# Optical Absorption and Conversion Efficiency Improvement by a QW Insertion in the Active Layer of PN Solar Cell

M.I. Vianey Aracely Candelas-Urrea <sup>a</sup>, Dr. Carlos Villa-Angulo <sup>b</sup>, Dr. Rafael Villa-Angulo <sup>c</sup>

<sup>a, b, c</sup> Instituto de Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja California, Bvld. Benito Juárez S/N, CP. 21280, Mexicali B.C, <u>vianey.candelas@uabc.edu.mx</u>, <u>villac@uabc.edu.mx</u>, <u>rafael.villa@uabc.edu.mx</u>, Mexicali, B. C., México.

## Resumen

En los últimos años la técnica de inserción de pozos cuánticos, en la zona de depleción de una celda solar de unión PN, ha sido de gran interés en el campo de la investigación teórica y experimental. El interés de esta técnica está basado en el incremento en la absorción óptica que genera la colocación, en la zona de depleción de la unión PN, de un material semiconductor con menor ancho de zona prohibida que el de la capa activa de la unión PN. Cuando el material semiconductor a insertar es adecuado la unión PN incrementa la absorción de fotones, que a su vez aumenta la generación de corriente y la eficiencia de conversión sin sacrificar el voltaje autogenerado. La diferencia entre la estructura de una celda solar convencional y una con pozos cuánticos consiste en que para el caso de una celda con QW se colocan en la zona de depleción uno o múltiples pozos cuánticos. En este trabajo, se realiza un estudio teórico de la selección del material más adecuado para colocarse como QW en una celda solar con estructura *vidrio/ITO/CdS/CdSe/Ag* para formar una vidrio/ITO/CdS/CdSe/CdSe<sub>1-x</sub>Te<sub>x</sub>/CdSe/Ag. estructura Se presentan y discuten para ambos casos los valores calculados de la tasa de generación de exitones, así como los parámetros de desempeño voltaje de circuito abierto (Voc), corriente de corto circuito (Isc), factor de llenado (FF) y eficacia de conversión (ŋ).

**Palabras clave**—Absorción óptica, Celda solar, Eficiencia de conversión, pozo cuántico, Unión PN.

## Abstract

In recent years, the technique of quantum wells insertion in the depletion zone of a PN junction solar cell has been of great interest. The interest of this technique is based on the increase in optical absorption generated by the placement, in the depletion zone of the PN junction, of a semiconductor material with a smaller bandgap than that of the active layer of the PN junction. When the semiconductor material to be inserted is suitable, the PN junction increases the absorption of photons, which in turn increases the generation of current and conversion efficiency without sacrificing the selfgenerated voltage. The difference between a conventional solar cell structure and a quantum wells solar cell structure is that in the case of a quantum wells cell in the depletion zone are collocated one or multiple quantum wells. In this work, a theoretical study is carried out on the selection of the most suitable material to be placed as QW in a solar cell of glass/ITO/CdS/CdSe/Ag structure to form a glass/ITO/CdS/CdSe/ CdSe<sub>1-x</sub>Te<sub>x</sub>/CdSe/Ag structure. The calculated exciton generation rate as well as the short-circuit voltage (Voc), short-circuit current (Isc), fill factor (FF) and conversion efficiency ( $\eta$ ) are presented and discussed for both cases.

**Keywords**— Conversion efficiency, Optical absorption, PN junction, Quantum well, Solar Cell.

# 1. INTRODUCCIÓN

Los semiconductores inorgánicos se utilizan comúnmente para fabricar materiales fotovoltaicos (PV). Los materiales fotovoltaicos se concatenan en homouniones o heterouniones para formar estructuras de dispositivo positivo-negativo (PN) o positivo-intrínseco-negativo (PIN). La función principal de estas estructuras de dispositivos es permitir la generación de portadores libres cuando la estructura se expone a la luz. De una gran cantidad de materiales semiconductores, solo unos pocos satisfacen las condiciones de absorción de luz solar. Idealmente, el material absorbente de una celda solar terrestre debería ser un semiconductor con una banda prohibida de 1 a 1.5 eV, un alto coeficiente de absorción óptica (10<sup>4</sup> -10<sup>5</sup> cm<sup>-1</sup>) en la región de longitud de onda de 350 a 1000 nm, una longitud de difusión grande, y una baja velocidad de recombinación [1]. Si se cumple la mayoría de estas condiciones y el material está ampliamente disponible, el material tiene el potencial para ser utilizado en la fabricación de celdas solares de película delgada. Aunque el silicio con una banda prohibida de 1.1 eV domina el mercado fotovoltaico, claramente no es un material ideal para la fabricación de celdas solares de película delgada debido a su banda prohibida indirecta [2]. Adicionalmente, aunque los materiales compuestos de los grupos III-V de la tabla periódica, como el arseniuro de galio (GaAs) y el fosfuro de indio (InP), con bandas prohibidas directas son ideales para aplicaciones fotovoltaicas, son demasiado caros para aplicaciones comerciales a gran escala debido al alto costo de los precursores necesarios utilizados para su deposición. Por otra parte, los materiales compuestos de los grupos II-VI de la tabla periódica, como el telurio de cadmio (CdTe), el seleniuro de cadmio (CdSe) y el sulfuro de cadmio (CdS), depositados mediante técnicas económicas a baja temperatura, poseen estructuras químicas en las que las superficies internas y externas están intrínsecamente bien pasivadas y se caracterizan por tener una baja velocidad de recombinación con exceso de portadores. Esta propiedad permite que estos materiales compuestos sean utilizados para construir estructuras de uniones múltiples con diferentes anchos de banda prohibida ayudando a recolectar el exceso de portadores y, por lo tanto, a mejorar al desempeño de celdas solares. En las celdas solares tipo PN de CdS/CdTe y CdS/CdSe la absorción de fotones es el mecanismo principal para la generación de portadores libres. Pero estas heterouniones no absorben energías menores que la energía de su banda prohibida lo que limita su eficiencia cuántica. A pesar de esta incapacidad de absorción y las pérdidas de recombinación en la interfaz CdS/CdTe y CdS/CdSe se han reportado eficiencias de conversión superior al 17 % para las celdas solares fabricadas con estas heterouniones [3, 4, 5]. Como una alternativa para aumentar la eficiencia de estas celdas solares, se han reportado celdas solares que utilizan un

pozo cuántico (OW) y múltiples pozos cuánticos en la heterounión [6, 7]. En principio, las estructuras de estas celdas solares incorporan pozos cuánticos en la zona de depleción de la unión PN para formar una estructura de pozo cuántico múltiple PN(MQW). La formación de un QW se logra insertando un material en la zona de depleción de la unión PN con un ancho de banda prohibida menor que el de la capa activa lo que genera que se incremente el espectro de absorción de la celda. En las estructuras PN(MQW), el ancho y el número de pozos cuánticos determinan el borde de absorción de fotones y la respuesta espectral de la celda solar. Por lo tanto, se puede determinar un ancho de capa absorbente óptimo en los pozos cuánticos para una alta eficiencia ajustando con precisión la posición del borde de absorción de fotones [8, 9, 10]. En este trabajo, se realiza un estudio teórico de la selección del material más adecuado para colocarse OW en una celda solar con como estructura vidrio/ITO/CdS/CdSe/Ag para formar una estructura *vidrio/ITO/CdS/CdSe/CdSe\_TaxTex/CdSe/Ag.* Se presentan y discuten para ambos casos los valores calculados de la tasa de generación de exitones, así como los parámetros de desempeño Voc, Isc, FF y η.

### 2. ESTRUCTURA DE UNA CELDA SOLAR

La Fig. (1a) muestra la estructura convencional de una celda solar de unión PN. En la parte inferior se encuentra un vidrio que generalmente es soda-lima y funciona como sustrato, el cual es encargado de darle solides mecánica y sostener a la celda solar. Posteriormente, tiene una capa delgada de un metal transparente que en este trabajo es oxido de indio (ITO), la cual funciona como el conductor frontal de la celda y debe de ser transparente al espectro de radiación solar para no absorber ni atenuar dicho espectro. Enseguida se deposita el primer semiconductor que funciona como material ventana, el cual debe de tener una alta foto-conductividad al espectro solar y es fundamental y necesario para formar la zona de depleción de la unión PN. Sobre el material ventana se deposita el segundo semiconductor el cual es la capa activa o el material que mayoritariamente absorbe el espectro solar incidente. Finalmente, se encuentra el contacto superior el cual es un metal con una alta fusión de trabajo para formar un contacto óhmico.

Fig. (1). Celda solar unitaria de heterounión PN. (a) estructura; (b) diagrama energético de la unión.





La Fig. (1b) muestra el diagrama energético de una unión PN. Los fotones absorbidos son aquellos que acarrean energía mayor al ancho de la zona de agotamiento definida con la diferencia entre la banda de conducción (BC) y la banda de valencia (BV),  $E_g = BC - BV$ . En la zona de depleción se realiza mayoritariamente la generación de cargas libre. Una desventaja en este tipo de celdas es su incapacidad para absorber fotones con energía menor al valor de  $E_g$  de la capa activa. Una solución a este problema es la inserción de una o varias capas delgadas de material semiconductor en la zona de depleción de la unión PN que tenga un  $E_g$  menor al de la capa activa, conocida como QW. Esta capa delgada de material semiconductor absorberá fotones con energía menor al  $E_g$  de la capa activa debido a la discontinuidad que se crean en las bandas de energía de la celda.

La Fig. (2a) muestra la estructura de una celda solar con pozos cuánticos. Esta estructura es básicamente igual a la de una celda convencional con la diferencia de la colocación del QW en la parte activa de la región intrínseca de la unión PN. La Fig. (2b) muestra el diagrama energético de una unión PN con el QW. En este diagrama se puede observar que al colocar un material con menor  $E_g$  se crea una discontinuidad energética en el diagrama de bandas, que absorberá fotones con energía menor al  $E_g$  de la capa activa.





## 2.1 DISEÑO Y ANÁLISIS TEÓRICO DE LAS CELDAS SOLARES

En este trabajo se diseñaron teóricamente dos diferentes celdas solares de unión PN. La primera con la estructura convencional sin QW y la segunda con la misma estructura pero incluyendo un QW. La estructura considerada para la primera fue vidrio/ITO/CdS/CdSe/Ag, con anchos de capas de 1.1 mm, 200 nm, 100 nm, 10  $\mu$ m y 5  $\mu$ m, respectivamente. Para esta celda se consideró CdS dopado con Sodio (Na) resultando tipo P con un E<sub>g</sub> = 2.42 eV, y CdSe dopado con Galio (Ga) resultando tipo N con un E<sub>g</sub> = 1.74 eV. Posteriormente se obtuvo su curva característica J-V mostrada en la Fig. (3). Considerando los parámetros de la tabla (1) se obtuvieron las características de desempeño Voc, Jsc, FF y  $\eta$  utilizando las ecuaciones (1), (2), (3) y (4), respectivamente, los cuales mostrados en la tabla (2).

# Fig. (3). Curva característica J-V de la celda solar convencional de unión PN diseñada con estructura *vidrio/ITO/CdS/CdSe/Ag*.



$$J_{sc} = -qG_L(L_p + L_n) \tag{2}$$

$$FF = \frac{V_{maxpot} \times J_{maxpot}}{V_{oc} \times I_{sc}}$$
(3)

$$\eta = \frac{V_{maxpot} \times J_{maxpot}}{P_{incidente}} \tag{4}$$

Parámetro	Valor
$L_p$ distancia de difusión de huecos	$9.121 * 10^{-5} cm$
$L_n$ distancia de difusión de electrones	$9.486 * 10^{-4} cm$
$G_L$ tas a de generación de exitones	$2.94 * 10^{28} cm^3/_{s}$
$D_n$ coeficiente de difusión de electrones	9 $cm^2/_s$
$D_p$ coeficiente de difusión de huecos	0.52 $cm^2/s$
<i>n<sub>po</sub></i> concentración de electrones en equilibrio	$1.162 * 10^{-11} \ cm^{-3}$
$p_{no}$ concentración de huecos en equilibrio	$51.2 \ cm^{-3}$
q carga del electrón	$1.602 * 10^{-19}C$
$J_{maxpot}$ corriente a máxima potencia	4.366 $A/_{cm^2}$
V <sub>maxpot</sub> voltaje a máxima potencia	0.2142 V

Tabla	1	Parámetros	utilizados	en los	diseños
I abla	1.	Parametros	uunzados	en ios	alsenos.

P <sub>incidente</sub> potencia incidente	100 mW cm <sup>2</sup>

La segunda celda solar diseñada incluye un QW, para el cual el material que lo forma fue seleccionado de tal manera que satisficiera cuatro criterios de selección. Los cuatro criterios establecidos para su selección son los siguientes:

- 1. El QW debe insertarse dentro de la zona de depleción en el material compuesto CdSe dado que es la capa activa.
- 2. El  $E_g$  de material del QW debe de ser menor al  $E_g$  del CdSe.
- 3. El material de QW debe de tener una constante de red "a" cercana al del CdSe para no genera alto estrés en los enlaces de interface.
- 4. El QW debe absorber fotones con energía que la estructura convencional no absorbe.

Como se puede observar en los criterios establecidos para la inserción del QW, este debe de ser colocado dentro de la zona de depleción de la unión PN. Por lo tanto, se debe calcular el acho de la zona de depleción (w) fuera de equilibrio dado que la celda solar esta iluminada por una  $P_{\text{incidente}}$  de manera constante. Para calcular w se utilizó el algoritmo de Gummel modificado mostrado en la Fig. (4).

Fig. (4). Algoritmo de Gummel modificado para el cálculo del ancho de la zona de delación fuera de equilibrio.



Para iniciar la ejecución del algoritmo se propone un valor inicial para el potencial de contacto de Poisson ( $V_{poisson}$ ) y se procede con el cálculo de las longitudes de difusión de cargas minoritarias hasta ejecutarlo completamente. Este algoritmo se cicla iterando hasta que se satisfacen dos condiciones; la primera es que la diferencia entre el  $V_{poisson}$  de la iteración actual y el  $V_{poisson}$  de una iteración anterior sea menor a un umbral previamente preestablecido, y la segunda que la suma de los valores absolutos de las diferencias de las concentraciones de cargas de la iteración actual y una anterior dividida sobre la suma de las concentraciones de cargas encontradas en la iteración actual sea menor a un umbral preestablecido. Una vez ejecutado este algoritmo se encontraron los datos mostrados en la tabla (2). Por lo tanto el QW se coloca dentro del material N a la mitad del ancho x<sub>p</sub>.

Tabla (2). Valores calculados de ancho de la zona de depleción fuera de equilibrio.

Parámetro	valor
$x_p$ ancho en el material N	$8.906 \times 10^{-7} cm$
$x_n$ ancho en material P	$7.659 \times 10^{-7} cm$
<i>w</i> ancho total de la zona de depleción	$1.656 \times 10^{-6} cm$

Una vez obtenida la posición donde se colocará el QW se debe seleccionar su material. Para realizar esta selección es importante definir la longitud de onda central de absorción del CdSe fijada por su E<sub>g</sub>. Esta se encuentra utilizando la ecuación de Planck [ecuación (5)] que arroja  $\lambda = 712.64$  nm. Posteriormente, se selecciona una longitud de onda mayor de absorción para el material del QW y así que absorba fotones con menor energía que los que absorbe el CdSe. Por lo tanto, se escoge una  $\lambda$  para el material de QW de 825 nm.

$$\lambda = \frac{1.24}{E_g} \tag{5}$$

Para encontrar el valor de ancho de banda prohibida que debe tener el material que formara el QW se utiliza la ecuación (5) de la cual se despeja Eg, el resultado en este cálculo es 1.5 eV. Posteriormente, utilizando las curvas de transición de materiales binarios a ternarios del grupo II-IV mostrada en la Fig. (5) se lleva a cabo la búsqueda del material para el QW. El procedimiento consiste en dibujar una línea horizontal en la posición de  $E_g = 1.5$  eV. Se observa que esta nueva línea horizontal toca la curva de transición que une a los materiales binarios CdSe y CdTe la cual representa un material ternarios de la forma  $CdSe_{1-x}Te_x$  con un  $E_g = 1.5 \text{ eV}$  y una constante red cercana al CdSe. Para encontrar el valor de la fracción molar "x" se usa la ecuación (6), donde EA y EB son el Eg del CdSe y CdTe respectivamente, el valor de b es un valor de ajuste igual a 0.01 tal como se explica en la referencia [11]. Se resuelve esta ecuación para x encontrando que para que  $E_g(CdSe_{1-x}Te_x)$  sea 1.5 eV, x es de 0.4 y x-1 es de 0.6 lo que representa una proporción de 40% para el telurio (Te) y 60% para el selenio (Se). Por lo tanto el material ternario resultante para el QW es CdSe<sub>0.6</sub>Te<sub>0.4</sub>.

$$E_{g}(CdSe_{1-x}Te_{x}) = E_{A} + (E_{B} - E_{A} - b)x + bx^{2}$$
(6)

De acuerdo a la selección, la estructura para la segunda celda solar es *vidrio/ITO/CdS/CdSe/CdSe*<sub>0.6</sub>*Te*<sub>0.4</sub>*/CdSe/Ag*. Cabe mencionar que el valor del ancho del QW se obtuvo al resolver el algoritmo modificado de Gummel mostrado previamente junto con la solución autoconsistente de las ecuaciones de Schrödinger – Poisson.

Fig. (5). Curvas de transición de materiales binarios del grupo II-VI.



#### 2.2. RESULTADOS

En esta sección se considera un análisis comparativo entre los resultados obtenidos en el diseño de la celda convencional y la celda diseñada con el QW en la estructura. Entre los resultados que se compararan se encuentran: el voltaje de circuito abierto, la corriente de corto circuito, la potencia máxima deseada, el voltaje a máxima potencia, densidad de corriente máxima, la resistencia a máxima potencia, el factor de llenado, eficiencia de conversión, entre otros.

En la tabla (**3**) se muestra un resumen de los resultados obtenidos en el desempeño teórico en las celdas solares diseñadas, en la columna central se encuentran los resultados de la celda con una estructura de tipo *vidrio soda-lima/CdS/CdSe/Ag*, mientras que en la columna derecha se encuentran los resultados de la celda con una estructura de tipo *vidrio soda-lima/ITO/CdS/CdSe/CdSe/Ag*.

Características de desempeño					
Parámetro	Sin QW	Con QW			
V <sub>oc</sub>	0.2786 V	0.2908 V			
J <sub>sc</sub>	$6.4046  {}^{A}/cm^{2}$	10.2189 <sup>A</sup> / <sub>cm<sup>2</sup></sub>			
V <sub>max</sub>	0.2205 V	0.2314 V			
J <sub>max</sub>	$5.7324 A/_{cm^2}$	9.1933 <sup>A</sup> / <sub>cm<sup>2</sup></sub>			
P <sub>max</sub>	$1.2568 * 10^{-4} W$	$2.0826 * 10^{-4} W$			
$\eta_{power}$	14.04 %	23.63 %			
FF	0.7082	0.7160			
R <sub>max</sub>	386.84 Ω	257.11 Ω			
I <sub>max</sub>	$5.99 * 10^{-4} A$	$9 * 10^{-4} A$			
A <sub>trans</sub>	9943.47 $\mu m^2$				

Los resultados en la tabla muestran que el dispositivo diseñado sin QW obtiene una eficiencia de conversion teórica de 14.04 %, mientras que la eficiencia en la celda con un QW en la estructura es igual a 23.63 %. Este resultado muestra un incremento de 9.59 %, lo que sugiere que una celda solar diseñada teóricamente con un QW en la estructura alcanza una mayor eficiencia de conversión que la celda solar sin QW.

## **3. CONCLUSIONES Y DISCUSIONES**

En este trabajo, se realizó un estudio teórico de la selección del material v su acho para colocarse como OW en una celda solar con estructura vidrio/ITO/CdS/CdSe/Ag y formar una celda con estructura vidrio/ITO/CdS/CdSe/CdSe1-xTex/CdSe/ Ag. Se calcularon y compararon los parámetros de desempeño de ambas celdas para cuantificar el efecto del uso del QW. Con respecto a la selección del material para el QW se establecieron criterio de selección así como un procedimiento basado en el uso de las curvas de transición de materiales binario a ternarios del grupo II-VI de la tabla periódica (Calcogenuros de Cadmio). Dicho procediendo sirve para seleccionar un material ternario que satisface los requerimientos de Eg y constante de red establecidos. Una vez que se ejecutó este procedimiento se encontró que el material a usarcé como QW es el ternario CdSe<sub>0.6</sub>Te<sub>0.4</sub> el cual posee un  $E_g = 1.5 \text{ eV}$  y tiene una constante de red cercana al CdSe.

Con respecto a los parámetros de desempeño calculados para ambas celdas solares se encontró que la celda sin QW tiene un FF = 0.7082 y una  $\eta$  = 14.04 % mientras que la celda con el QW tiene un FF = 0.7160 y una  $\eta$  = 23.63 % lo que representa un incremento en FF de 0.0072 y un incremento en  $\eta$  de 9.59 %. Estos resultados sugieren que la inclusión del QW provoca un incremento considerable en el desempeño de la celda solar diseñada.

## **3.1 Observaciones generales**

El autor le agradece al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico a los estudios de Vianey Aracely Candelas Urrea, así como a Instituto de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Baja California (UABC) por permitirle el uso de las instalaciones y el equipo necesario para la realización de este trabajo.

# 4. REFERENCIAS

[1] J. Poortmans, V. Arkhipov, "Thin Film Solar Cells, fabrication, characterization and Applications", John Wiley & Sons Ltd,2006.

[2] K. L. Chopra, P. D. Paulson, V. Dutta, "Thin-film solar cells: an overview", Prog. Photovolt: Res. Appl., 12(2-3), pp. 69–92, 2004.

[3] X. Wu, J. C. Keane, R. G. Dhere, C. DeHart, D. S. Albin, A. Duda, T. A. Gessert, S. Asher, D. H. Levi, P. Sheldon, "Seventeen European Photovoltaic Solar Energy Conference", 3, pp. 995-1000, 2001.

[4] "First Solar sets 18.7% record for CdTe solar cell efficiency", (http://www.semiconductor-

today.com/news\_items/2013/FEB/ FIRSTSO LAR\_260213.html >.

[5] L. Kosyachenko, T. Toyama, "Current-voltage characteristics and quantum efficiency spectra of efficient thin-film CdS/CdTe solar cells", Sol. Energ. Mat. & Sol. C., 120, pp. 512-520, 2013.

[6] K. W. J. Barnham, I. Ballard, J. P. Connolly, N. J. Ekins-Daukes, B. G. Kluftinger, J. Nelson, C. Rohr, "Quantum well solar cells", Physical E, 14(1-2), pp. 27-36, 2002.

[7] K. Y. Lai, G. J. Lin, C. Y. Chen, Y. L. Lai, "Origin of Hot Carriers in InGaN-Based Quantum-Well Solar Cells", IEEE Electron Device Letters, 32(2), pp. 179-181, 2011.

[8] J. R. Villa, R. Villa, C. Villa, "Photon absorption coefficient ( $\alpha$ ) for a low-dimensional CdS/CdTe absorber by a partial k-selection approach", Journal of Nanophotonics, 7(1), pp. 2-13, 2013.

[9] C. Villa, D. Sauceda, J. R. Villa, R. Villa-Angulo, "Optical field dissipation in heterostructures for nanophotovoltaic devices", Journal of Nanophotonics, 10(4), pp. 2-19, 2016.

[**10**] J. R. Villa, R. Villa, K. Solorio, S. E. Ahumada, C. Villa, "Effect of effective mass mismatch in CdS/CdTe heterojunctions on the fundamental deign parameters of nanophotonic devices", Journal of Nanophotonics, 8(1), pp. 2-14, 2014.

[11] S.S. Patil and P. H. Pawar, "Structural and optical studies of thermally evaporated  $CdSe_{x}Te_{1-x}$  thin films", Journal of chemical, Biological and Physical Science, 2(3), pp. 1472-1484, 2012.

[12] C. Villa, "CdSe $_{0.4}$ Te $_{0.6}$  Quantum Well-Based Photodetector Toward Imaging Vision Sensors", IEEE Sensors Journal, 20(22), pp. 13357-13363, 2020.

[**13**] G. Brill, Y. Chen, "New material system for 3<sup>rd</sup> generation IR applications", Army Research Laboratory, pp. 9-24, 2010.

[14] "Abrupt PN junction at thermal equilibrium", Fundamentals of Semiconductor physics, (http://www.optique-

ingenieur.org/en/courses/OPI\_ang\_M05\_C02/co/Contenu\_0 5.html).