



Análise de Células Solares de Banda Intermediária a Partir do Método Fourier Grid Hamiltonian

Discente - João Victor de Almeida

Orientador - Prof. Dr. Anibal Thiago Bezerra

Necessidade da busca por energia limpa e renovável



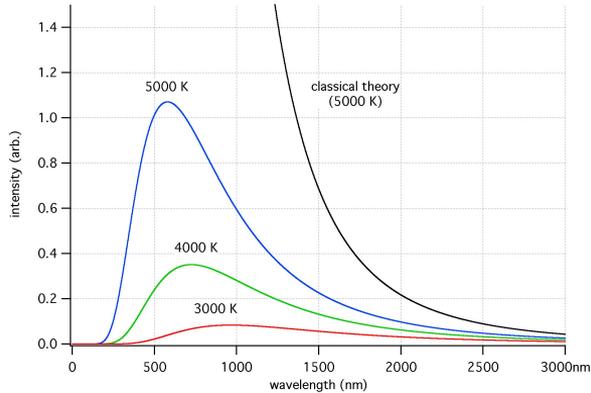
- Fontes não renováveis se utilizam de recursos naturais esgotáveis e resultam em problemas ambientais e disputas envolvendo a extração e a comercialização.
 - Maior fonte de energia elétrica no Brasil provém das hidrelétricas, que apesar de bastante eficazes, produzem impactos ambientais significativos.
-

Solução em Células Solares



- As vantagens: Impacto ambiental que, apesar de exigir espaço vasto, não há necessidade de modificar as condições naturais e sociais.
 - A energia proveniente do sol é constante e abundante, em especial, no Brasil.
 - Os problemas: Eficiência de absorção solar e custo de produção.
-

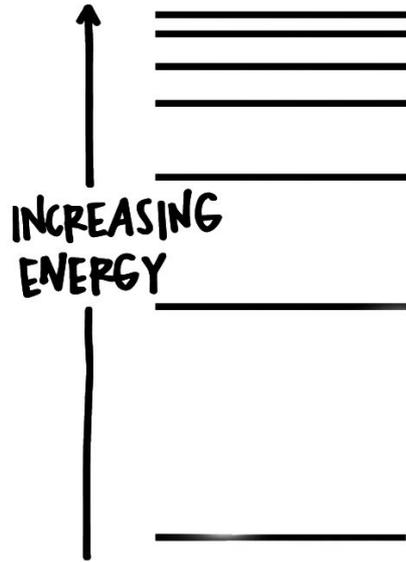
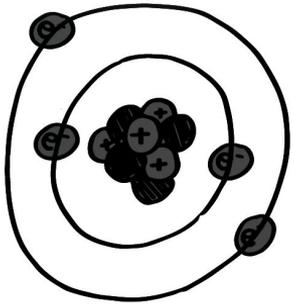
Mecânica Quântica



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{x})\psi = E\psi$$

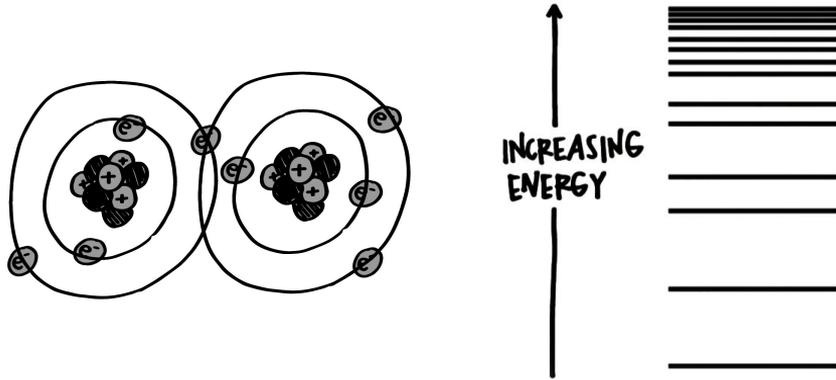
- 1900 - Catástrofe do Ultravioleta
- Discretização da energia $E = h\nu$ - Max Planck
- 1905 - Einstein com efeito fotoelétrico
- Louis de Broglie $\lambda = h/p$
- Regida pela equação de Schroedinger

Bandas Energéticas



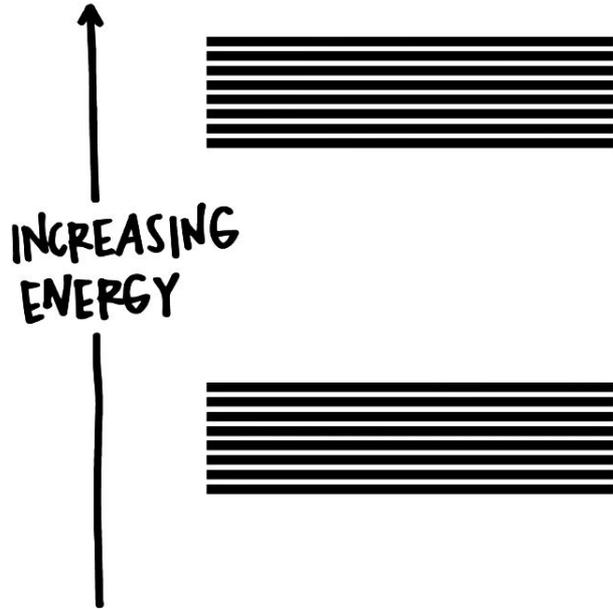
- No átomo isolado, elétrons podem ocupar níveis energéticos específicos

Bandas Energéticas



- Quando dois átomos são aproximados a degenerescência de troca desaparece, resultando na superposição das funções de onda
 - O desdobramento resulta em diferentes níveis energéticos
-

Bandas Energéticas

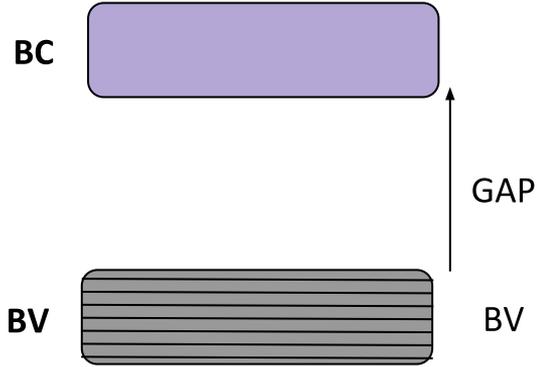


- Num sólido, trilhões de átomos interagem entre si
- Os níveis energéticos individuais se desdobram em estados muito próximos
- Os estados permitidos são correspondentes às subcamadas mais internas do átomo.

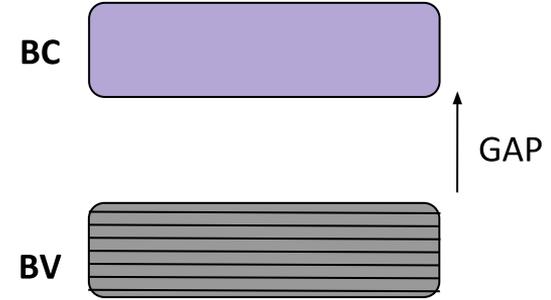
Semicondutores



Condutor

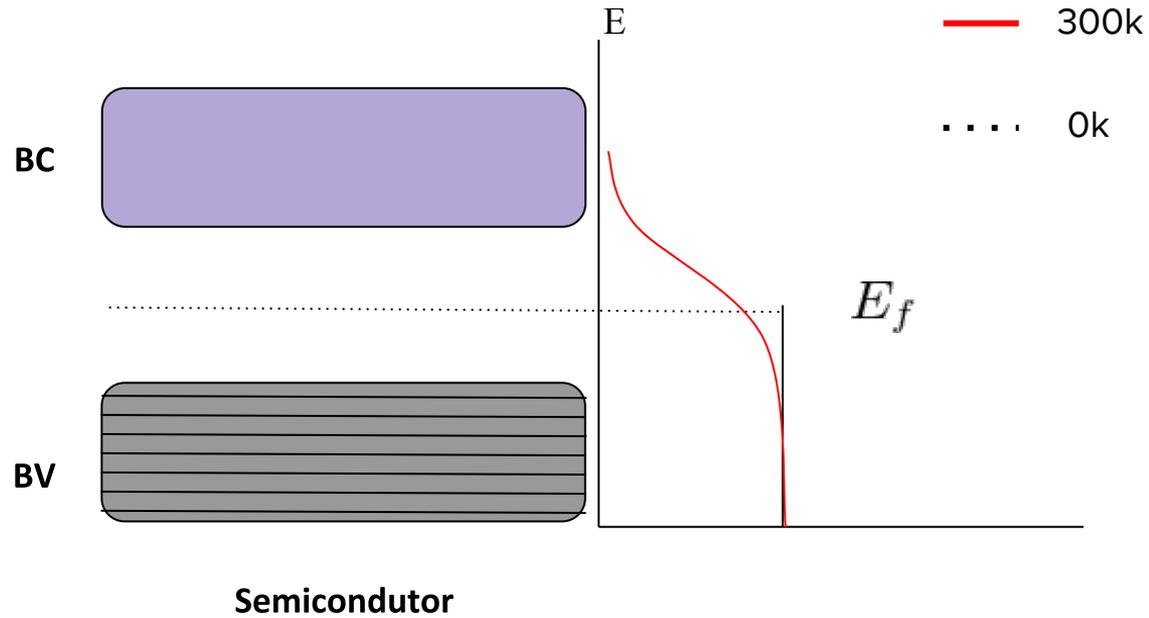


Isolante



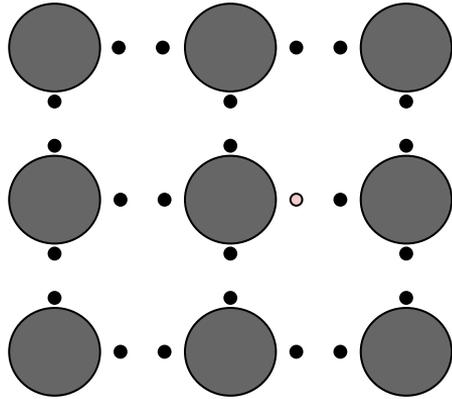
Semicondutor

Semicondutores



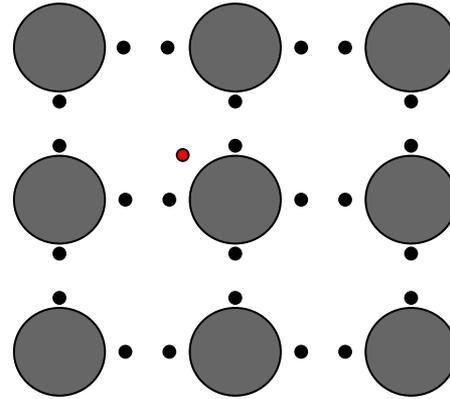
Semicondutores - Dopagem

Tipo p



Boro, Gálio ...

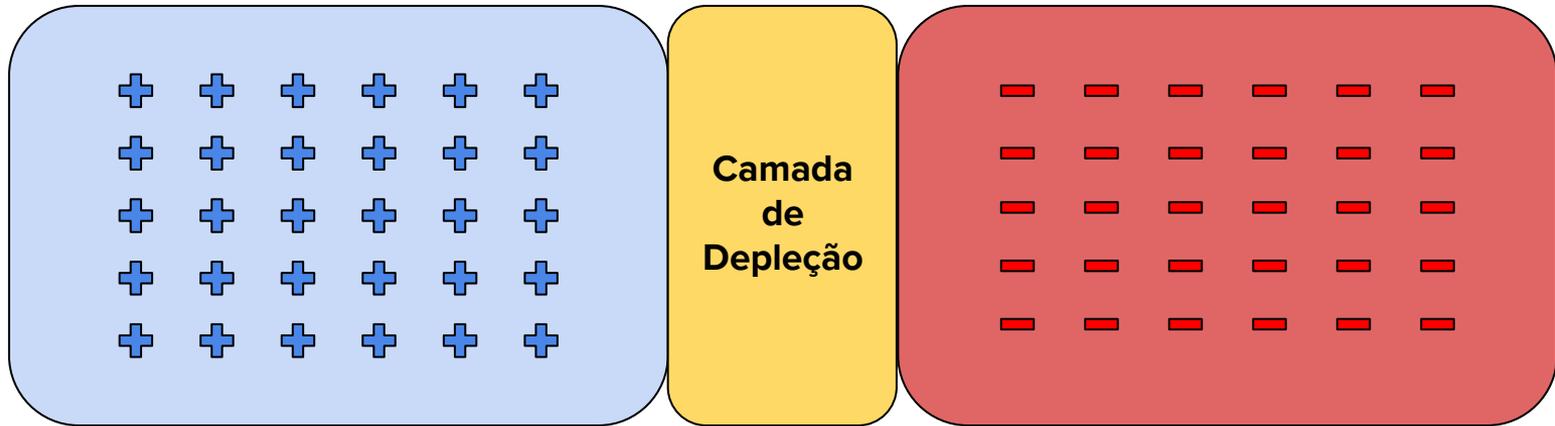
Tipo n



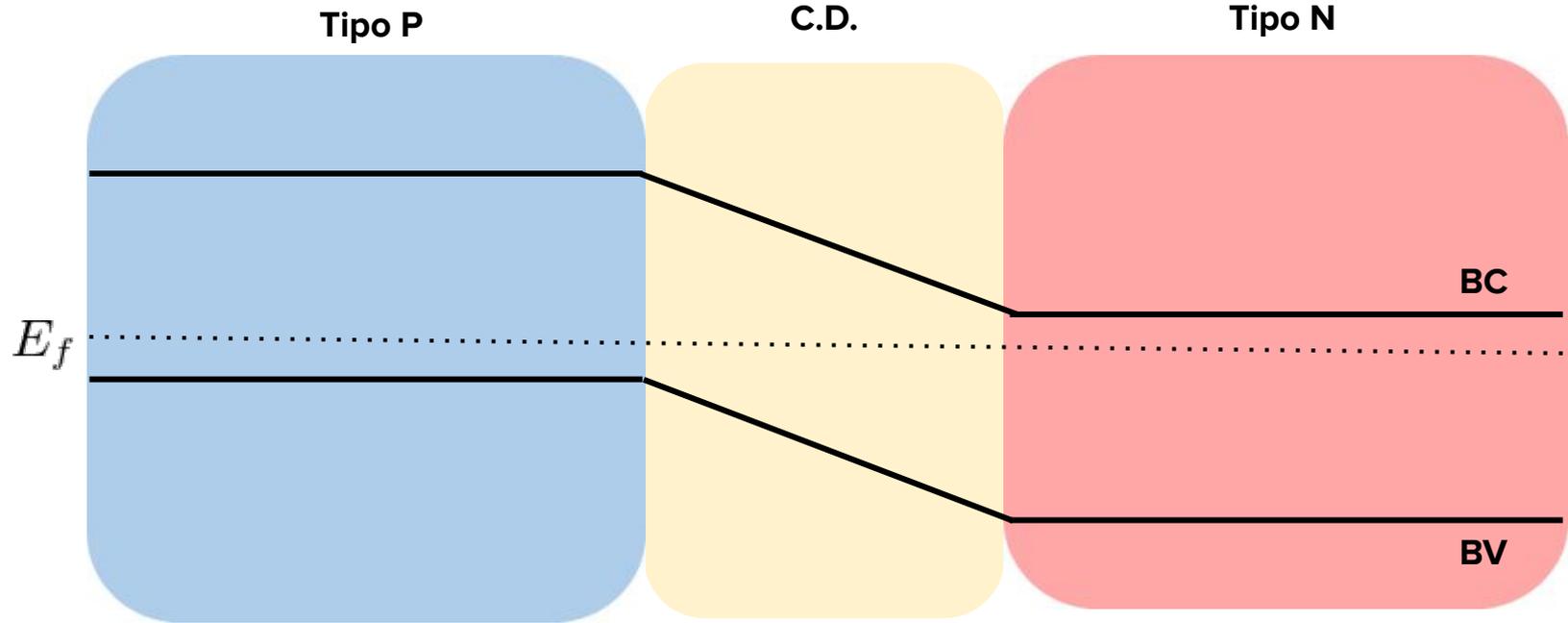
Fósforo, Arsênio ...

Semicondutores - Dopagem

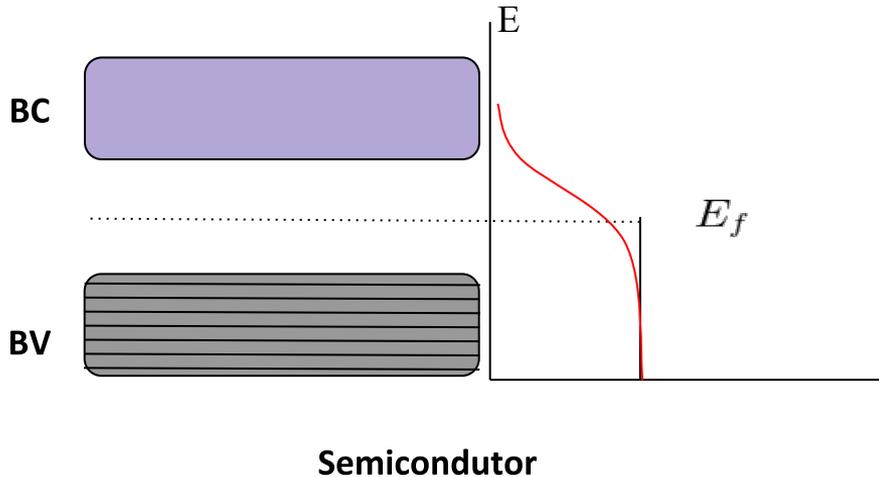
Junção p-n



Semicondutores - Dopagem



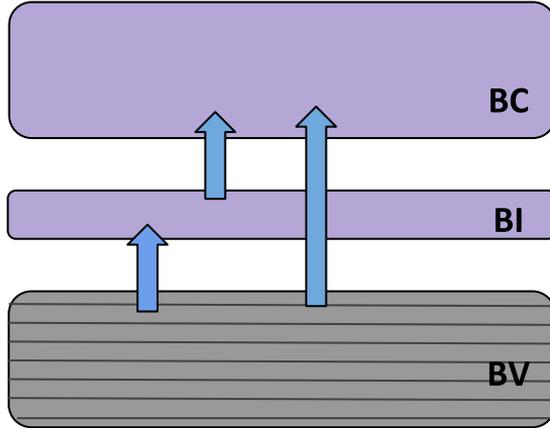
Células Solares



- Capazes de absorver radiação eletromagnética (espectro solar)
- Modelo mais comum de junção p-n única
- Limite de Shockley Queisser (30%)

Células Solares

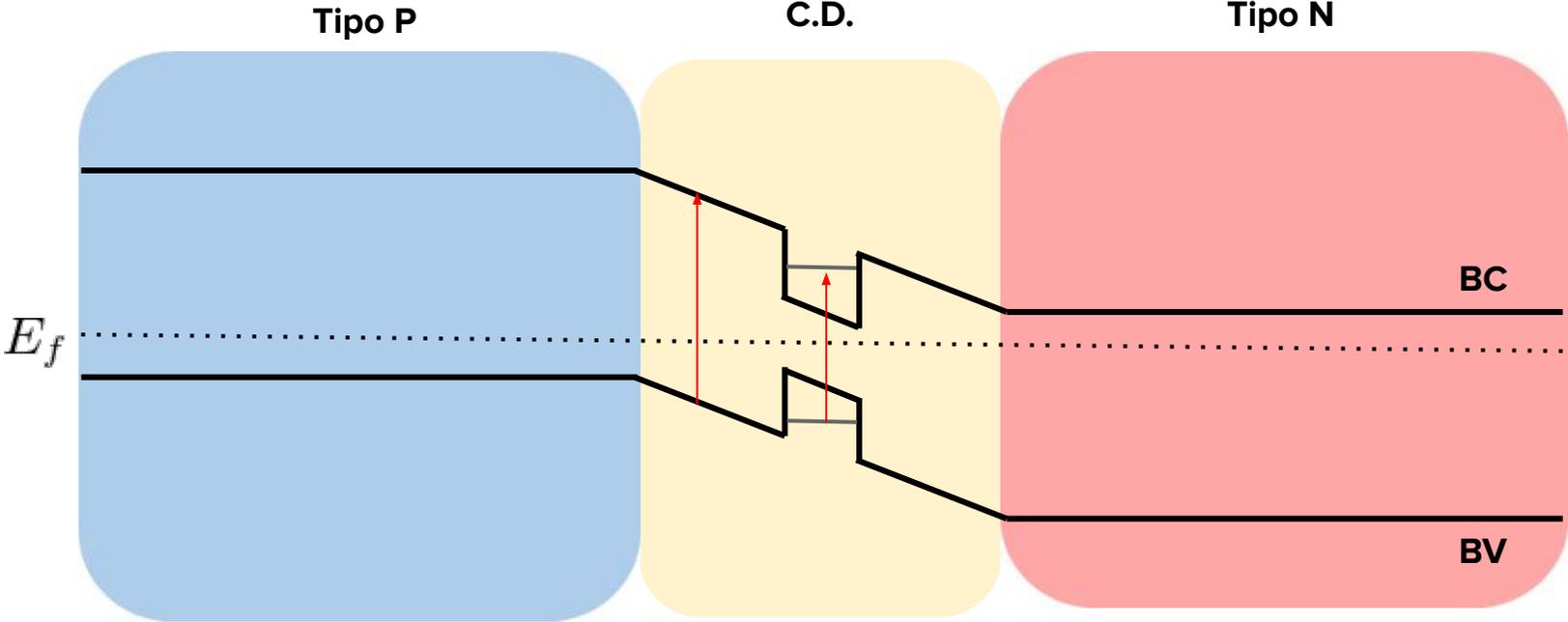
de Banda Intermediária



Semicondutor

- Banda intermediária responsável por aumentar a absorção
- Eficiência teórica de 60%
- Podem ser utilizados átomos de diferentes materiais ou confinamento na região de poços quânticos

Células Solares de banda Intermediária



Metodologia

- Objetivo de analisar e aumentar a gama de ferramentas necessária para o aprimoramento de células solares
- Fourier Grid Hamiltonian (FGH) e Discrete Variable Representation (DVR)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\mathbf{x})\psi = E\psi$$

Fourier Grid Hamiltonian (FGH)

- Nos permite colocar a equação de Schroedinger numa representação dual, das posições e do momento

$$\hat{H} = \hat{T} + V(\hat{x}) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

$$\langle x' | V(\hat{x}) | x \rangle = V(\hat{x}) \delta(x' - x)$$

$$\langle x' | \hat{H} | x \rangle = \int dk \langle x' | \hat{T} | k \rangle \langle k | x \rangle + V(x) \delta(x' - x)$$

$$\langle x | \hat{H} | x' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-x')} T_k dk + V(x) \delta(x' - x)$$

Aproximação de Massa Efetiva

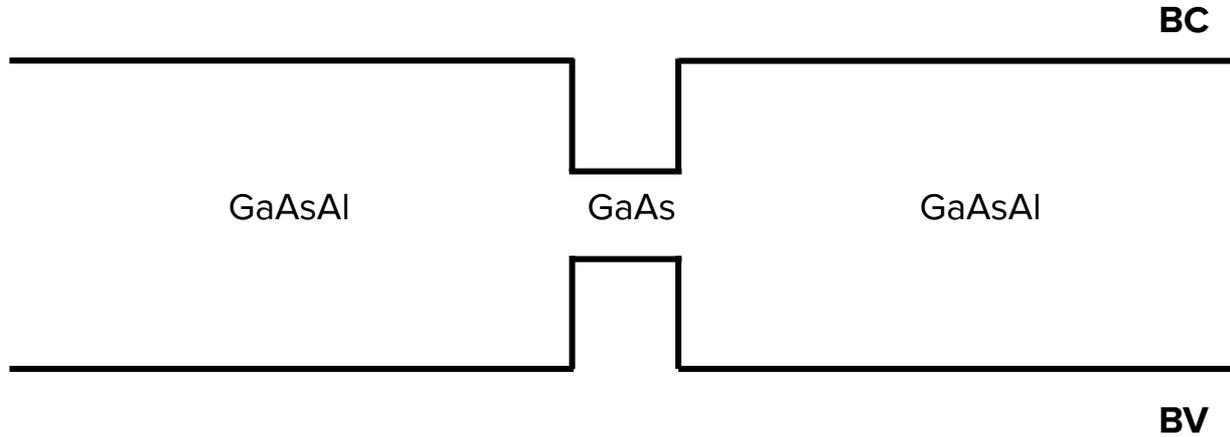
- São necessárias aproximações para a descrição da interação dos elétrons com a estrutura - Aproximação de banda parabólica e de massa efetiva.
- O problema de vários elétrons como um único.
- O potencial médio em regiões específicas pode ser substituído por massas efetivas
- A relação de dispersão é parabólica próxima ao GAP

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 |\psi_{n,k}\rangle = E |\psi_{n,k}\rangle$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2}$$

Aproximação de Massa Efetiva



Discrete Variable Representation (DVR)

- Construído em uma grade que representa o Hamiltoniano
- Leva em consideração a aproximação da massa efetiva

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{1}{m^*(\mathbf{x})} \vec{\nabla} \right) + \tilde{V}(\mathbf{x})$$

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{b-a}} \exp \left[i2\pi \frac{x-a}{b-a} \right]$$

$$\langle i | \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} | j \rangle = \sum_k \frac{1}{m_k^*} \langle i | \frac{\partial}{\partial x} | k \rangle \langle k | \frac{\partial}{\partial x} | j \rangle$$

$$\langle i | \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} | j \rangle = (-1)^{i-j} \frac{\pi^2}{(b-a)^2} \sum_{k \neq i,j}^{2N+1} \frac{1}{m^*} \frac{1}{\sin \left[\pi \frac{i-k}{2N+1} \right] \sin \left[\pi \frac{k-j}{2N+1} \right]}$$

Resultados - FGH

- Grade de 2000 pontos simétrica, potencial na forma de poço quântico
- Parâmetros ajustados para uma comparação fiel à semicondutores de banda intermediária

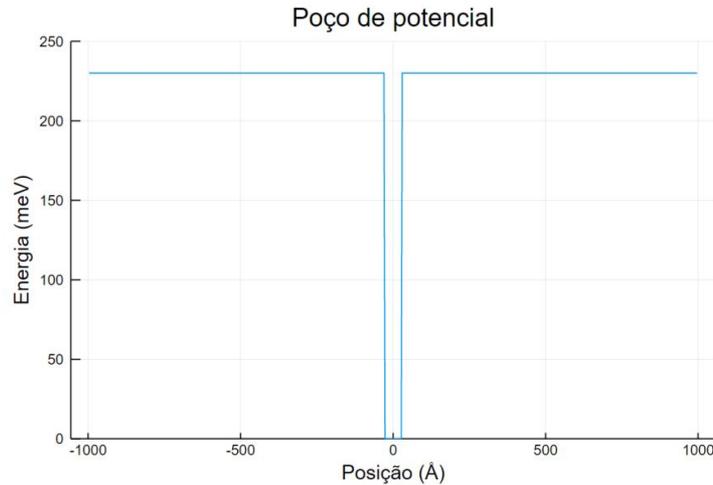
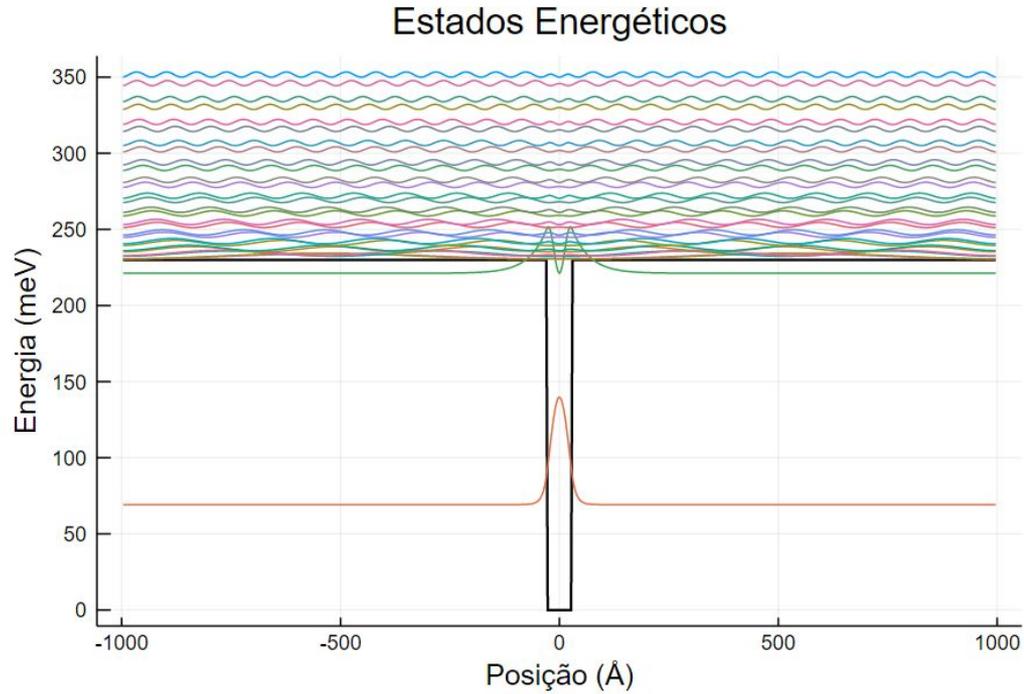


Figura 3 – Poço de Potencial

Resultados - FGH

- Material utilizado para implementação numérica - Arseneto de Gálio (GaAs)
- Grade de tamanho 2000 pontos (AA), potencial de largura de 56 AA e profundidade de 230 meV
- Após a construção, o Hamiltoniano é diagonalizado resultando nas autoenergias e autoestados do sistema
- Funções de onda pares e ímpares se degeneram - periodicidade da transformada de Fourier

Resultados - FGH



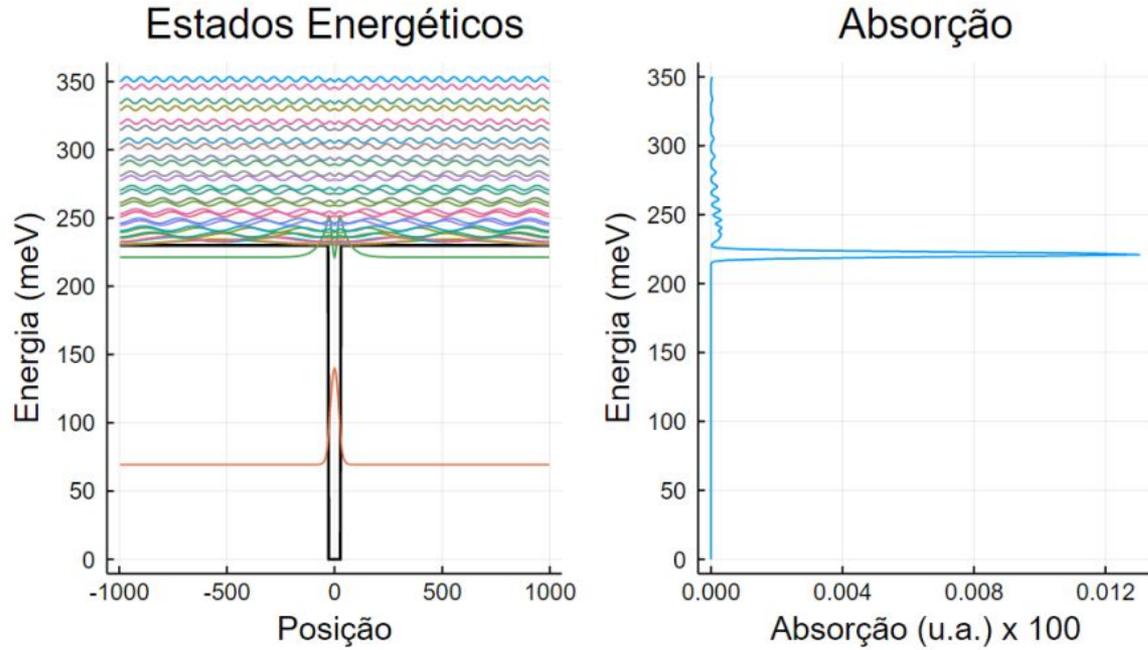
Resultados - FGH

- A taxa de absorção é calculada pela Regra de Ouro de Fermi a partir da equação

$$\alpha(\hbar\omega) \sim \sum_f |\langle \psi_i | -x | \psi_f \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - E_f - E_i)$$

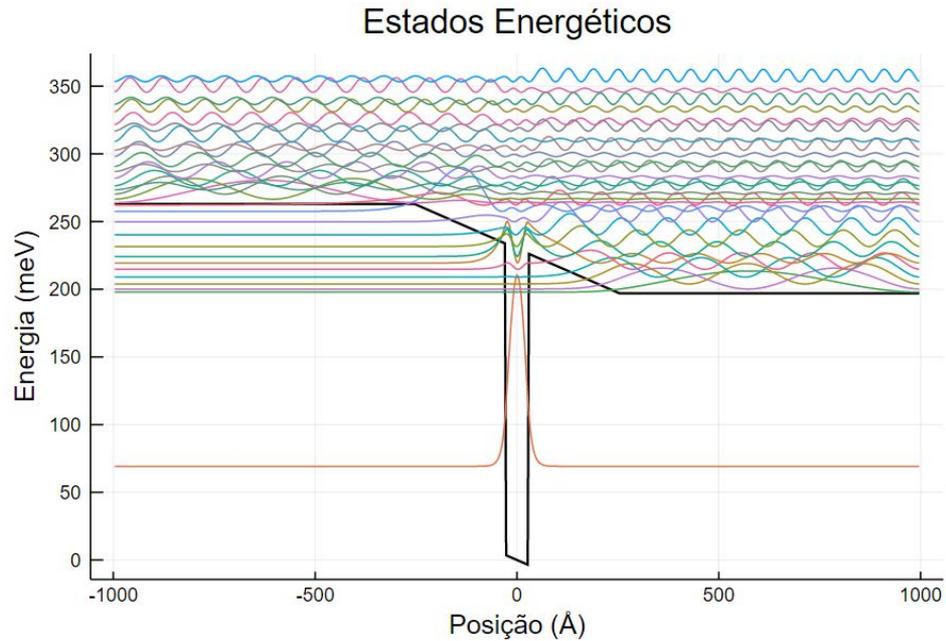
- Representa a taxa de absorção em função da energia para cada estado

Resultados - FGH



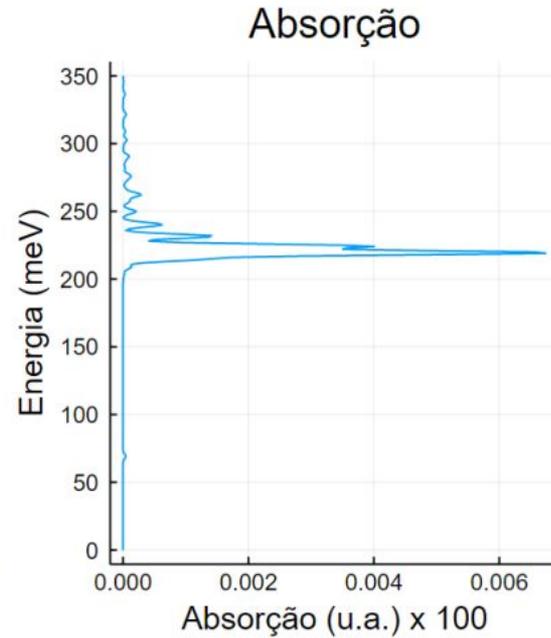
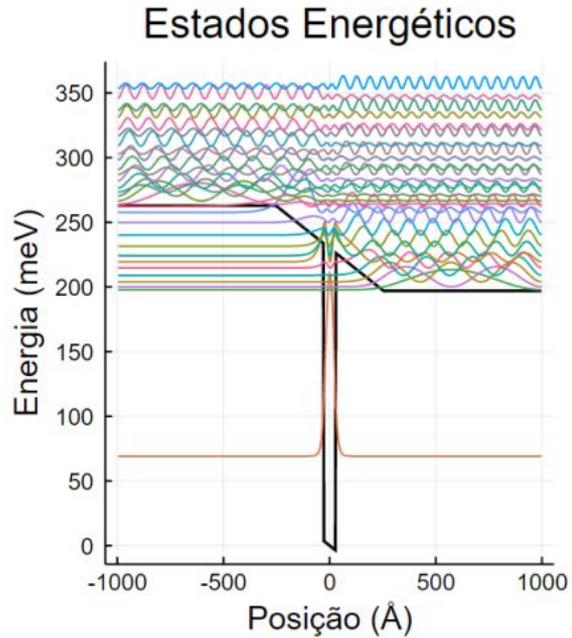
Resultados - FGH

- Representação de uma junção p-n (simulando um campo elétrico intrínseco)



Resultados - FGH

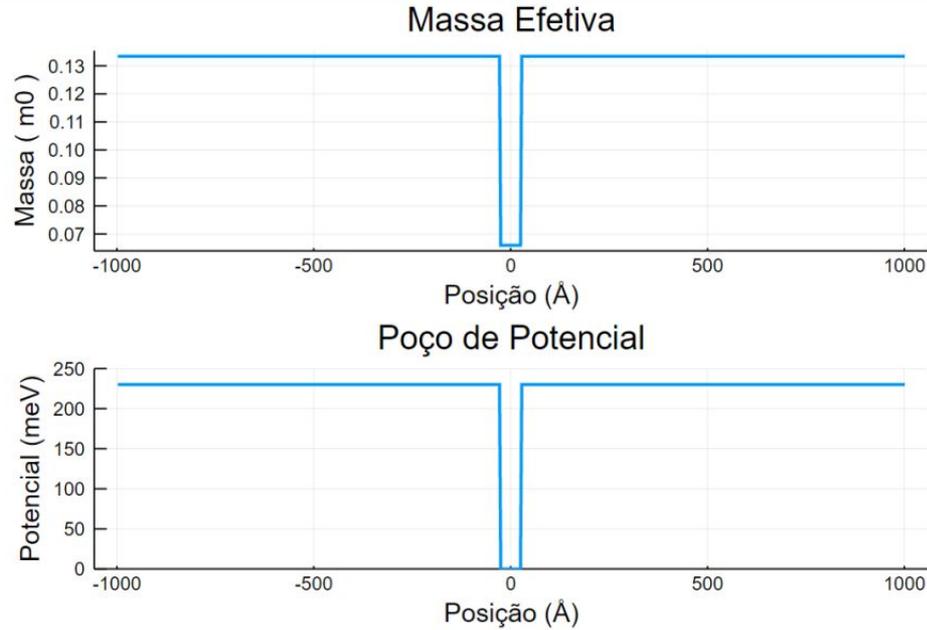
Com Campo Elétrico



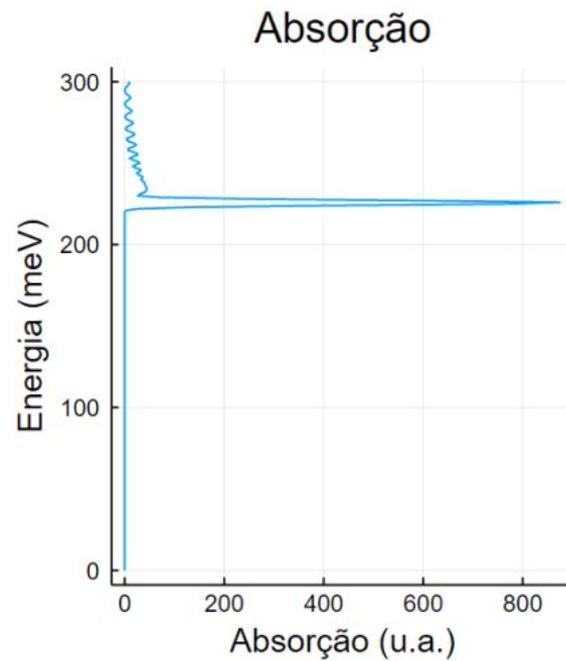
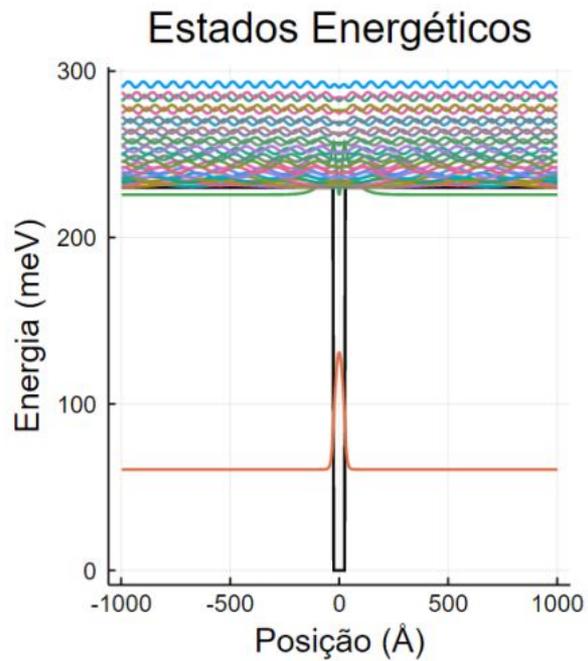
Resultados - DVR

- Material utilizado para implementação numérica - Arseneto de Gálio (GaAs) e Arseneto de Gálio com Alumínio (GaAsAl)
- Massa do GaAsAl = 0,1334m0 e GaAs = 0,066m0
- Funções de onda não ligadas são barradas pelas fronteiras

Resultados - DVR



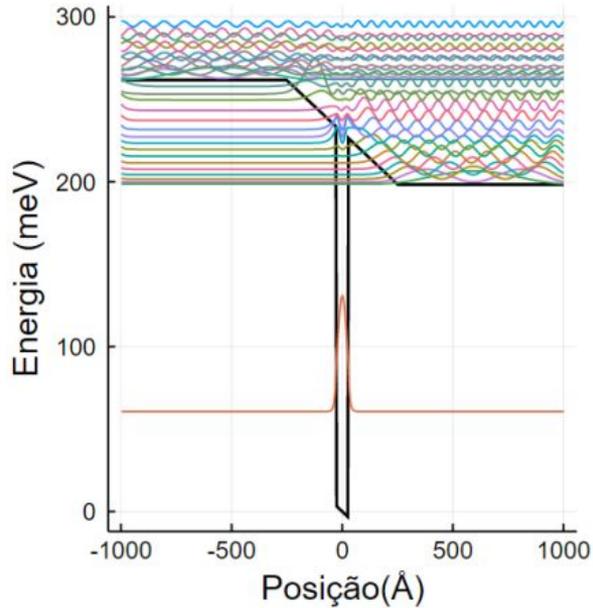
Resultados - DVR



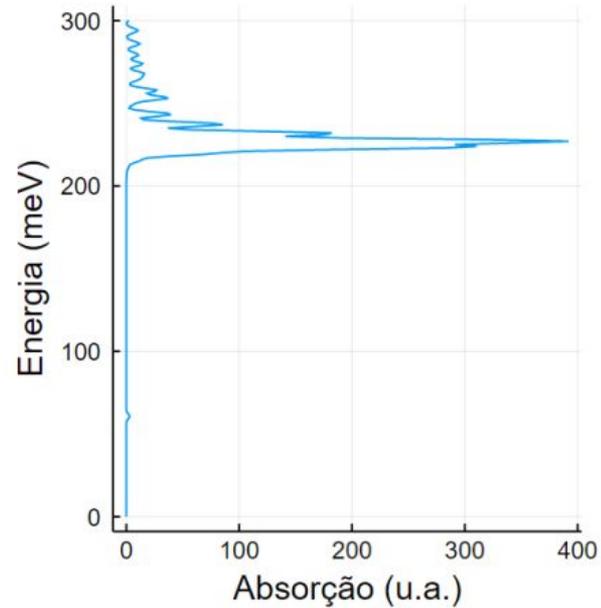
Resultados - DVR

Com Campo Elétrico

Estado Energéticos ligados



Absorção



Comparação entre os métodos

- Ambos são eficientes no quesito tempo, principal diferença é a consideração das massas.

Sem Campo Elétrico		
10 Primeiras Energias DVR (meV)	10 Primeiras Energias FGH (meV)	Diferença (%)
60.639	69.212	12.387
225.736	221.193	2.012
230.074	230.590	0.224
230.343	230.682	0.147
230.667	232.359	0.728
231.355	232.699	0.577
231.852	235.306	1.468
233.007	235.991	1.265
233.630	239.429	2.422
235.273	240.509	2.177

Comparação entre os métodos

Com Campo Elétrico		
10 Primeiras Energias DVR (meV)	10 Primeiras Energias FGH (meV)	Diferença (%)
60.612	69.174	12.378
198.700	197.840	0.433
199.847	200.142	0.147
201.742	203.900	1.059
204.349	208.945	2.199
207.608	214.753	3.327
211.401	219.391	3.642
215.516	224.209	3.877
219.660	231.543	5.132
223.521	240.177	6.935

Comparação entre os métodos

- Energia necessária para transição depende do gap + energia de transição a partir do estado fundamental
- Comparação com o espectro eletromagnético 1600 meV - 3100meV

FGH

Energias de transição (meV)	
Sem campo elétrico	Com campo elétrico
1727.963	1681.332
1746.756	1685.935
1746.940	1693.452
1750.294	1703.542
1750.974	1715.158

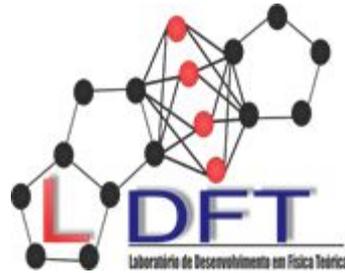
DVR

Energias de transição (meV)	
Sem campo elétrico	Com campo elétrico
1754.195	1700.176
1762.871	1702.471
1763.408	1706.260
1764.056	1711.476
1765.433	1717.993

Conclusão

- Energias coerentes dentre um método e outro
- Situação de interesse - Junção p-n
- Células solares de banda intermediária podem aumentar a eficiência dos dispositivos significativamente.

Obrigado



Email: jvalmeidajv@hotmail.com

Lattes: <http://lattes.cnpq.br/2453175476150473>