



ID de la contribución : 459

Tipo : Oral parallel contribution

## Dependencia estructural y electrónica de las interfaces polares y no polares entre el CuGaS<sub>2</sub>/CuAlSe<sub>2</sub> y CuGaS<sub>2</sub>/ZnSe

*miércoles, 19 de julio de 2017 17:45 (30)*

El estudio de los fenómenos físicos involucrados en las interfaces entre los diferentes semiconductores que pueden considerarse para formar una célula solar, ha sido objeto de creciente actividad durante los últimos años [1,2]. Particularmente, en las células solares de calcopirita la unión entre el CuGaS<sub>2</sub> y la capa "buffer" (CdS o ZnSe) está formada por materiales con diferentes anchuras de banda prohibidas, diferentes afinidades electrónicas y diferentes posiciones energéticas del nivel de Fermi. La consecuencia de estas diferencias se refleja en la discontinuidad de la banda de valencia y conducción, además de la formación de un momento dipolar en la interfase que genera un escalón en el potencial electrostático.

De acuerdo a un resultado previo [3], el alineamiento de bandas de las interfaces entre el CuGaS<sub>2</sub>/CuAlSe<sub>2</sub> y CuGaS<sub>2</sub>/ZnSe muestran las características adecuadas para el diseño y desarrollo de células solares de película delgada. Los resultados sugieren que las interfaces entre ellos afectan a la eficiencia de conversión en células solares [4].

Sin embargo, las complicaciones teóricas que se derivan de las complejas interacciones entre los enlaces de las interfaces y el desajuste de la red entre los compuestos han impedido el desarrollo de modelos analíticos generales capaces de predecir con precisión las magnitudes en la discontinuidad de las bandas [5]. El gran desajuste de la red entre el CuGaS<sub>2</sub> y el material de contacto (CuAlSe<sub>2</sub> ~ 6% y ZnSe ~ 5%) y el alineamiento de bandas del tipo II entre las dos interfaces, han motivado este estudio de las heteroestructuras con CuGaS<sub>2</sub>, debido a que el tipo de alineamiento va acompañado de una separación de las carga, lo cual es ventajoso para este tipo de células solares.

Haciendo uso de la metodología de primeros principios, combinando la teoría del funcional de la densidad (DFT) y cálculos cuánticos (funcionales híbridos), obtuvimos los alineamientos de bandas de las heterouniones entre el CuGaS<sub>2</sub> y el CuAlSe<sub>2</sub> y ZnSe. Para el alineamiento de las bandas de energía, se construyó un modelo de las superficies en contacto y se utilizó un método de alineamiento basado en el potencial electrostático promedio [6]. Las cuatro superficies de contacto estudiadas corresponden a dos tipos de orientaciones polares (001) y (1 $\bar{1}$ 2) y dos orientaciones no polares (110) y (102) (Figura 1). De acuerdo al modelo empleado, la dependencia de las propiedades de la interfase respecto a la orientación y la terminación química, no modifica sustancialmente el tipo de alineamiento de bandas que presenta cada interfase.

Se agradecen los recursos informáticos y asistencia técnica proporcionada por el Centro de Supercomputación y Visualización de Madrid (CeSViMa) y al Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS1).

**Primary author(s) :** Dr. CASTELLANOS ÁGUILA, Jesus Eduardo (Benemerita Universidad Autónoma de Puebla); Dr. PALACIOS, Pablo (Universidad Politécnica de Madrid)

**Co-author(s) :** Prof. ARRIAGA, Jesus (Benemerita Universidad Autónoma de Puebla); Prof. WAHNON, Perla (Universidad Politécnica de Madrid)

**Presenter(s) :** Dr. PALACIOS, Pablo (Universidad Politécnica de Madrid)

**Clasificación de la sesión :** Energy and Sustainability III

**Clasificación de temáticas :** Energy and Sustainability