de $1 \text{ nm} < H < 6 \text{ nm}$.

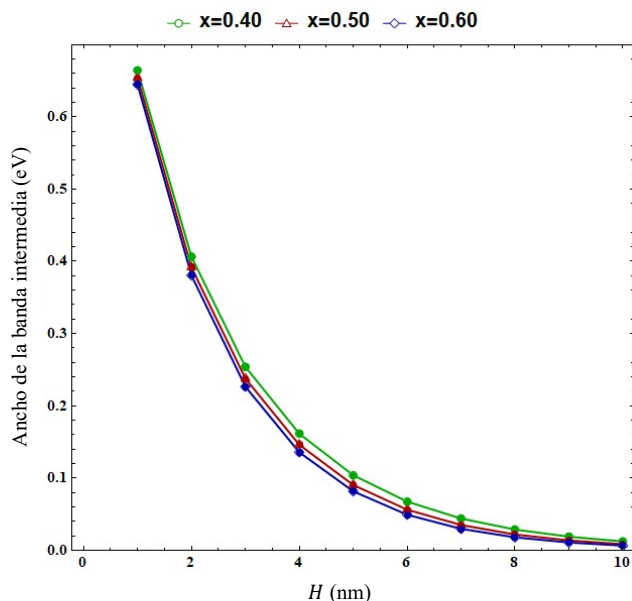


Fig. 3 Comportamiento del ancho de la banda intermedia Δ_e frente a la distancia de separación entre puntos cuánticos de GaAs, considerando $L = 3 \text{ nm}$ y concentraciones $x = 0.4, 0.5$ y 0.6 .

B. Efecto de la distancia de separación entre puntos cuánticos sobre el ancho de banda intermedia, considerando x fijo

En la Fig. 4 se analiza el comportamiento del ancho de la banda intermedia Δ_e en función de la separación H entre puntos cuánticos, manteniendo fijo el valor de la concentración $x = 0.5$. Para valores grandes de H , se mantiene el comportamiento del ancho de la banda intermedia, el cual se reduce a cero a medida que los puntos cuánticos se separan. Sin embargo, las curvas muestran una diferencia importante con respecto al caso A cuando se analiza el perfil de cada curva para valores pequeños de H y diferentes valores de L . Esto se aprecia claramente en la Fig. 3, donde, para $L = 4.0 \text{ nm}$, el ancho de banda intermedia presenta un valor significativamente mayor con respecto a $L = 6.0$ y 8.0 nm . Esto significa que el rendimiento de una QD-IBSC aumenta significativamente al disminuir las dimensiones de los puntos cuánticos.

En conclusión, a partir de los casos A y B se puede inferir que la eficiencia de la QD-IBSC de GaAsP mejoraría significativamente si se incorporan puntos cuánticos de GaAs dentro de la celda matriz, los cuales deben tener dimensiones reducidas y estar cercanos entre sí.

En los siguientes apartados, examinaremos dos casos adicionales relacionados con la eficiencia de conversión de energía definida en (17).

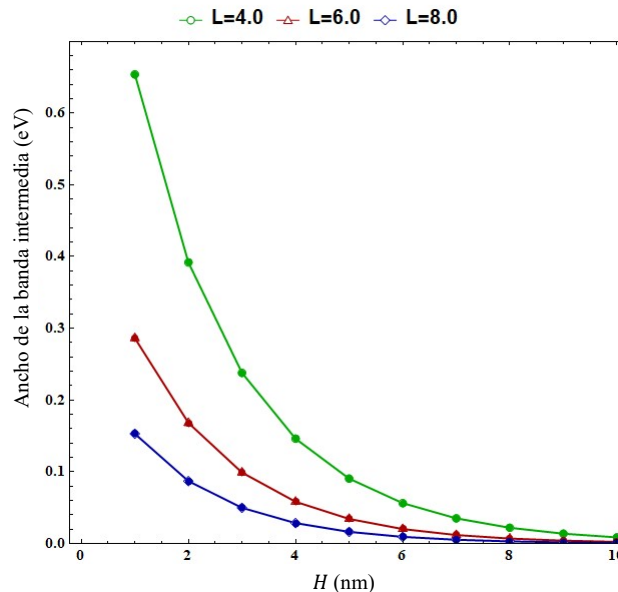


Fig. 4 Comportamiento del ancho de la banda intermedia Δ_e frente a la distancia de separación entre puntos cuánticos de GaAs, considerando $x = 0.5$ y $L = 4.0, 6.0$ y 8.0 nm .

C. Efecto de la distancia de separación entre puntos cuánticos sobre la eficiencia, considerando L fijo

En la Fig. 5 se analiza el comportamiento de la eficiencia de conversión de la energía (η) en función de la separación H entre puntos cuánticos. Se eligió nuevamente mantener fijo el valor de $L = 3 \text{ nm}$ y considerar tres valores diferentes de la concentración de As, $x = 0.4, 0.5$ y 0.6 .

Note que cada una de las curvas aumenta rápidamente con H , hasta llegar a un punto de máxima eficiencia, el cual, sorprendentemente, ocurre para el mismo valor ($H \approx 7.0 \text{ nm}$). Estos valores de máxima eficiencia son 49.8%, 53.7% y 57.8%, correspondiente a las concentraciones 0.4, 0.5 y 0.6, respectivamente, es decir, la eficiencia aumenta cuando la concentración de As aumenta, tal como se aprecia en la figura. Estos valores para la eficiencia superan a las celdas GaAsP tradicionales [19] y se aproximan a aquellos calculados por Luque y Martí [17].

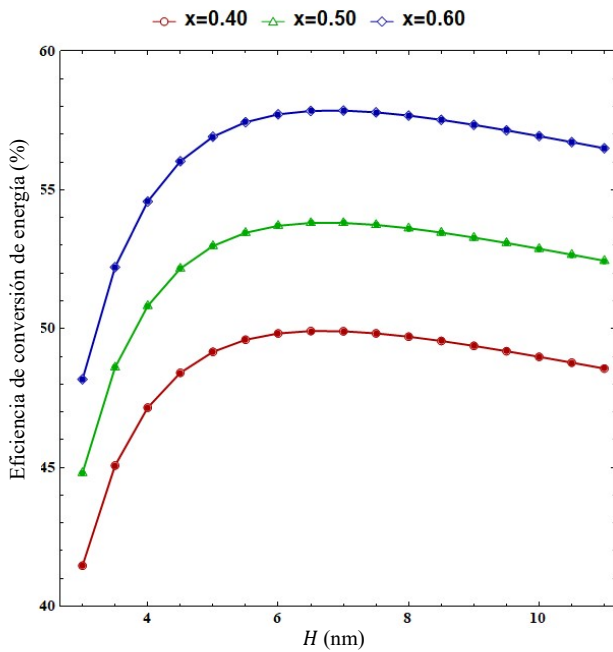


Fig. 5 Comportamiento de la eficiencia con respecto a la distancia de separación entre puntos cuánticos de GaAs, considerando $L = 0.3 \text{ nm}$ y $x = 0.4, 0.5$ y 0.6 nm .

Por otro lado, después de alcanzar su punto máximo, la eficiencia disminuye gradualmente a medida que H aumenta. Este patrón se confirma en los casos A y B , donde un aumento en el rendimiento, causado por un aumento en el ancho de banda intermedia, ocurre cuando H disminuye. Por lo tanto, se confirma una vez más que la eficiencia del QD-IBSC de GaAsP mejora cuando se introducen puntos cuánticos de GaAs cercanos entre sí. Sin embargo, el valor máximo de esta eficiencia solo se alcanza para un valor específico de H , el cual es independiente del valor de la concentración de As.

D. Efecto de las dimensiones del punto cuántico sobre la eficiencia, considerando H fijo

En este caso se estudia cómo varía la eficiencia de conversión de la energía (η) a medida que cambia las dimensiones de los puntos cuánticos (L), manteniendo el valor de H constante en 6 nm . En la Fig. 6 se muestra el perfil de la eficiencia para los tres mismos valores de la concentración x considerados en este trabajo. Se puede observar que el comportamiento de las curvas para cada una de las concentraciones es claramente contrario al del caso C , ya que la eficiencia aumenta a medida que disminuye la concentración x del As.

Además, que los picos de máxima eficiencia también se posicionan exactamente en el mismo punto, específicamente, en $L \approx 3.5 \text{ nm}$. Esto significa que la QD-IBSC de GaAsP alcanza un rendimiento maximizado si consideramos altas concentraciones de As y pequeños puntos cuánticos de GaAs. Estos valores de máxima eficiencia son

50.5%, 54.9% y 59.2%, correspondiente a las concentraciones 0.6, 0.5 y 0.4, respectivamente.

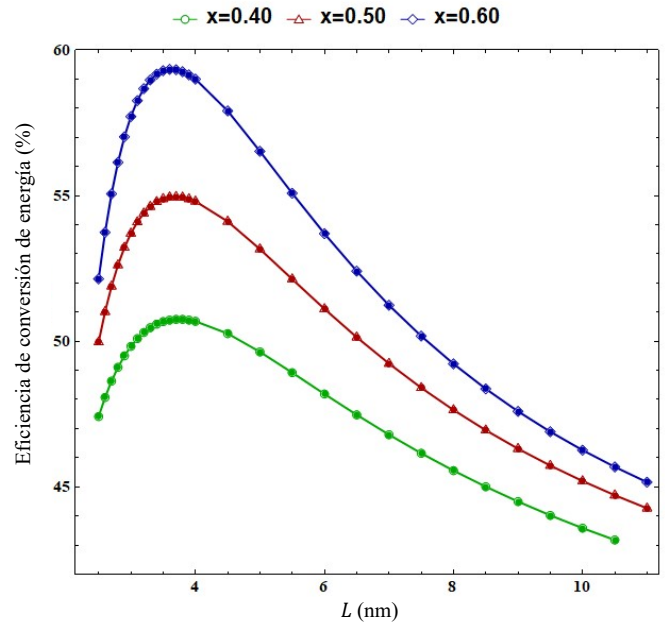


Fig. 6 Comportamiento de la eficiencia con respecto a las dimensiones de los puntos cuánticos de GaAs, considerando $H = 6.0 \text{ nm}$ y $x = 0.4, 0.5$ y 0.6 .

IV. CONCLUSIONES

La eficiencia teórica de una celda solar de banda intermedia GaAsP/GaAs con puntos cuánticos es estimada. El modelamiento de la banda intermedia se realiza a través de un modelo matemático basado en la ecuación de Kronig-Penney. La ecuación trascendental oriunda de este modelo permite calcular las dos soluciones para la energía, las cuales determinan las fronteras de la banda intermedia producida por el GaAs. Estas soluciones corresponden a los estados de más baja energía y son calculadas numéricamente usando el software Wolfram Mathematica. En los casos A y B , el perfil de la eficiencia de la QD-IBSC de GaAsP supone una mejora en el rendimiento cuando se incorporan puntos cuánticos de GaAs dentro de la celda matriz, con dimensiones reducidas y cercanos entre sí. Los resultados para la eficiencia de conversión son analizados en las Fig. 5 y 6, correspondientes a los casos C y D , respectivamente. En ambos casos, se aprecia un perfil semejante para las curvas de eficiencia, las cuales presentan picos máximos aproximándose al 60%, y cuya posición es independiente de la concentración de As.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Universidad Tecnológica del Perú, por el financiamiento para la ejecución del presente trabajo.

REFERENCIAS

- [1] G. K. Singh, "Solar power generation by PV (photovoltaic) technology: A review," *Energy*, vol. 53, pp. 1-13, 2013.
- [2] P. Rappaport, "The photovoltaic effect and its utilization," *Solar Energy*, vol. 3, no. 4, pp. 8-18, 1959.
- [3] Wenham, Stuart R., and Martin A. Green. "Silicon solar cells." *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 4.1 (1996): 3-33.
- [4] S. R. Wenham, and M. A. Green, "Silicon solar cells," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 4, no. 1, pp. 3-33, 1996.
- [5] K. A. Emery, and C. R. Osterwald. "Solar cell efficiency measurements," *Solar Cells*, vol. 17, no. 2-3, pp. 253-274, 1986.
- [6] Z. Sun, et al., "Toward Efficiency Limits of Crystalline Silicon Solar Cells: Recent Progress in High-Efficiency Silicon Heterojunction Solar Cells," *Advanced Energy Materials*, vol. 12, no.23, pp. 2200015, 2022.
- [7] O. Almora, et al., "Device Performance of Emerging Photovoltaic Materials (Version 3)," *Advanced energy materials*, vol. 13, no.1, pp. 2203313, 2023.
- [8] T. Wu, et al., "The main progress of perovskite solar cells in 2020–2021," *Nano-Micro Letters*, vol. 13, pp. 1-18, 2021.
- [9] N. S. Kumar, and K. Chandra Babu Naidu, "A review on perovskite solar cells (PSCs), materials and applications," *Journal of Materiomics*, vol. 7, no. 5, pp. 940-956, 2021.
- [10] K. Fukuda, K. Yu, and T. Someya, "The future of flexible organic solar cells," *Advanced Energy Materials*, vol. 10, no. 25, pp. 2000765, 2020.
- [11] Z. Hu, et al., "A critical review on semitransparent organic solar cells," *Nano Energy*, vol. 78, pp. 105376, 2020.
- [12] Mavlonov, Abdurashid, et al. "A review of Sb₂Se₃ photovoltaic absorber materials and thin-film solar cells." *Solar Energy* 201 (2020): 227-246.
- [13] A. Romeo, and E. Artegiani, "CdTe-based thin film solar cells: past, present and future," *Energies*, vol. 14, no. 6, pp. 1684, 2021.
- [14] A. J. Nozik, "Quantum dot solar cells," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 14, no. 1-2, pp. 115-120, 2002.
- [15] M. Albaladejo-Siguan, et al., "Stability of quantum dot solar cells: A matter of (life) time," *Advanced Energy Materials*, vol. 11, no. 12, pp. 2003457, 2021.
- [16] E-C. Cho, et al., "Silicon quantum dot/crystalline silicon solar cells." *Nanotechnology*, vol. 19, no. 24, pp. 245201, 2008.
- [17] A. Luque, and A. Marti, "Increasing the efficiency of ideal solar cells by photon induced transitions at intermediate levels," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78, no. 26, pp. 5014–5017, 1997.
- [18] M. Wiemer, V. Sabnis, H. Yuen, "43.5% efficient lattice matched solar cells," Proc. SPIE 8108, High and Low Concentrator Systems for Solar Electric Applications VI, 2011, pp. 810804–810805
- [19] A. Onno, et al., "Simulation study of GaAsP/Si tandem solar cells," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 145, pp. 206-216, 2016.
- [20] A. El Aouami, et al., "Internal polarization electric field effects on the efficiency of InN/InxGa1-xN multiple quantum dot solar cells." *Solar Energy*, col. 201, pp. 339-347, 2020.
- [21] S. Mishra, and S. Satpathy, "One-dimensional photonic crystal: The Kronig-Penney model," *Physical Review B*, vol. 68, no. 4, pp. 045121, 2003.
- [22] J. Hossain, et al., "Analytical Modeling of AlInN/GaN Quantum Dot Intermediate Band Solar Cell," *2018 International Conference on Innovation in Engineering and Technology (ICIET)*. IEEE, 2018.
- [23] J. Parrott, "Radiative recombination and photon recycling in photovoltaic solar cells," *Solar energy materials and solar cells*, vol. 30, no. 3, pp. 221-231, 1993.