

Study of Photocurrent Enhancement Dependence on Background Doping in Quantum Dot Solar Cells by Numerical Simulations

A. Cédola, M. Gioannini, F. Cappelluti, M. Cappelletti and E. P. y Blanca

Abstract— This paper presents a theoretical study about quantum dot solar cells by means of numerical simulations, considering different doping levels in the intrinsic region of the cells, with the aim of evaluating the effect on the device's power conversion efficiency. Results of simulations performed over GaAs solar cells with InAs quantum dots, based on two different fabrication processes, are reported. The donor doping density in the intrinsic region was ranged from 10^{13} to 10^{17} cm^{-3} . It is shown that, for a doping level of 7×10^{15} cm^{-3} , the contribution of larger sized quantum dots to the photocurrent is increased by 50%, a very promising result in the search for new designs with higher efficiencies.

Keywords— Solar cells, semiconductors, quantum dots, GaAs, device modeling, numerical simulation.

I. INTRODUCCIÓN

EL AVANCE de la nanotecnología ha abierto paso a nuevas investigaciones y desarrollos con aplicaciones en áreas tan diversas como la informática, la medicina o las fuentes de energía alternativas, las cuales prometen mejorar la calidad de vida de la humanidad conservando y protegiendo el medio ambiente. Precisamente en el campo de la energía, el estudio de dispositivos fotovoltaicos basados en nanoestructuras semiconductoras ha cobrado especial relevancia en los últimos años, a partir de cálculos teóricos que predicen para esta clase de dispositivos, por ejemplo las celdas solares de banda intermedia basadas en puntos cuánticos (QDSCs: Quantum Dots Solar Cells), eficiencias superiores al 60% [1], aproximadamente el doble de las eficiencias disponibles en el mercado actual para silicio o materiales III-V.

Los QDs son nanoestructuras semiconductoras cuyo bandgap puede ser manipulado en función del tamaño de los mismos, propiedad que los hace sumamente útiles para aplicar ingeniería de bandgap (bandgap engineering) al diseño de dispositivos con características particulares. En el caso de las QDSCs, los QDs introducen niveles de energía permitidos en

el bandgap del semiconductor matriz, usualmente denominado barrera, permitiendo que fotones de menor energía sean absorbidos, generando un mayor número de pares electrón-hueco [2]. Si bien la fotocorriente se incrementa, la degradación de la tensión de circuito abierto observada en todos los casos hace que la eficiencia de estas celdas caiga por debajo de la eficiencia de celdas convencionales sin QDs. Es por ello que, a partir de los numerosos trabajos experimentales realizados por grupos de todo el mundo con resultados no demasiado alentadores [3]-[7], se concluye que resulta imperativo un análisis detallado de las QDSCs desde el punto de vista de la modelización, a fines de comprender las bajas eficiencias alcanzadas en la práctica ($< 15\%$) y de obtener diseños con prestaciones más cercanas al límite teórico. Diversas estrategias de diseño son actualmente investigadas para mejorar la eficiencia de las celdas. Entre estas estrategias se destaca el dopado controlado de los puntos cuánticos, ya sea para manipular el campo eléctrico o la población de portadores en los puntos cuánticos en el estado de equilibrio [5], [8]-[10]. Se prevé que un dopado óptimo puede disminuir la tasa a la cual los portadores son capturados en los puntos cuánticos desde la barrera, reduciendo la degradación de la tensión de circuito abierto.

En este trabajo se presenta el estudio mediante simulaciones por computadora de celdas solares de GaAs con puntos cuánticos de InAs (InAs/GaAs QDSCs), con diferentes niveles de dopado en la región de los QDs. El modelo implementado [11], basado en las ecuaciones de arrastre-difusión para el GaAs y ecuaciones de tasas para cada nivel de energía de los QDs, reproduce satisfactoriamente mediciones experimentales y resulta de suma utilidad para el análisis y diseño de dispositivos fotovoltaicos basados en nanoestructuras.

II. CELDAS SOLARES DE PUNTOS CUÁNTICOS

Los QDs confinan el movimiento de los electrones de la banda de conducción y los huecos de la banda de valencia en las tres dimensiones espaciales. El método de Stranski-Krastanow es el más utilizado actualmente para el crecimiento de QDs. Se trata básicamente de depositar el material semiconductor de los QDs sobre un sustrato (o matriz) con diferente constante de red. Como consecuencia de la tensión (strain) entre ambas redes cristalinas, los átomos del material depositado tienden a organizarse en pequeñas islas minimizando la tensión superficial, con lo cual, tras el crecimiento de una delgada capa bi-dimensional denominada Wetting Layer, quedan formados los QDs. Debido a las

A. Cédola, GEMyDE, Universidad Nacional de La Plata, Buenos Aires, Argentina, ariel.cedola@ing.unlp.edu.ar

M. Gioannini, Dipartimento di Elettronica e Telecomunicazioni, Politecnico di Torino, Torino, Italia, mariangela.gioannini@polito.it

F. Cappelluti, Dipartimento di Elettronica e Telecomunicazioni, Politecnico di Torino, Torino, Italia, federica.cappelluti@polito.it

M. Cappelletti, GEMyDE, Universidad Nacional de La Plata y Universidad Nacional Arturo Jauretche, Buenos Aires, Argentina, marcelo.cappelletti@ing.unlp.edu.ar

E. P. y Blanca, GEMyDE, Universidad Nacional de La Plata, Buenos Aires, Argentina y Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), eitelpyb@ing.unlp.edu.ar

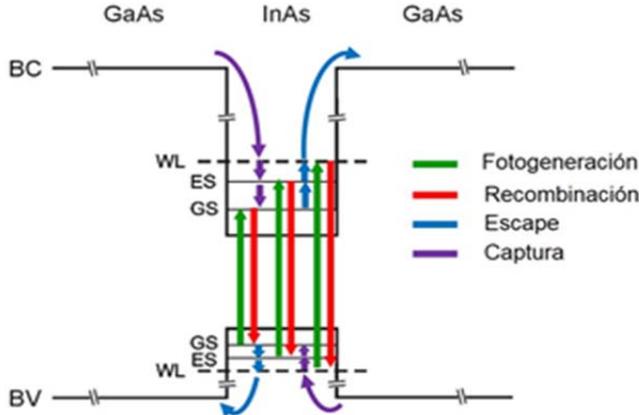


Figura 1. Diagrama esquemático de los distintos procesos involucrados en la dinámica de los portadores en los puntos cuánticos.

características del proceso, estas estructuras se conocen como QDs auto-ensamblados.

La estructura de bandas de los QDs consiste de un nivel de energía fuertemente confinado (Ground State, GS), uno o varios niveles excitados (Excited States, ES), ambos con densidad de estados (DOS) 0-dimensional, y un estado para la Wetting Layer (WL), cuya DOS es bi-dimensional. La separación de energía entre los distintos niveles y por ende el espectro de absorción de los QDs, están directamente relacionados a su tamaño y forma (pirámide, cono, lente) [12]. El espectro de absorción de cada nivel adquiere una distribución gaussiana producto de la no uniformidad del tamaño y composición de cada QD. La WL juega un papel preponderante en la fotogeneración por luz solar, dado que su coeficiente de absorción es mucho mayor que el de GS y ES para densidades de QDs normales (del orden de los 10^{10} cm^{-2}). Sin embargo, los espectros de absorción de estos dos niveles son proporcionales a la densidad de los QDs, lo que significa que para altas densidades ($>10^{11} \text{ cm}^{-2}$) la fotogeneración a través de GS y ES se vuelve importante.

Las QDSCs son básicamente estructuras semiconductoras p^+i-n^+ con capas de QDs embebidas en la región intrínseca (i). Estas capas introducen niveles de energía discretos que facilitan la absorción de fotones con energías por debajo del bandgap del semiconductor matriz, lo que da lugar a una eficiencia cuántica más amplia y, según la calidad del dispositivo, a una mayor o menor corriente de cortocircuito.

En el caso de celdas solares de GaAs con QDs de InAs, el diagrama de bandas resulta como el mostrado en la Fig. 1, en la cual se pueden observar además los distintos procesos de captura y escape de portadores, así como los procesos de fotogeneración y recombinación, todos ellos tenidos en cuenta en el modelo desarrollado. Los estados bi-dimensionales (WL) y 0-dimensionales (GS, ES) de los QDs están acoplados entre sí a través de procesos de captura y escape térmicos de electrones y huecos, y a su vez estos estados son capaces de interactuar con los estados 3-dimensionales del semiconductor matriz, el GaAs, mediante procesos similares. Esto significa que, por ejemplo, los electrones fotogenerados en la WL de una capa de QDs pueden ganar energía térmica y escapar hacia la banda de conducción del GaAs, o bien pueden perder energía y ser capturados por el nivel inferior ES. Los

portadores fotogenerados en los QDs que alcanzan el semiconductor matriz son los que contribuyen a incrementar la fotocorriente de la celda. Cada proceso de escape y captura es función de una constante de tiempo característica. Los tiempos de captura se conocen a partir de mediciones experimentales o cálculos de primeros principios [12], mientras que los tiempos de escape se pueden estimar teniendo en cuenta que en equilibrio térmico, las tasas de escape y captura de cada nivel deben ser iguales. La suma de todas las tasas asociadas a cada nivel debe ser cero en condiciones de estado estacionario. Si bien existen indicios acerca de otros procesos que facilitan la extracción de portadores desde los QDs hacia el semiconductor matriz, como el efecto túnel a través de las barreras de potencial entre capas o excitaciones ópticas secundarias con fotones de muy baja energía, estos efectos no son tenidos en cuenta en el modelo actual.

III. MODELO NUMÉRICO

El modelo propuesto para el análisis mediante simulaciones numéricas de las QDSCs de InAs/GaAs está basado en las ecuaciones básicas de los semiconductores [13], es decir, ecuación de Poisson (1) y ecuaciones de continuidad de electrones (2a) y huecos (2b) para el GaAs, en el modelo de transporte de arrastre-difusión (3a)-(3b), y en ecuaciones de tasas para cada nivel cuántico de energía (4a)-(4c). Solo las ecuaciones de tasas para los electrones en los QDs se detallan a continuación, las ecuaciones para huecos son análogas y se omiten.

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{q}{\epsilon} (p - n + N_d^+ - N_a^- + \sum_i (p_{QDi} - n_{QDi})), \quad (1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} - R_B + G_B + \sum_i (R_{n_{ESC}}^{WL_i \rightarrow B} - R_{n_{CAP}}^{B \rightarrow WL_i}), \quad (2a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} - R_B + G_B + \sum_i (R_{p_{ESC}}^{WL_i \rightarrow B} - R_{p_{CAP}}^{B \rightarrow WL_i}), \quad (2b)$$

$$J_n = -q\mu_n n \frac{\partial V}{\partial x} + qD_n \frac{\partial n}{\partial x}, \quad (3a)$$

$$J_p = -q\mu_p p \frac{\partial V}{\partial x} - qD_p \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (3b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{WL_i}}{\partial t} = & R_{n_{CAP}}^{B \rightarrow WL_i} - R_{n_{ESC}}^{WL_i \rightarrow B} - R_{n_{CAP}}^{WL_i \rightarrow ES_i} + \\ & R_{n_{ESC}}^{ES_i \rightarrow WL_i} - R_{WL_i} + G_{WL_i}, \end{aligned} \quad (4a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{ES_i}}{\partial t} = & R_{n_{CAP}}^{WL_i \rightarrow ES_i} - R_{n_{ESC}}^{ES_i \rightarrow WL_i} - R_{n_{CAP}}^{ES_i \rightarrow GS_i} + \\ & R_{n_{ESC}}^{GS_i \rightarrow ES_i} - R_{ES_i} + G_{ES_i}, \end{aligned} \quad (4b)$$

$$\frac{\partial n_{GS_i}}{\partial t} = R_{n_{CAP}}^{ES_i \rightarrow GS_i} - R_{n_{ESC}}^{GS_i \rightarrow ES_i} - R_{GS_i} + G_{GS_i}. \quad (4c)$$

El potencial electrostático (V), las densidades de electrones (n) y huecos (p) en el GaAs y las poblaciones de los estados de los QDs ($p_{QDi} = p_{WL_i} + p_{ES_i} + p_{GS_i}$; $n_{QDi} = n_{WL_i} + n_{ES_i} + n_{GS_i}$) son las incógnitas a determinar a través del código computacional. El índice i hace referencia a una determinada

capa de QDs. R_B y G_B son las tasas de recombinación neta y fotogeneración en el GaAs, respectivamente. Las recombinaciones radiativa y térmica a través de centros R-G (Shockley-Read-Hall) son los procesos tenidos en cuenta en el modelo propuesto. $R_{n(p)_{ESC}}^{\alpha \rightarrow \beta}$ y $R_{n(p)_{CAP}}^{\beta \rightarrow \alpha}$ son las tasas de escape y captura de portadores, desde y hacia los QDs o la barrera (B), siendo $\alpha=WL, ES, GS$ y $\beta=B, WL, ES$. Las expresiones de estas tasas están dadas por

$$R_{n(p)_{ESC}}^{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{n(p)_{\alpha}}{\tau_{n(p)_{ESC}}^{\alpha}} \left(1 - \frac{n(p)_{\beta}}{DOS_{\beta}} \right), \quad (5a)$$

$$R_{n(p)_{CAP}}^{\beta \rightarrow \alpha} = \frac{n(p)_{\beta}}{\tau_{n(p)_{CAP}}^{\alpha}} \left(1 - \frac{n(p)_{\alpha}}{DOS_{\alpha}} \right). \quad (5b)$$

donde $\tau_{n(p)_{ESC,CAP}}^{\alpha}$ es la constante de tiempo de cada proceso y $DOS_{\alpha,\beta}$ es la densidad total de estados de cada nivel de energía, dada por el producto entre el factor de degeneración y la densidad de QDs, N_D . Para la barrera, equivale a la densidad efectiva de estados en las bandas de conducción y valencia. Las tasas de recombinación banda a banda y fotogeneración en los QDs están representadas por $R_{WL,ES,GS}$ y $G_{WL,ES,GS}$. Las tasas de fotogeneración en los QDs son función del flujo de fotones incidentes, que decae exponencialmente al penetrar en el material, y de los coeficientes de absorción de WL, ES y GS. Las tasas netas de recombinación en los puntos cuánticos son modelizadas como

$$R_{\alpha i} = \frac{N_D}{\tau_r^{\alpha}} \frac{n_{\alpha}}{DOS_{\alpha}} \frac{p_{\alpha}}{DOS_{\alpha}}, \quad (6)$$

siendo τ_r^{α} el tiempo de recombinación en el nivel de energía α . El significado de los restantes parámetros encontrados en las ecuaciones (1)-(3) es el convencional [13].

El conjunto completo de ecuaciones es adecuadamente normalizado y discretizado sobre una malla 1D planteada sobre la geometría del dispositivo, aplicando diferencias finitas y el método de Scharfetter-Gummel para las expresiones de las corrientes. El sistema resultante se resuelve en forma autoconsistente utilizando el método acoplado de Newton [11], [13].

IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A fines de validar el modelo con resultados experimentales recientes, se simuló una celda p^+-i-n^+ con 20 capas de QDs de densidad $4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, similar a la presentada en [5]. Todos los cálculos se realizaron a 300 K, considerando el espectro solar AM1.5G a 0.1 W/cm^2 . La Fig. 2 muestra la comparación entre la curva tensión-corriente (VI) experimental y la obtenida a partir de las simulaciones, para la celda con y sin QDs embebidos. Los resultados teóricos concuerdan muy bien con los experimentales publicados en la literatura, otorgando validez al modelo implementado. Los parámetros de ajuste que se han considerado son los dopados y los tiempos de vida

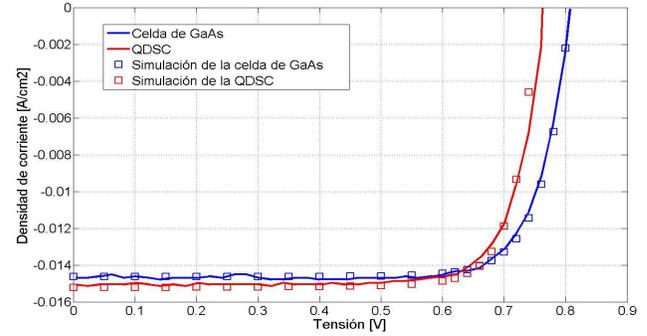


Figura 2. Curvas tensión-corriente experimentales y simuladas, para celdas de GaAs con y sin puntos cuánticos. Las mediciones fueron extraídas de [5]. Se observa un muy buen ajuste con los resultados teóricos en ambos casos.

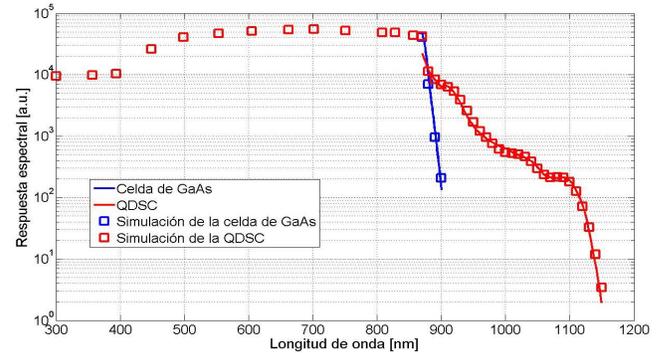


Figura 3. Comparación entre la respuesta espectral experimental y simulada de las celdas con y sin puntos cuánticos. El rango de longitudes de onda absorbidas se extiende producto de la fotogeneración de portadores en los niveles WL, ES y GS. Los datos experimentales fueron extraídos de [5].

media de portadores minoritarios en el GaAs, y los tiempos de recombinación de los QDs. El ajuste de los tiempos de vida en el GaAs arrojó valores de 0.45 ns y 9 ns para electrones y huecos respectivamente, comparables a los valores experimentales dependientes del dopado que han sido reportados [14]. Las movilidades se fijaron en $8500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ para electrones y $400 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ para huecos. Su dependencia con el campo eléctrico en el código se basa en el modelo de Caughey-Thomas [14]. En la Fig. 2 se puede observar una reducción de la tensión de circuito abierto (V_{OC}) en la QDSC (de 0.81 V a 0.76 V aproximadamente) y un leve incremento de la corriente de cortocircuito (J_{SC}) (de 14.63 mA/cm^2 a 15.23 mA/cm^2 aproximadamente), ambos efectos en total concordancia con los resultados publicados en la literatura sobre QDSCs de InAs/GaAs sin dopado en la región intrínseca. El incremento favorable de J_{SC} se produce debido a la absorción de fotones con longitudes de onda por encima del límite del GaAs (900 nm) por parte de los QDs, tal como se puede apreciar en el gráfico de la respuesta espectral, Fig. 3. La forma que adquiere la respuesta espectral para longitudes de onda altas está estrechamente ligada a la distribución de los coeficientes de absorción de los niveles WL, ES y GS de los QDs.

Para el estudio de los efectos del dopado sobre la respuesta de la celda, se analizaron dos dispositivos con idéntica estructura pero con puntos cuánticos de diferentes tamaños,

TABLA I. PARÁMETROS UTILIZADOS EN LAS SIMULACIONES.

| Parámetros | QDSC-A | QDSC-B |
|---|--------------------|--------------------|
| Capa p+ GaAs (10^{18} cm^{-3}) [nm] | 80 | 80 |
| Capa p- GaAs ($3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) [nm] | 70 | 70 |
| Capa i GaAs [nm] | 600 | 600 |
| Capa n+ GaAs (10^{18} cm^{-3}) [nm] | 300 | 300 |
| N_D = Densidad sup. de QDs [cm^{-2}] | 6×10^{10} | 6×10^{10} |
| Número de capas de QDs | 10 | 10 |
| Rango de captura de los QDs [nm] | 5 | 5 |
| n: ΔE^{B-WL} , ΔE^{WL-ES} , ΔE^{ES-GS} [meV] | 140, 62, 70 | 220, 40, 30 |
| p: ΔE^{B-WL} , ΔE^{WL-ES} , ΔE^{ES-GS} [meV] | 28, 16, 16 | 140, 15, 15 |
| $\tau_{n\text{-cap}}^{WL}$, $\tau_{n\text{-cap}}^{ES}$, $\tau_{n\text{-cap}}^{GS}$ [ps] | 0.3, 1, 1 | 0.3, 1, 1 |
| $\tau_{p\text{-cap}}^{WL}$, $\tau_{p\text{-cap}}^{ES}$, $\tau_{p\text{-cap}}^{GS}$ [ps] | 0.1, 0.1, 0.1 | 0.1, 0.1, 0.1 |
| τ_r^{WL} , τ_r^{ES} , τ_r^{GS} [ns] | 1, 1, 1 | 1, 1, 1 |

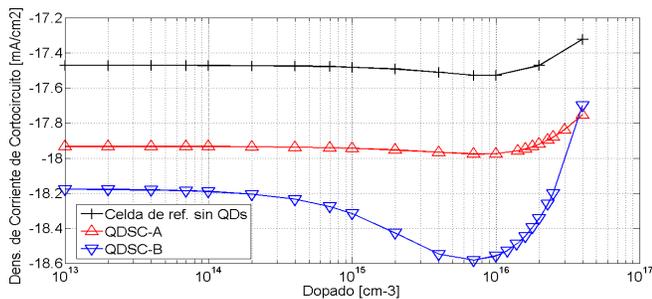


Figura 4. Variación de la densidad de corriente de cortocircuito de la celda de GaAs de referencia y de las celdas con puntos cuánticos QDSC-A (puntos cuánticos de menor tamaño) y QDSC-B (puntos cuánticos de mayor tamaño), en función del dopado de la región intrínseca. Se observa un notable incremento de la corriente para esta última, con un máximo en $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

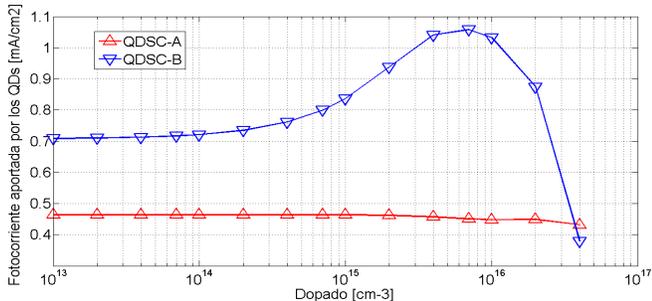


Figura 5. Dependencia con el dopado de la corriente aportada por los puntos cuánticos a la fotocorriente total de la celda solar. La contribución de los puntos cuánticos en QDSC-A no presenta modificaciones, mientras que en QDSC-B crece hasta un 50% para un dopado de $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

cuyas características son similares a las reportadas en la literatura recientemente [3], [9], [15]. La principal diferencia entre ambos tipos de QDs es el rango de absorción de longitudes de onda, definido por el gap de energía entre los niveles GS de electrones y huecos. A mayor tamaño, los niveles son más profundos, el gap es menor y por lo tanto el rango de longitudes de onda absorbidas es más amplio. A los dos tipos de dispositivos considerados se los etiquetó QDSC-A y QDSC-B, para distinguir entre las celdas con QDs de menor y de mayor tamaño, respectivamente. En la Tabla I se detallan los parámetros utilizados en las simulaciones. La estructura analizada en este caso incluye una capa buffer p⁻ separando el contacto p⁺ de la región intrínseca. Dentro de esta

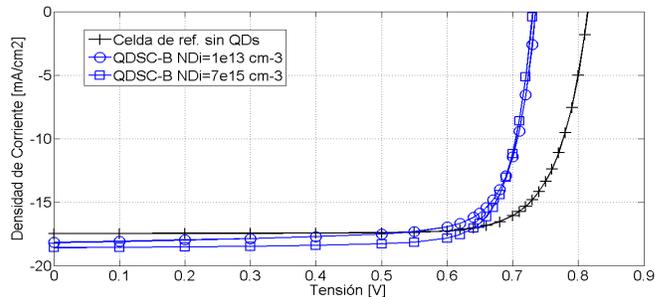


Figura 6. Comparación entre las curvas tensión-corriente de la celda de referencia y la celda QDSC-B, para dos casos, dopada con la densidad más baja considerada en los cálculos (10^{13} cm^{-3}) y con la densidad que maximiza el aporte de los puntos cuánticos a la fotocorriente total ($7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$).

última se incluyeron 10 capas de puntos cuánticos equidistantes entre sí. El rango de captura de los puntos cuánticos se fijó en 5 nm, que es el espesor típico de la WL en capas crecidas con la tecnología actual.

La Fig. 4 muestra la variación de la corriente de cortocircuito de las celdas QDSC-A y QDSC-B en función del nivel de dopado donador uniforme de la región de los puntos cuánticos, inicialmente intrínseca, comparada con la variación de la corriente de cortocircuito de la celda de referencia, con la misma estructura pero sin las capas de QDs. Se observa una notable diferencia en la dependencia con el dopado del aporte de los puntos cuánticos a la fotocorriente, en uno y otro caso. Esto se puede apreciar más claramente en la Fig. 5. La contribución de los puntos cuánticos a la densidad de corriente total en la celda QDSC-B aumenta de 0.706 mA/cm^2 para un dopado de 10^{13} cm^{-3} a 1.06 mA/cm^2 para un dopado de $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, lo que representa un incremento del 50%. En la celda QDSC-A, por el contrario, el aporte de los QDs a la fotocorriente se mantiene prácticamente invariable con el dopado. Como en QDSC-A los niveles de la WL están más próximos a las bandas de conducción y de valencia del GaAs, el dopado no modifica lo suficiente la densidad de carga atrapada en los puntos cuánticos como para alterar fuertemente las tasas de recombinación. En QDSC-B, el aumento del dopado desde 10^{13} cm^{-3} hasta $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ hace que la población de huecos se reduzca al punto de hacer mínima la tasa de recombinación en las capas cercanas a la región p, donde bajo estas condiciones la tasa de escape desde WL hacia la barrera prevalece. Para dopados mayores, el incremento de la población de electrones en los puntos cuánticos aumenta notoriamente las tasas de recombinación, principalmente en las capas cercanas a la región n, incrementando las tasas de captura en GS y ES, lo que a su vez reduce la tasa de escape desde WL a la barrera y en consecuencia la corriente aportada por los puntos cuánticos.

Como es común en estas celdas solares, el aumento favorable de la corriente de cortocircuito es acompañado por una disminución de la tensión de circuito abierto. La eficiencia de las celdas depende de estos dos factores, motivo por el cual en muchos casos una mayor recolección de pares electrón-hueco por parte de los QDs no se ve reflejada en la eficiencia del dispositivo. En la Fig. 6 se comparan las curvas VI de la celda de referencia, con un dopaje de 10^{13} cm^{-3} , y de la

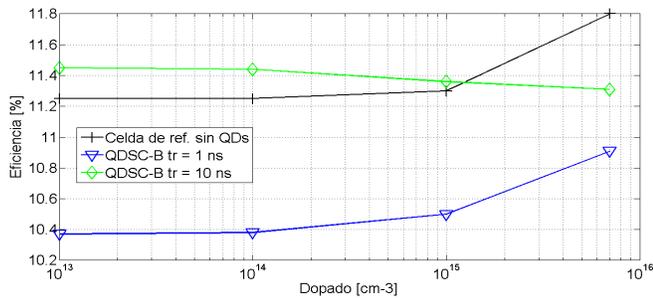


Figura 7. Variación de la eficiencia de las celdas solares de referencia y QDSC-B con el dopado. Los resultados asociados a la celda con puntos cuánticos corresponden a simulaciones realizadas con dos tiempos de recombinación, 1 ns y 10 ns. Con el τ mayor la tasa de recombinación en los tres niveles disminuye para dopados bajos, lo que produce un incremento de la fotocorriente y en consecuencia de la eficiencia.

QDSC-B considerando dos niveles de dopado, 10^{13} cm^{-3} y $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Se observa que, en las celdas con puntos cuánticos, el dopado incrementa la fotocorriente sin alterar apreciablemente la tensión de circuito abierto. A pesar del aumento de la corriente, la eficiencia de la celda QDSC-B no alcanza a superar la de la celda de referencia sin QDs. Con el dopado de $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, la eficiencia de QDSC-B asciende desde 10.4% a 10.9% mientras que la de la celda de referencia con dopado de 10^{13} cm^{-3} es de 11.25%. La Fig. 7 muestra la variación de la eficiencia con el dopado para estos dos dispositivos. Se verifica que la eficiencia de la celda sin QDs crece con el dopado, y esto se da debido a un marcado incremento de la tensión de circuito abierto producto de la variación de la posición del nivel de Fermi. En la figura se puede ver también una tercera curva, que corresponde a una celda QDSC-B con menor tasa de recombinación en los puntos cuánticos que la anterior. Este resultado se obtuvo simulando la celda QDSC-B con tiempos de recombinación $\tau_{\text{WL}}^{\text{ES}}$ y τ_{GS} de 10 ns en lugar de 1 ns. Este experimento numérico se realizó con el objeto de modelizar el efecto de la incorporación en la estructura del dispositivo de algún mecanismo para reducir la recombinación de electrones y huecos de banda a banda en los puntos cuánticos. Uno de estos mecanismos [16] consiste en introducir una banda de energía intermedia por debajo de los niveles de los QDs en el bandgap de la barrera, térmicamente acoplada a dichos niveles de manera que los portadores se relajen fácilmente desde los puntos cuánticos hacia esta banda, pero ópticamente aislada de la banda de valencia de la barrera de manera de inhibir la recombinación. Los primeros prototipos basados en estas estructuras están siendo desarrollados en la actualidad, utilizando heterouniones de tipo II [17]. Como se ve en la Fig. 7, la reducción de la tasa de recombinación es efectiva solo a dopados bajos, para los que la eficiencia de la celda QDSC-B supera la de la celda sin QDs. Para dopados altos la recombinación vuelve a prevalecer, debido al incremento de la población de electrones en los niveles WL, ES y GS, haciendo que las eficiencias de las celdas con diferentes tiempos de recombinación tiendan a aproximarse.

V. CONCLUSIONES

A partir del uso de un código de simulación numérica desarrollado ad-hoc para el estudio de celdas solares de puntos cuánticos desde el punto de vista físico, se analizó el efecto del dopado de la región intrínseca de las celdas, donde se apilan en capas las nanoestructuras, sobre la respuesta de estos dispositivos a la luz solar. Dos tipos de celdas de GaAs con idéntica estructura pero con puntos cuánticos de InAs de diferentes dimensiones fueron investigados. De los resultados obtenidos cabe destacar el aumento del 50% de la fotocorriente aportada por los QDs de mayor tamaño, para una densidad de dopado donador de $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Se encontró que la recombinación en los puntos cuánticos es el principal proceso afectado por el dopado, y el que a su vez controla la tasa de escape de portadores desde la WL hacia la barrera, y en definitiva la contribución de los puntos cuánticos a la fotocorriente. A pesar del incremento de la corriente, no logró observarse una mejora sustancial de la eficiencia de la celda con respecto a la celda de GaAs de referencia. A fines de profundizar los estudios sobre la recombinación en los puntos cuánticos, se realizaron simulaciones considerando un tiempo de recombinación diez veces más grande (10 ns), como una forma de modelizar diseños que constituyen el estado del arte en el desarrollo de celdas con mayores eficiencias. Siempre trabajando sobre los dispositivos con puntos cuánticos de respuesta espectral más amplia, se observó que para tiempos de recombinación grandes la eficiencia puede incrementarse y superar la de la celda de referencia sin que resulte necesario dopar la región intrínseca para mejorar la tasa de escape hacia la barrera.

AGRADECIMIENTOS

El trabajo conjunto de los autores fue financiado en parte por el Proyecto Eurotango, en el marco del Programa Erasmus Mundus Action 2.

REFERENCIAS

- [1] A. Luque and A. Martí, "Increasing the efficiency of ideal solar cells by photon induced transitions at intermediate levels," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78, N. 26, pp. 5014-5017, 1997.
- [2] A. J. Nozik, "Quantum dot solar cells," *Phys. E*, vol. 14, pp. 115-120, 2002.
- [3] D. Guimard et al, "Fabrication of InAs/GaAs quantum dot solar cells with enhanced photocurrent and without degradation of open circuit voltage," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 96, N. 20, pp. 203507-1 - 203507- 3, 2010.
- [4] X. J. Shang et al, "Effect of built-in electric field in photovoltaic InAs quantum dot embedded GaAs solar cell," *Appl. Phys. A*, vol. 103, N. 2, pp. 335-341, 2011.
- [5] K. Sablon et al., "Strong enhancement of solar cell efficiency due to quantum dots with built-in charge," *Nano Lett.*, vol. 11, pp. 2311-2317, 2011.
- [6] G. Jolley et al, "The role of intersubband optical transitions on the electrical properties of InGaAs/GaAs quantum dot solar cells," *Prog. Photovolt: Res. Appl.*, 2012.
- [7] S. Hubbard, D. Wilt, S. Bailey, D. Byrnes and R. Raffaelle, "OMVPE grown InAs quantum dots for application in nanostructured photovoltaics," *Proc. 4th IEEE World Conf. on Photovolt. Energy Conv.*, pp. 118-121, 2006.
- [8] T. Nozawa and Y. Arakawa, "Theoretical analysis of multilevel intermediate band solar cells using drift-diffusion model," *J. Appl. Phys.*, vol. 113, pp. 243102-1 - 243102-7, 2013.

- [9] Y. Okada et al, "Increase in photocurrent by optical transitions via intermediate quantum states in direct-doped InAs/GaNAs strain-compensated quantum dot solar cell," *J. Appl. Phys.*, vol. 109, pp. 24301-1 – 24301-5, 2011.
- [10] X. Yang et al, "Improved efficiency of InAs/GaAs quantum dots solar cells by Si doping," *Solar Energy Mater. Solar Cells*, vol. 113, pp. 144-147, 2013.
- [11] M. Gioannini, A. Cédola, N. Di Santo, F. Bertazzi and F. Cappelluti, "Simulation of quantum dot solar cells including carrier intersubband dynamics and transport," *IEEE J. Photovolt.*, vol. 3, N. 4, pp.1271-1278, 2013.
- [12] D. Bimberg, M. Grundmann and N. Ledentsov, *Quantum dot heterostructures*, Wiley, 1999.
- [13] S. Selberherr, *Analysis and simulation of semiconductor devices*, Springer-Verlag, 1984.
- [14] V. Palankovski and R. Quay, *Analysis and simulation of heterostructure devices*, Springer-Verlag, 2004.
- [15] G. Jolley, H. Lu, H. Tan and C. Jagadish, "Electron-hole recombination properties of In_{0.5}Ga_{0.5}As/GaAs quantum dot solar cells and the influence on the open circuit voltage," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 97, pp. 123505-1 - 123505-3, 2010.
- [16] M. Yoshida, N. J. Ekins-Daukes, D. J. Farrell and C. C. Phillips, "Photon ratchet intermediate band solar cells," *Appl. Phys. Lett.*, vol.100, N. 26, p. 263902, 2012.
- [17] M. Yoshida et al, "Progress toward realizing an intermediate band solar cell – sequential absorption of photons in a quantum well solar cell," *IEEE J. Photovolt.*, vol. 4, N. 2, pp. 634-638, 2014.



Eitel L. Peltzer y Blancá was born in La Plata, Argentina, in 1951. He received the B.S. degree in Physics and the Ph.D. degree in Physics from National University of La Plata (UNLP), Buenos Aires, Argentina, in 1976 and 1985, respectively. His research interests are the electronic properties of solids and the study of physics properties of electronic devices, topics on which he has many international publications and congress presentations, also many talks in conferences. He is the head of the Group of Studies on Materials and Electronic Devices (GEMyDE), Faculty of Engineering, UNLP. Since 1994 he is a full time professor at UNLP, where he also served as Secretary of Science.



Ariel P. Cédola received the M.S. degree in electronic engineering from the National University of La Plata (UNLP), Buenos Aires, Argentina, in 2002. He is currently working toward the Ph.D. degree in engineering in a joint program between UNLP and Politecnico di Torino, Turin, Italy. He is with the Group of Study on Materials and Electronic Devices (GEMyDE), Faculty of Engineering, UNLP. At present, he is an Assistant Professor in Electronics Engineering and Computer Science courses at UNLP. His specific research interests include numerical simulation of semiconductor devices, the design and modeling of nanostructured solar cells, and the study of III–V compound semiconductor heterostructures.



Mariangela Gioannini received the Laurea degree in electronic engineering and the Ph.D. degree in electronic and communication engineering, both from Politecnico di Torino, Turin, Italy, in 1998 and 2002, respectively. She is currently an Assistant Professor with the Dipartimento di Elettronica e Telecomunicazioni, Politecnico di Torino. Her research interests include modeling of semiconductor lasers, amplifiers, and superluminescent light-emitting diodes based on quantum dot materials. She has also been working on the design of widely tunable DBR and multi-section DFB lasers.



Federica Cappelluti was born in Ortona, Italy, in 1973. She received the Laurea degree in electronic engineering and the Ph.D. degree in electronic and communications engineering, both from the Politecnico di Torino, Turin, Italy, in 1998 and 2002, respectively. She is currently an Assistant Professor with the Dipartimento di Elettronica, Politecnico di Torino. Her research interests include the circuit-level and physics-based modeling and simulation of semiconductor devices, with emphasis on active microwave and optoelectronic devices. She is also active in the fields of electrothermal modeling of power devices and stability analysis of nonlinear circuits.



Marcelo A. Cappelletti was born in Mendoza, Argentina, in 1974. He received the B.S. degree in Electronic Engineering and the Ph.D. degree in Engineering from the National University of La Plata (UNLP), Buenos Aires, Argentina, in 2002 and 2009, respectively. He is currently an Adjunct Professor at National University Arturo Jauretche (UNAJ). His research interests include semiconductor device physics such as solar cells based on new concepts.