

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
VALPARAÍSO, CHILE.



Estudio de la función trabajo de grafeno para su uso
como conductor transparente sobre la capa emisora
para celdas de heterojuntura.

Proyecto de investigación para optar al grado de Licenciada en Física.

Autora:

María Saavedra Fredes

Supervisora:

Dra. Valeria del Campo

Comité:

Dr. Ricardo Henríquez

Dr. Patricio Häberle

Dr. Alfonso Zerwekh

Marzo 2024

Agradecimientos

Lo primero y más importante para mí, es agradecer a Dios por acompañarme en este proceso de crecimiento, no tan sólo en el área académica a lo largo de estos cuatro años, sino que también como persona. Es mi hogar y fortaleza. Me llevó a trabajar con la Dra. Valeria del Campo, Dr. Patrio Häberle y el Dr. Ricardo Henríquez y no podría estar más agradecida de tener físicos tan excepcionales como mis mentores en este trayecto. Espero algún día llegar a ser tan buena científica y profesora como ellos. También agradecer al profesor e ingeniero electrónico Rolando Esparza por ayudarme y enseñarme con mucha paciencia y dedicación como utilizar el equipo de medición y llevar a cabo dicho procedimiento, sin su ayuda este trabajo no habría sido posible. A Sofía Flores Bahamóndez por enseñarme el proceso de creación de grafeno y su transferencia, fue fundamental para el presente proyecto.

A mis amigos y compañeros de laboratorio que de una u otra forma me han hecho crecer como científica a través de su apoyo y enseñanza mutua.

Mi hermano y mejor amigo Victor, gracias por estar siempre a mi lado, son pocas las personas en el mundo que tienen una unión como la nuestra y agradezco a Dios que tu seas mi compañero.

Finalmente, pero no menos importantes, a mis padres, mi apoyo incondicional y mis mayores fanáticos. Me han levantado y guiado en cada paso que he dado en esta vida y de corazón deseo algún día llegar a ser tan buena madre a base del ejemplo que han sembrado en mi. Gracias por creer en mi siempre, su niña siempre creará en ustedes también.

También quiero agradecer el apoyo financiero de los siguientes proyectos: “Graphene as transparent current spreading electrode in silicon heterojunction solar cells” proyecto ANID-ECOS210038 #C21E08; “Millennium Nucleus in NanoBioPhysics” proyecto ANID - Millennium Science Initiative Program NNBP # NCN2021_021, “Glass nanopatterning for self cleaning photovoltaic modules” proyecto Fondecyt # 1210490; “Programa de Investigación y Desarrollo de Tecnologías Fotovoltaicas de alta Radiación y Climas Desérticos” proyecto 17PTECES-75830, CORFO y “Solar Energy Research Center” proyecto FONDAP # 1523A0006.

Dedicatoria

Le dedico todo mi trabajo a mi mamita Ema, mi abuela y mayor defensora, espero que desde el cielo sepa que cada vez que me levanto recuerdo el ejemplo de fortaleza, protección y amor que dejó en mi corazón.

Resumen

Desde la década de 1970, la energía fotovoltaica ha surgido como una solución clave para enfrentar la creciente crisis energética. En este contexto, la investigación se centra en evaluar la viabilidad del grafeno como óxido conductor transparente en celdas solares de silicio de heterojuntura con el propósito de reemplazar al costoso y limitado óxido de indio y estaño. Este tipo de celdas alcanzan actualmente una eficiencia del 26.6% en el mercado. Este estudio aborda el análisis de la función trabajo del óxido de grafeno, diversos tipos de silicio, y metales como platino y oro, buscando reducir la barrera de Schottky y mejorar así la eficiencia y rendimiento de las celdas solares. La síntesis de grafeno se realiza mediante deposición química en fase de vapor, y se mide el voltaje de frenado de los materiales en función de su energía cinética para determinar así su función trabajo.

Aunque se lograron resultados prometedores, se identificaron limitaciones al intentar ajustar adecuadamente la función trabajo en ciertos casos, como con el platino y la juntura de silicio cristalino tipo n y emisor amorfo tipo p. Entre los resultados destacados, se obtuvo una función trabajo para el óxido de grafeno sobre óxido de silicio tipo p de $\phi_{GO} = 5.3 \pm 0.3$ eV y para el silicio cristalino tipo n $\phi_{c-Si(n)} = 4.9 \pm 0.1$ eV, ambos casos concordando con la literatura existente. Sin embargo, para el platino la función trabajo obtenida es de $\phi_{Pt} = 4.6 \pm 0.1$ eV, indicando problemas superficiales en la muestra y no del modelo utilizado para la obtención de dicha magnitud. Para el caso de la juntura np de silicio cristalino tipo n con emisor amorfo tipo p, se obtuvieron valores de función trabajo significativamente más altos de $\phi_{c-Si(n)} = 7.89 \pm 0.18$ eV y $\phi_{emitter(p)} = 9.843 \pm 0.005$ eV respectivamente. Las resistencias en la cara posterior de la juntura es de 260 Ω descartando así limitancias en la conductividad que podrían explicar dicho resultado, para el caso de la cara frontal la resistencia es de 10.73 M Ω .

Aunque el óxido de grafeno es prometedor como óxido conductor transparente, los resultados sugieren que el óxido de indio y estaño sigue siendo la opción adecuada en algunas aplicaciones específicas de celdas solares.

Abstract

Since the 1970s, photovoltaic energy has emerged as a key solution to address the growing energy crisis. In this context, the research focuses on evaluating the viability of graphene as a transparent conductive oxide in silicon heterojunction solar cells with the purpose of replacing the costly and limited indium tin oxide. These types of cells currently achieve an efficiency of 26.6% in the market. This study addresses the analysis of the work function of graphene oxide, various types of silicon, and metals such as platinum and gold, aiming to reduce the Schottky barrier and thus improve the efficiency and performance of solar cells. Graphene synthesis is carried out through chemical vapor deposition, and the braking voltage of the materials is measured as a function of their kinetic energy to determine their work function.

Although promising results were achieved, limitations were identified when trying to properly adjust the work function in certain cases, such as with platinum and the junction of n-type crystalline silicon with p-type amorphous emitter. Among the highlighted results, a work function was obtained for graphene oxide on p-type silicon oxide of $\phi_{GO} = 5.3 \pm 0.3$ eV and for n-type crystalline silicon $\phi_{c-Si(n)} = 4.9 \pm 0.1$ eV, both cases agreeing with existing literature. However, for platinum, the obtained work function is $\phi_{Pt} = 4.6 \pm 0.1$ eV, indicating surface problems in the sample rather than issues with the model used to obtain such magnitude. For the n-type crystalline silicon with p-type amorphous emitter junction, significantly higher work function values were obtained of $\phi_{c-Si(n)} = 7.89 \pm 0.18$ eV and $\phi_{emitter(p)} = 9.843 \pm 0.005$ eV, respectively. The resistances on the back side of the junction are 260Ω , thus ruling out conductivity limitations that could explain this result. For the front side, the resistance is $10.73 M\Omega$.

Although graphene oxide shows promise as a transparent conductive oxide, the results suggest that indium tin oxide remains the appropriate option in some specific solar cell applications.

Glosario

SHJ: Heterojuntura de silicio (*silicon heterojunction*)

TCO: Óxido conductor transparente (*transparent conductive oxide*)

ITO: Óxido de indio y estaño (*indium tin oxide*)

ϕ ó WF : Función trabajo (*work function*)

E_g : Brecha energética (*band gap*)

E_{ph} : Energía del fotón (*photon's energy*)

V_{Fil} : Voltaje de filamento (*filament voltage*)

V_C : Voltaje de cátodo (*cathode voltage*)

V_A : Voltaje de ánodo (*anode voltage*)

V_F : Voltaje de foco (*bulb voltage*)

V_{rep} : Voltaje de repulsión (*repulsion voltage*)

E_K : Energía cinética de los electrones emitidos por el cañón (*kinetic energy of the emitted electrons*)

GO: Óxido de grafeno (*graphene oxide*)

FF: Factor de llenado (*fill factor*)

V_{OC} : Voltaje de circuito abierto (*open-circuit voltage*)

I_{SC} : Corriente de cortocircuito (*short-circuit current*)

P_{MP} ó MPP : Punto de potencia máxima (*maximum power point*)

$c - Si(n)$: Silicio cristalino dopado tipo n (*N-type doped crystalline silicon*)

$a - Si: H(n)$: Silicio amorfo hidrogenado intrínseco tipo n (*Intrinsic hydrogenated amorphous silicon, n-type*)

$a - Si: H(p)$: Silicio amorfo hidrogenado intrínseco tipo p (*Intrinsic hydrogenated amorphous silicon, p-type*)

$a - Si: H(i)$: Silicio amorfo hidrogenado intrínseco (*Intrinsic hydrogenated amorphous silico*)

Índice de contenidos

Agradecimientos	2
Dedicatoria	3
Resumen	4
Abstract	5
Glosario	6
1. Introducción	8
1.1. Antecedentes	9
1.1.1. Celdas Solares de Silicio de Heterojuntura (SHJ)	9
1.1.1.1. Semiconductores y Silicio	10
1.1.1.2. Óxido Conductor Transparente (TCO) y Grafeno	13
1.1.1.3. Parámetros de la Celda Solar	14
1.1.2. Función Trabajo	16
1.1.2.1. Barrera de Schottky	16
1.1.2.2. Modelo Teórico	17
2. Estado del Arte	18
2.1. Valores reportados de función trabajo para diferentes materiales	18
2.2. Pérdidas de transporte relacionadas con la función de trabajo del TCO en el contacto a-Si:H/TCO en celdas solares SHJ	19
3. Metodología	20
3.1. Síntesis, caracterización y transferencia de grafeno	20
3.2. Sistema de medición de Voltaje de Repulsión	26
4. Resultados y Análisis	28
4.1. Calibración del sistema usando Au(111)	28
4.2. Platino	30
4.3. Óxido de grafeno sobre óxido de silicio cristalino dopado tipo p	31
4.4. Silicio cristalino tipo n	34
4.5. Silicio cristalino tipo n con emitter amorfo tipo p	35
5. Conclusión y Proyecciones	39
6. Bibliografía	41

1. Introducción

Con el aumento de la crisis energética a nivel global, la búsqueda de soluciones para abordar este desafío también se intensifica. Por lo tanto, uno de los enfoques clave en la generación de energía se centra en la adopción de sistemas basados en energías renovables, como el desarrollo de diversas tecnologías de celdas solares, con el propósito de mejorar su eficiencia y reducir los costos de producción. Las celdas solares son dispositivos semiconductores diseñados para convertir la energía lumínica del sol en electricidad utilizable.

Dentro del amplio espectro de tipos de celdas solares, merece especial atención la categoría de celdas de silicio de heterojuntura, abreviadas como SHJ (por sus siglas en inglés, *Silicon Heterojunction*), las cuales han logrado aumentar actualmente la eficiencia de conversión de energía (PCE) de las celdas solares de silicio cristalino en más del 26% [1]. Un aspecto clave que se busca mejorar en este tipo de celdas es la película conductora transparente utilizada, abreviada como TCF (por sus siglas en inglés, *Transparent Conductive Film*), estos materiales tienen la capacidad de conducir electricidad, al mismo tiempo que permiten que la luz solar pase a través de ellos sin obstrucciones significativas. En la construcción de celdas de silicio de heterojuntura (SHJ), el óxido transparente predominante es el óxido de indio y estaño (ITO) debido a sus propiedades químicas, eléctricas y ópticas. Sin embargo, este material es escaso y costoso, lo que restringe la accesibilidad de los consumidores a este tipo de fuentes de energía renovable.

Por ello se propone un nuevo tipo de película conductora transparente para el reemplazo del ITO, este material corresponde al grafeno, una forma bidimensional del carbono que consiste en una sola capa de átomos, y se distingue por sus propiedades electrónicas excepcionales, capacidad de conducción de carga, transparencia óptica, propiedades físicas y mecánicas sobresalientes, alta conductividad térmica, entre otras características [2].

La medición de la función trabajo es de gran importancia para determinar cómo se comportarán los electrones en las interfaces entre el grafeno y otros materiales. Esta información resulta esencial para comprender y aprovechar las propiedades únicas del grafeno como conductor transparente y su viabilidad como candidato para reemplazar al ITO. En este proyecto, estudiaremos el potencial de grafeno como conductor transparente en sustitución del óxido de indio y estaño (ITO), centrándonos especialmente en su función trabajo.

1.1. Antecedentes

Para obtener una comprensión más profunda del tema de estudio, resulta crucial explorar el concepto de celdas solares de silicio de heterojuntura (SHJ), entender sus componentes y analizar cómo el grafeno se presenta como una alternativa para cumplir el papel de material conductor transparente en estas celdas solares. Asimismo, es de suma importancia abordar el concepto de función trabajo, ya que este desempeña un papel protagónico en la investigación que se presenta en el proyecto.

1.1.1. Celdas Solares de Silicio de Heterojuntura (SHJ)

En las últimas dos décadas, hemos sido testigos de un crecimiento sin precedentes en la energía fotovoltaica. Su papel protagónico en la búsqueda de soluciones sostenibles para el creciente desafío de la demanda energética a nivel mundial ha destacado de manera significativa. Tanto es así, que se proyecta que para el año 2030, la capacidad global de energía fotovoltaica alcance la cifra de 3 terawatts (TW)[3] .

Como se mencionó anteriormente, una celda solar fotovoltaica corresponde a un dispositivo electrónico que convierte directamente la luz solar en electricidad mediante el efecto fotovoltaico. Entre las variantes de celdas solares presentes en el mercado, destacan las celdas de silicio cristalino de heterojuntura (SHJ) por su notable eficiencia de 26.6% [4].

La heterojuntura, se define como la unión establecida entre dos semiconductores distintos. La Figura 1 proporciona un esquema representativo de la estructura característica de estas celdas solares. Este diseño particular, conformado por diversos parámetros, contribuye a maximizar la eficiencia en la conversión de la luz solar en electricidad. Esto consolida la posición destacada de las células SHJ en el actual panorama de la tecnología fotovoltaica.

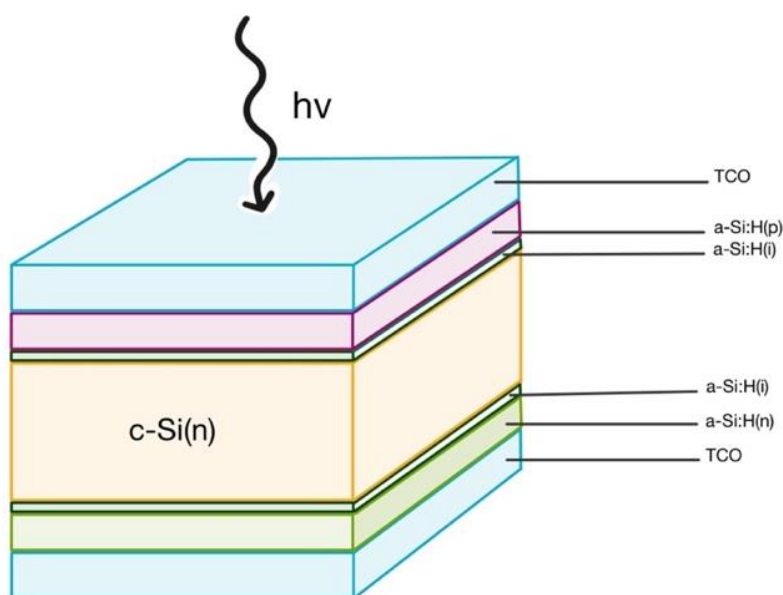


Figura 1. Diagrama representativo de una celda SHJ.

1.1.1.1. Semiconductores y Silicio

Para una comprensión exhaustiva del funcionamiento de las celdas solares y su habilidad para transformar la luz solar en electricidad, resulta imperativo adentrarse en la esencia de los semiconductores, componentes esenciales en su estructura y operación. Conforme se ha aludido previamente, una celda solar consta de diversos elementos que colaboran en esta conversión de energía, y entre ellos, destaca con relevancia el semiconductor.

Es esencial comprender el concepto de bandas de energía como punto de partida para explorar este tema. Esto nos proporcionará una base sólida para entender por qué los materiales semiconductores son la elección ideal para la absorción de luz en los sistemas fotovoltaicos.

A medida que los átomos se acercan entre sí, los niveles de energía originales se dividen en bandas de energía permitida. Dentro de este contexto, podemos identificar dos bandas fundamentales: la "banda de conducción," que se ubica en la parte superior, y la "banda de valencia," que ocupa la región inferior.

La distinción entre estas regiones se establece mediante una característica crítica conocida como "*band gap*", E_g . Esta brecha de energía indica tanto la ausencia de estados electrónicos en ese rango como la cantidad de energía requerida para trasladar un electrón desde la banda de valencia a la banda de conducción, permitiéndole conducir corriente eléctrica. La magnitud del band gap desempeña un papel determinante en la clasificación del material como conductor, semiconductor o aislante [5]. Sin embargo, también es importante considerar la energía de los fotones, E_{ph} , que interactúan con el material. Para ilustrar este punto de manera más clara, podemos observar la Figura 2.

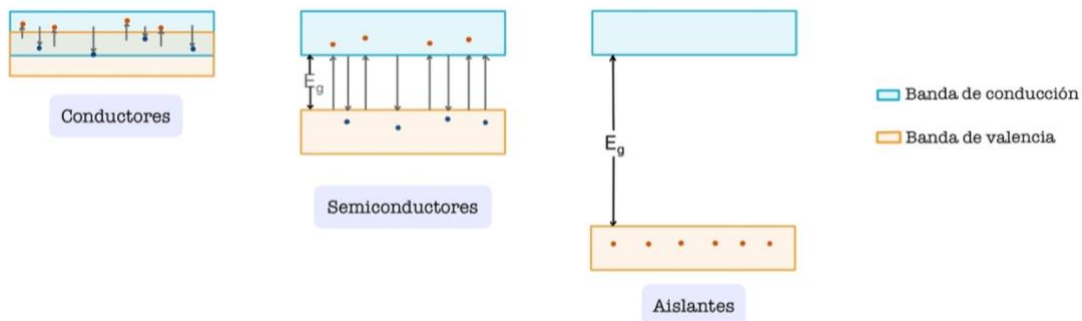


Figura 2. Diagrama representativo del comportamiento de las bandas de energía para diferentes materiales, conductor, semiconductor y aislante respectivamente.

Para el caso de los conductores, se produce una superposición entre las bandas, lo que resulta en que no exista una brecha energética (*band gap*). En consecuencia, no es necesario que los electrones absorban energía para moverse entre estas bandas, generando consigo pérdidas energéticas dada su movilidad y colisiones producidas entre sí.

Por otra parte, los semiconductores poseen una brecha energética lo suficientemente apartada (aproximadamente separadas por 1 eV [6]), el electrón en la banda de valencia

absorbe la energía del fotón y salta a la banda de conducción. Esto permite al electrón moverse con mayor libertad en la banda de conducción, lo que le facilita su desplazamiento y su capacidad para contribuir a la generación de corriente eléctrica. Las pérdidas energéticas son mínimas debido a que en este proceso, se genera un par electrón hueco [7].

Finalmente, para los materiales aislantes prácticamente no hay electrones en la banda de conducción, y la banda de valencia está llena. Para un aislante, las bandas de valencia y conducción están bastante separadas (más de 5 eV) [6]), por ende, aunque se lleve a cabo un proceso de absorción por parte de los electrones, los fotones no necesariamente tendrán la energía necesaria para poder llegar a la banda de conducción.

Debido a esto, los semiconductores son considerados el material óptimo para su uso en celdas solares, en donde se presentan los siguientes casos:

$E_{ph} < E_g$: No se produce absorción lumínica y hay pérdidas energéticas.

$E_{ph} \cong E_g$: Se produce absorción lumínica, se minimizan las pérdidas energéticas y se crea un par electrón-hueco.

$E_{ph} > E_g$: Se produce absorción lumínica, creará un par electrón hueco si su energía es lo suficientemente alta. No obstante, cuando la energía del fotón es significativamente mayor que la diferencia de energía entre las bandas (*band gap*), el proceso de termalización provoca una gran pérdida de energía.

El silicio destaca como el semiconductor más eficiente en el mercado, gracias a una serie de factores. En primer lugar, su abundancia en la corteza terrestre lo convierte en un recurso fácilmente accesible para la producción de dispositivos semiconductores. Además, su resistencia a la degradación causada por factores ambientales juega un papel fundamental en la garantía de la durabilidad a largo plazo de las celdas.

Un elemento clave que potencia su rendimiento es su *bandgap*, que se sitúa en aproximadamente 1.1 eV. Este valor específico contribuye significativamente a las propiedades eléctricas del silicio, permitiendo su aplicación en diversas tecnologías, especialmente en la fabricación de celdas fotovoltaicas.

En la Figura 3, podemos apreciar cómo se distribuye la energía solar a lo largo del espectro electromagnético para el caso de la masa de aire AM 1.5 [8], valor correspondiente al estándar utilizado para estudiar las condiciones típicas lumínicas a las cuales se ven expuestas las celdas solares en la Tierra. La mayor intensidad de fotones se encuentra alrededor del espectro visible, por ende, es de suma importancia que el semiconductor utilizado posea un rango de absorción dentro de dicho espectro. El silicio cumple con este parámetro (Figura 4).

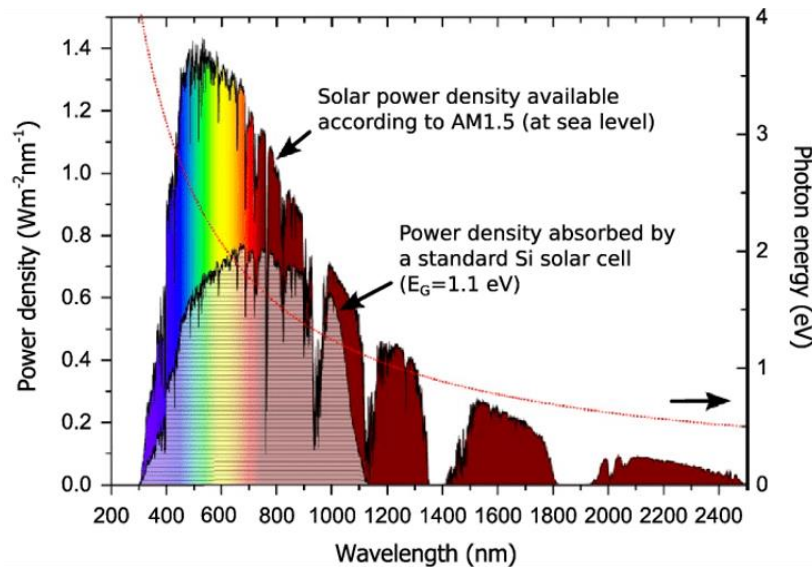


Figura 3. Espectro de Irradiancia Solar para AM 1.5 [8].

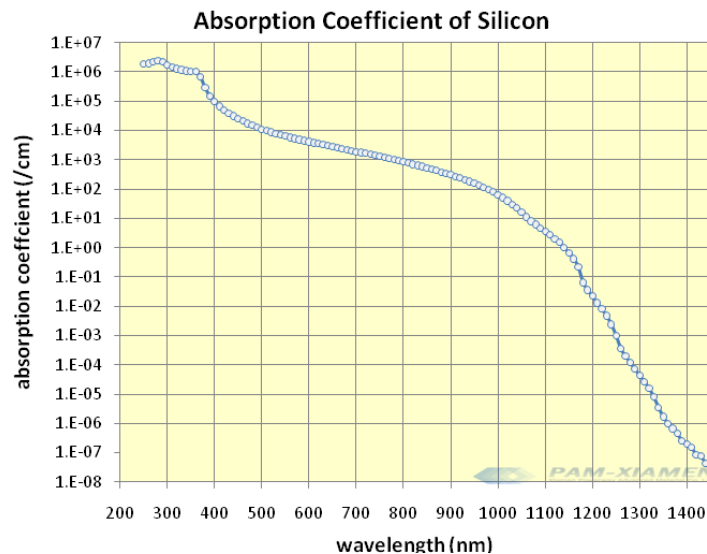


Figura 4. Gráfico de coeficiente de absorción del Silicio [9].

Para el funcionamiento de una celda solar es necesario separar los electrones de los huecos, y por lo tanto, generar una juntura np. Por esta razón resulta imperativo introducir impurezas con el propósito de potenciar el rendimiento de la celda solar. Este proceso se logra a través del dopaje, tanto tipo n como tipo p.

En el dopaje tipo n, se incorporan átomos con un electrón adicional en su capa de valencia. Esta técnica busca incrementar la concentración de electrones libres en la banda de conducción del silicio.

En contraste, el dopaje tipo p implica la introducción de átomos con un electrón menos en su capa de valencia. Con este método, se busca aumentar la densidad de huecos en la banda de valencia del silicio, contribuyendo de manera efectiva a optimizar su capacidad de conducción. A través del análisis detallado de la Figura 1, se revela la implementación

de este concepto con el propósito de optimizar la eficiencia de la celda. Asimismo, se contempla el uso de silicio amorfo hidrogenado como una estructura clave en el proceso de dopaje. Las celdas solares construidas con silicio amorfo destacan por su mayor tolerancia a sombras parciales y condiciones de luz difusa. Esta característica implica que estas celdas pueden generar electricidad incluso en condiciones de iluminación menos que ideales, convirtiéndolas en una elección más idónea para áreas con climas nublados o lugares con sombreado.

No solo potencian la eficiencia de la celda, sino que también la presencia de átomos de hidrógeno en la estructura contribuye significativamente a mejorar las propiedades eléctricas del silicio amorfo, como su capacidad para transportar cargas.

En las celdas SHJ la capa c-Si(n) corresponde a la base, cuya función principal es la absorción de fotones, mientras que la capa de silicio amorfo hidrogenado tipo p (a-Si:H(p)) toma el papel de *emitter* (emisor), cuya función es formar la juntura np, permitiendo así activar la separación de cargas y generar una corriente eléctrica utilizable en el dispositivo solar.

Mientras que la capa de silicio amorfo hidrogenado tipo n (a-Si:H(n)) corresponde al campo superficial trasero, es decir, recoge los portadores de carga generados en la celda solar y los dirige hacia el circuito eléctrico externo, contribuyendo así a la generación de corriente eléctrica utilizable en el dispositivo solar.

Entre las capas de c-Si(n) y a-Si:H(p) se encuentra silicio amorfo hidrogenado intrínseco a-Si:H(i), su función es actuar como una capa intermedia sin dopaje que facilita la formación de la unión np en la heterojuntura. Permite que el campo eléctrico penetre en su estructura amorfa, lo que facilita la separación de cargas eléctricas. Esto significa que los electrones de la capa n pueden migrar hacia la capa p y recombinarse con los huecos presentes allí, formando así pares electrón-hueco. Las capas de a-Si además, absorben la luz de alta energía debido a su *bandgap* ancho.

1.1.1.2. Óxido Conductor Transparente (TCO) y Grafeno

Los óxidos conductores transparentes son materiales eléctricamente conductores con una absorción notablemente baja de ondas electromagnéticas en la región visible del espectro [10]. Actualmente, el ITO (óxido de estaño e indio) es el material más utilizado para desempeñar el papel de conductor transparente en la celda solar debido a su alta transmisión (>80%), alta conductividad ($10^4 \Omega^{-1}cm^{-1}$), baja absorción de luz, bajo índice de refracción, alta estabilidad y resistencia [11]. Lamentablemente, este material no está exento de problemas y desafíos, como su escasez, dificultades en la uniformidad y homogeneidad de las capas, desafíos en la modulación de la permitividad y pérdida de transparencia a bajas longitudes de onda. Estas características desfavorables han impulsado la búsqueda de nuevos materiales que ofrezcan propiedades óptimas para cumplir de manera eficiente con su función en la celda solar. Es en este contexto el grafeno emerge como una alternativa prometedora.

El grafeno es una forma alotrópica del carbono, lo que significa que está compuesto exclusivamente por átomos de carbono dispuestos en una estructura específica. En el caso del grafeno, cada átomo de carbono está unido a otros tres átomos del mismo tipo mediante enlaces covalentes, formando una estructura bidimensional de panel de abeja extremadamente plana.

Entre sus características más relevantes destaca en ser un material formado por una capa de espesor, ser el más resistente jamás medido y además es transparente. Sus portadores de carga exhiben una movilidad intrínseca gigante, tienen la masa efectiva más pequeña (es cero) y pueden recorrer distancias de micrómetros sin dispersarse a temperatura ambiente. El grafeno puede soportar densidades de corriente 6 órdenes de magnitud más altas que el cobre, muestra una conductividad térmica y rigidez récord, es impermeable a los gases y concilia cualidades contradictorias como la fragilidad y la ductilidad [12]. Cabe resaltar que, además de estas propiedades, el grafeno presenta un costo de producción comparativamente más bajo en relación con el material líder en el mercado, lo que lo posiciona como un candidato de estudio altamente favorable.

Tabla 1. Comparación de parámetros entre el óxido de indio y estaño y el grafeno [7].

	Óxido de Indio y Estaño	Grafeno
Transmisión	>80%	80%
Resistencia en contacto con Si	$95 \Omega sq^{-1}$	$10 \Omega sq^{-1}$
Índice de refracción para 600 nm	n=1.9	n=2.5

1.1.1.3. Parámetros de la Celda Solar

La curva voltaje-corriente de una celda solar se basa en la ecuación del diodo, ya que puede ser representada eléctricamente como un diodo semiconductor, en el que se produce una corriente debido a la incidencia de fotones que generan pares electrón-hueco.

$$I = I_{ph} - I_0 \left(e^{\frac{qV}{nK_B T}} - 1 \right) \quad (1)$$

I : Corriente a través del diodo o celda solar iluminada.

I_{ph} : Corriente fotogenerada.

I_0 : Corriente de saturación.

q : Carga del electrón.

V : Voltaje a través del diodo o celda solar iluminada.

n : Factor de idealidad del diodo.

T : Temperatura.

K_B : Constante de Boltzmann.

La Ecuación (1) expresa la relación no lineal entre el voltaje y la corriente en una celda solar. La variación del voltaje y el cálculo resultante de la corriente, según esta ecuación, se permite la construcción de la curva voltaje-corriente, la cual proporciona información sobre el rendimiento eléctrico de la celda solar en diversas condiciones.

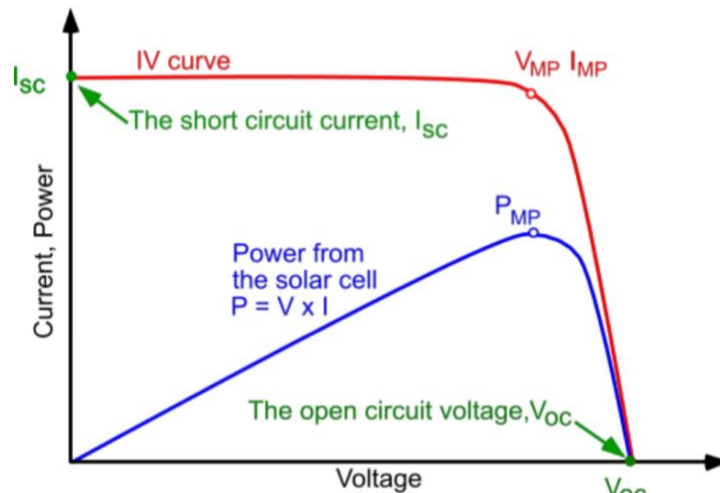


Figura 5. Curva voltaje-corriente (IV) de una celda solar [13]

La corriente de cortocircuito (I_{SC}) representa la corriente máxima que la celda solar puede suministrar en condiciones ideales.

El punto de potencia máxima (MPP ó P_{MP}) representa las condiciones operativas en las que la potencia de salida de la celda solar es máxima en donde se cumple $P_{MP} = V_{MP} \cdot I_{MP}$.

En el ámbito de las celdas solares, la magnitud del voltaje de circuito abierto (V_{OC}) emerge como un indicador esencial de eficiencia. Este parámetro refleja la habilidad de la celda para generar una diferencia de potencial eléctrico. Un V_{OC} más elevado denota comúnmente un mayor potencial de generación eléctrica y una eficiencia superior en la conversión de energía solar a electricidad.

Por otro lado, el factor de llenado (FF) constituye una medida que evalúa la eficacia de la celda solar al convertir la luz solar en electricidad. Este factor se ve influenciado por factores como la resistencia en la celda y las pérdidas de voltaje. Un FF más alto indica que la celda solar aprovecha de manera más eficiente la energía solar incidente, minimizando pérdidas y maximizando la producción de corriente.

$$FF = \frac{I_{MP} \cdot V_{MP}}{I_{SC} \cdot V_{OC}} \quad (2)$$

El concepto de I_{SC} corresponde a la corriente de cortocircuito, representa la corriente máxima que puede fluir a través de la celda solar cuando no hay una carga externa conectada. En este caso, toda la corriente generada por la luz solar se dirige directamente a través de la celda sin ser extraída para realizar trabajo útil.

1.1.2. Función Trabajo

La función trabajo se define como la energía requerida para extraer un electrón desde el nivel de Fermi E_F hasta una posición justo fuera del material, conocida como el nivel de vacío [14]. El nivel de vacío es la energía de un electrón en reposo en un punto lo suficientemente alejado de la superficie para que la fuerza electrostática de imagen sobre el electrón pueda ser despreciada, a más de 100 Å de la superficie [15].

La función trabajo es una propiedad esencial en las superficies metálicas, ya que desempeña un papel fundamental en la evaluación de la idoneidad de un material como electrodo de contacto o emisor de electrones [16]. Un bajo valor de función trabajo sugiere una mayor propensión del material a liberar electrones, lo que facilita la conducción eléctrica y la transferencia de carga en los dispositivos.

La función trabajo determina la alineación de bandas en el contacto en la heterojuntura para facilitar el transporte selectivo de electrones y huecos [2].

Al considerar la función trabajo como propiedad de un material emisor de electrones, su valor influye directamente en la capacidad del material para liberar electrones en respuesta a la interacción con la luz o la energía incidente. Esta característica es especialmente significativa en el diseño y funcionamiento de celdas solares, donde la eficiencia de conversión de energía depende en gran medida de la eficacia con la que los electrones pueden ser liberados y movidos a través del material.

En la unión de metales con funciones trabajo distintas, los electrones tienden a desprenderse del metal con la función trabajo más baja (donde están menos fuertemente ligados) para desplazarse hacia el metal con una función trabajo más elevada. Para comprender mejor este fenómeno, es crucial introducir el concepto de Barrera de Schottky.

1.1.2.1 Barrera de Schottky

La barrera de Schottky es una barrera de energía potencial que se forma en la interfaz entre dos materiales diferentes, para ser más específicos, entre un metal y un semiconductor. Esta barrera opera como un obstáculo que dificulta o impide el flujo de electrones a través de la interfaz de estos materiales, generando un impacto considerable en el comportamiento electrónico de dispositivos semiconductores y celdas solares, entre otros sistemas.

La altura de la barrera de Schottky, asociada a la disparidad en las funciones de trabajo de los materiales en contacto, puede ejercer una influencia significativa en la eficiencia de conversión de energía de la celda solar. Cuando esta barrera es demasiado elevada, puede restringir la eficiencia de la celda al dificultar la transferencia de portadores de carga. Por lo tanto, ajustar con precisión las funciones trabajo de las capas de contacto resulta crucial para optimizar la eficiencia en las celdas solares SHJ.

Cuando dos materiales con funciones trabajo diferentes entran en contacto en una interfaz, la disparidad en la energía de trabajo da origen a una barrera energética en esa interfaz. En el ámbito de celdas solares y dispositivos electrónicos, esta barrera es conocida como la barrera de Schottky. Funcionando como un "obstáculo", la barrera de Schottky plantea un desafío para los electrones en el material de función trabajo baja, ya que deben superarla para desplazarse del material de baja función trabajo al de alta función trabajo.

Es esencial lograr una coincidencia o alineación adecuada de las funciones de trabajo de los materiales utilizados en las interfaces [17]. De esta manera, se disminuye la barrera de energía que los electrones deben superar para desplazarse entre los materiales. Esto implica que no hay una gran diferencia en la energía de los niveles de Fermi de los dos materiales. En otras palabras, los niveles de energía disponibles para los electrones en cada material están muy cercanos entre sí, lo que facilita que los electrones se desplacen de un material a otro con relativa facilidad. Esta reducción simplifica la transferencia de carga, permitiendo que los electrones se muevan con mayor libertad. Este aspecto resulta particularmente beneficioso en aplicaciones como las celdas solares, ya que contribuye significativamente a mejorar la eficiencia de conversión de energía.

1.1.2.2 Modelo Teórico

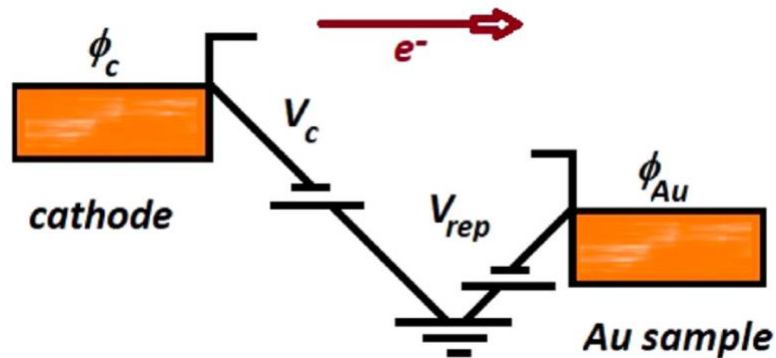


Figura 6. Diagrama de energía para los electrones que emergen del cátodo y se dirigen hacia la muestra de oro durante la medición de repulsión[18].

La Figura 6 representa el diagrama de potencial entre el cátodo, en donde se emite un haz de electrones el cual posee una energía cinética máxima dada por la Ecuación (3), y la muestra de oro. Dicha energía será equivalente al voltaje de frenado más la función trabajo de la muestra, Ecuación (4).

$$E_k = e \cdot V_c + \phi_c \quad (3)$$

E_k : Energía cinética de los electrones emitidos por el cañón.

V_c : Voltaje de cátodo.

ϕ_c : Función trabajo del cátodo.

$$E_k = e \cdot V_0 + \phi_m \quad (4)$$

V_0 : Voltaje de frenado.

ϕ_m : Función trabajo de la muestra.

Una vez que el voltaje de frenado alcance un nivel suficientemente alto, este punto se convierte en el voltaje de repulsión de la muestra, y la corriente de dicho material disminuye a cero. Esto ocurre cuando el nivel de vacío en ambos lados (tanto en el cátodo como en la muestra) es equivalente. Utilizando la Ecuación (5), podemos determinar la función de trabajo de la muestra a partir de la energía cinética de los electrones emitidos por el cañón.

$$E_k = e \cdot V_{rep} + \phi_m \quad (5)$$

V_{rep} : Voltaje de repulsión.

ϕ_m : Función trabajo del material utilizado.

2. Estado del Arte

Esta sección aborda antecedentes provenientes de investigaciones previas relevantes al presente proyecto de estudio.

2.1. Valores reportados de función trabajo para diferentes materiales

La función trabajo de un material asume un papel crucial en el desarrollo de la presente investigación. Esta subsección se enfoca en proporcionar una revisión de los valores de función trabajo documentados en la literatura para diversos materiales que son objeto de estudio en el proyecto.

Los semiconductores que componen la celda solar de heterojuntura son principalmente de silicio, presentando diversas estructuras y tipos de dopaje. El silicio amorfo hidrogenado tipo p, a-Si:H(p), posee una función trabajo de 5.3 eV [19], mientras que para el silicio amorfo hidrogenado tipo n, a-Si:H(n), la función trabajo es de 4.2 eV [17]. En relación con el silicio amorfo hidrogenado intrínseco a-Si:H(i), la literatura no proporciona un valor específico para su función trabajo como semiconductor. Dada la estructura de la celda SHJ, las capas que entran en contacto con el TCO son a-Si:H(p) y a-Si:H(n). Por lo tanto, la falta de información sobre la función trabajo de a-Si:H(i) no representa un obstáculo para el avance del proyecto actual. Para el caso del silicio c-Si(100) la función trabajo tanto para muestras de cristal único intrínsecas como para aquellas dopadas p ó n es de 4.85 eV [20].

El ITO ocupa una posición destacada como conductor transparente en el mercado actual, especialmente en celdas solares de silicio de heterojuntura. La literatura indica que el valor de la función trabajo para el ITO no tratado se encuentra en un intervalo entre 4.4 eV y 4.7 eV [21]. Por otro lado, el grafeno prístino, material que busca asumir el papel del ITO como conductor transparente, exhibe una función trabajo de 4.2 eV [2]. Mientras que la función trabajo del óxido de grafeno varía desde 4.9 eV hasta un valor máximo de 5.23 eV [22].

En lo que respecta a otros metales, como el platino limpio Pt(111) y el oro Au(111), el valor de su función trabajo es de 5.71 eV [23] y 5.3 eV [24] respectivamente.

De forma resumida, la Tabla 2 presenta valores de función trabajo reportados por la literatura para diversos materiales utilizados en el presente proyecto.

Tabla 2. Función trabajo reportada para materiales utilizados en el presente proyecto.

Material	Función Trabajo Φ [eV]	Referencia
a-Si:H(p)	5.3	[19]
a-Si:H(n)	4.2	[17]
c-Si(100) tipo p ó n	4.85	[20]
ITO	4.4 – 4.7	[21]
Grafeno	4.2	[2]
Óxido de Grafeno (GO)	4.9 – 5.23	[22]
Pt(111)	5.71	[23]
Au(111)	5.3	[24]

2.2. Pérdidas de transporte relacionadas con la función de trabajo del TCO en el contacto a-Si:H/TCO en celdas solares SHJ [17]

Para optimizar aún más la eficiencia de la celda solar, es imperativo incrementar el factor de llenado, ya que un alto FF indica una utilización eficiente de la energía solar recibida. En este contexto, se destaca la relevancia de la pasivación en el punto de máxima potencia y la eliminación de barreras de transporte, especialmente en la unión a-Si:H/TCO.

En el diseño de celdas solares, se busca lograr características de contacto óhmicas y de baja resistencia con los electrodos de metal y TCO. Estas propiedades se determinan, entre otros factores, por la diferencia en la función trabajo entre a-Si:H y TCO. Si se establece contacto entre un semiconductor, por ejemplo, uno de tipo p, y un metal o TCO con una WF menor que la del semiconductor, el semiconductor se agota y se forma una barrera de Schottky.

Se analiza la interacción entre a-Si:H y TCO, centrándose en la diferencia de la función trabajo WF, que afecta la formación de barreras Schottky. Un factor crítico que influye en el ancho de esta barrera es el dopaje en a-Si:H(p); el aumento del dopaje conduce tanto a un V_{OC} más alto como a un FF más alto. Sin embargo, es importante tener en cuenta que, al mismo tiempo, el aumento del dopaje puede propiciar la recombinación en la unión, lo que resulta en un V_{OC} más bajo.

Cuando se lleva a cabo una combinación de capas de silicio amorfo dopado, se logra aumentar la transparencia del material. No obstante, este incremento en la transparencia conlleva algunas consecuencias desfavorables, como una eficiencia de dopaje inferior, lo que implica características de transporte menos favorables. La ingeniería de WF podría posibilitar el uso de capas más transparentes sin incurrir en costos adicionales de resistencia de contacto más elevada.

A través de simulaciones de dispositivos, se ha demostrado cómo un ajuste preciso del WF permite un dopaje menor y un grosor reducido en las capas dopadas de a-Si:H[25]. Esto, a su vez, facilita un aumento en el factor de llenado y en la corriente de cortocircuito sin incurrir en la desventaja de un voltaje de circuito abierto más bajo.

Para abordar la cuestión de si la función trabajo ejerce alguna influencia en los contactos de TCO en las celdas SHJ, los autores proponen la comparación de materiales conductores transparentes con diferentes funciones de trabajo, evaluando su impacto en los contactos de TCO en células SHJ de tipo n y p. Se han seleccionado TCOs representativos con WF bajo, medio y alto para llevar a cabo la comparación, entre ellos, el óxido de aluminio y zinc (AZO) con un WF de 3.4–4.5 eV, el óxido de indio y estaño (ITO) con un WF de 4.7 eV, y el óxido de tungsteno (WO_x) con un WF de 5.1–6.4 eV.

Mediante el empleo de simulaciones a través del software Sentaurus TCAD, se evidencia que, para establecer un eficiente contacto de electrones ("contacto n"), la función trabajo del TCO debería ser bajo, alineándose con el WF del a-Si:H(n) o incluso aproximándose a su banda de conducción (3.9 eV). Estos resultados ofrecen una contribución significativa para entender cómo la modulación del WF puede impactar en el desempeño de los contactos en las células solares de silicio amorfo (a-Si:H).

En el caso de los contactos de huecos ("contacto p"), se sugiere que el WF debería ser alto, similar al WO_x seleccionado, y debería coincidir con el WF del a-Si:H(p) o incluso con la banda de valencia (5.6 eV). Además, una baja energía de activación y, por ende, un mayor dopaje de la capa de a-Si:H permitirían que el factor de llenado dependiera menos del WF. En situaciones donde el WF es pequeño, la falta de coincidencia conduce a un mayor FF.

Si se logra un alto dopaje en las celdas solares, no se anticipa un aumento en la resistencia en serie debido al contacto a-Si:H/TCO, y el WF del TCO no tendría influencia en el FF. Sin embargo, un mayor dopaje de a-Si:H(p) incrementa la densidad de defectos en la capa amorfa, lo que podría reducir el voltaje de circuito abierto. Por lo tanto, además de variar el dopaje de la capa de a-Si:H, adaptar el WF del TCO a a-Si:H de tipo p y n, respectivamente, emerge como otra posibilidad para mejorar el FF.

3. Metodología

En este estudio, se empleó una configuración experimental para llevar a cabo un proceso de crecimiento de grafeno, que incluyó las etapas de síntesis, caracterización y transferencia del material sujeto a investigación. Además, se mide el voltaje de repulsión de los electrones sobre la muestra, con el propósito de analizar la función trabajo de diversos materiales.

3.1. Síntesis, caracterización y transferencia de grafeno.

El proceso de crecimiento del grafeno implica tres etapas: síntesis, caracterización y transferencia.

Síntesis

La síntesis de grafeno se refiere al proceso de fabricación de láminas de grafeno a partir de materiales base. Uno de los enfoques para llevar a cabo este proceso es mediante el método de deposición química de vapor (CVD, por sus siglas en inglés, *Chemical Vapor Deposition*). El horno CVD realiza un procedimiento que permite la aplicación precisa y uniforme de materiales sobre superficies, logrado mediante la reacción química de sustancias gaseosas precursoras. El resultado de este proceso se presenta en forma de películas delgadas, polvos o cristales.

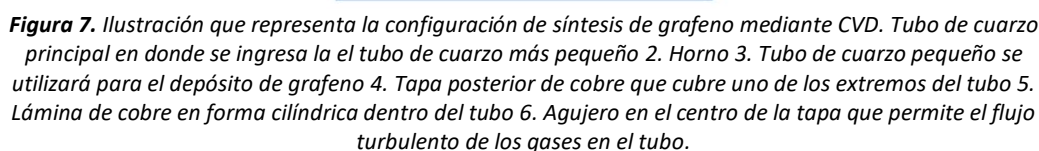
En este método, se seleccionan láminas de cobre como sustrato para el crecimiento de grafeno. La elección del cobre como catalizador para dicho proceso se debe a sus características intrínsecas, como su baja solubilidad de carbono (~7 ppm a 1050 °C) y alta actividad catalítica. La superficie de la película de cobre no requiere ningún tratamiento engorroso de pulido para mostrar una planaridad relativamente buena y ofrece un mejor control sobre el número de capas, ya que la catálisis del metano se restringe a la parte superior de la película de cobre [26].

Los gases precursores utilizados son hidrógeno molecular (H_2), argón (Ar) y metano (CH_4), siendo este último el principal reactor. Además, se emplea plasma de hidrógeno. La elección del metano en lugar de otros hidrocarburos se basa en diversas variables. El metano tiene una estructura molecular simple y una proporción estequiométrica equilibrada de carbono e hidrógeno (CH_4), facilitando la formación ordenada y controlada de la estructura de carbono, lo que resulta en la deposición de grafeno de alta calidad. Otros hidrocarburos con estructuras más complejas podrían afectar negativamente la calidad y uniformidad del grafeno sintetizado. Adicionalmente, la distancia relativamente corta entre el átomo de carbono y los átomos de hidrógeno en el metano favorece su descomposición térmica durante el proceso de CVD. A temperaturas elevadas, los enlaces entre el carbono y el hidrógeno se rompen, permitiendo que el carbono se deposite y forme el grafeno en la superficie del sustrato. Este fenómeno contribuye significativamente a la eficiencia del proceso y a la obtención de grafeno de alta calidad.

Tabla 3. Procedimiento de horneado para el crecimiento de grafeno en un sustrato de Cu.

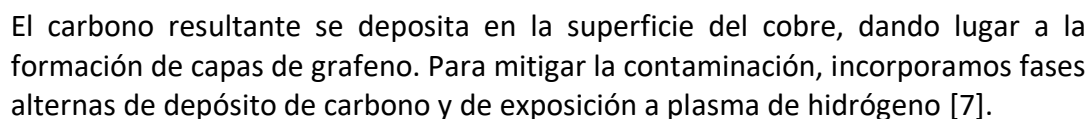
	Proceso de calentamiento	PROCESO DE CRECIMIENTO						Proceso de enfriamiento
Gas/Tiempo	1 hora 30 minutos	30 minutos	30 minutos	10 minutos	30 minutos	10 minutos	30 minutos	1 hora 20 minutos
H_2	20 sccm	20 sccm	10 sccm	10 sccm	10 sccm	10 sccm	10 sccm	20 sccm
Ar	—	—	—	—	—	—	—	—
CH_4	—	—	20 sccm	—	20 sccm	—	20 sccm	—
Plasma de Hidrógeno	—	—	—	Si	—	Si	—	—

- 1. Proceso de calentamiento**
Se introduce en el horno un tubo de cuarzo el cual por dentro posee una lámina en forma de cilindro de cobre. En uno de los extremos de él se dispone una tapa de lámina de cobre con un agujero en el centro para permitir el flujo de aire en el tubo. Para mayor comprensión, véase la Figura 7.



2. Proceso de crecimiento

La temperatura del sistema se mantiene en 970°C durante 2 horas 20 minutos. En donde los diferentes gases precursores y el plasma actúan de tal forma que se produzca el depósito de material en el sustrato (ver Tabla 3). Esta reacción está descrita por:



pág. 22

sobre cobre. Si se lleva a cabo la extracción a temperaturas elevadas en condiciones ambientales la muestra puede ser expuesta a oxidación.

Caracterización

La caracterización del grafeno se focalizará específicamente en la aplicación de la espectroscopia Raman como una herramienta clave para analizar las propiedades estructurales del grafeno.

Espectroscopia Raman

La espectroscopia Raman, una técnica fotónica de alta resolución, se destaca por proporcionar información química y estructural de manera rápida, abarcando prácticamente cualquier material o compuesto, ya sea orgánico o inorgánico, facilitando así su identificación. Este método analítico se fundamenta en el estudio de la luz dispersada por un material al ser expuesto a un haz de luz monocromático [27].

La dispersión implica el intercambio de energía entre el fotón incidente y las moléculas, dando lugar a que la energía del fotón dispersado difiera de la energía del fotón incidente, fenómeno conocido como Desplazamiento Raman (*Raman Shift*). En términos más específicos, la energía del fotón dispersado se compone simplemente de la suma de la energía del fotón incidente y la energía de las moléculas excitadas térmicamente presentes en la muestra que está siendo analizada. La fuente de luz monocromática utilizada es un láser con una longitud de onda de 532 ó 785 nm [28]. En este estudio se utilizó un espectrómetro Raman marca Renishaw con un láser verde (532 nm).

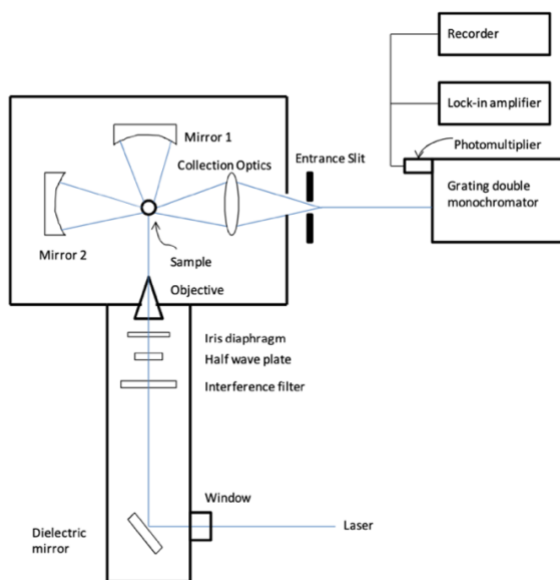


Figura 8. Ilustración que esquemática de un espectrómetro Raman [28].

En el contexto del grafeno, la espectroscopia Raman se emplea para caracterizar las vibraciones y modos de excitación. Los picos observados en el espectro Raman del grafeno

surgen debido a la dispersión inelástica de la luz incidente por parte de los electrones y fonones presentes en la estructura.

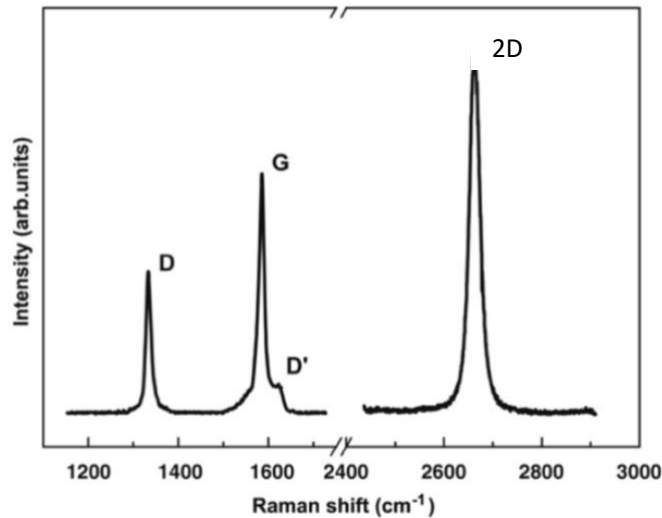


Figura 9. Bandas características del espectro Raman del grafeno [27].

El pico D, reconocido como el pico de los defectos, se sitúa aproximadamente en 1350 cm^{-1} [29] y está vinculado al desorden estructural en el grafeno. Cuando hay defectos o impurezas en la estructura del grafeno, este pico se vuelve más prominente, señalando la presencia de imperfecciones en el material.

El pico G aparece alrededor de 1580 cm^{-1} [29], refleja la vibración en el plano de los átomos de carbono enlazados en configuración sp^2 . El pico 2D, situado a 2700 cm^{-1} [29]. Es importante destacar que la posición de este pico es dependiente de la energía de excitación láser. Este pico constituye otra característica distintiva del grafeno, representando las vibraciones de los átomos de carbono en una estructura bidimensional plana. El peak 2D resulta útil para determinar la cantidad de capas de grafeno presentes en la muestra, ya que la relación entre la intensidad del pico G y el pico 2D varía con el número de capas.

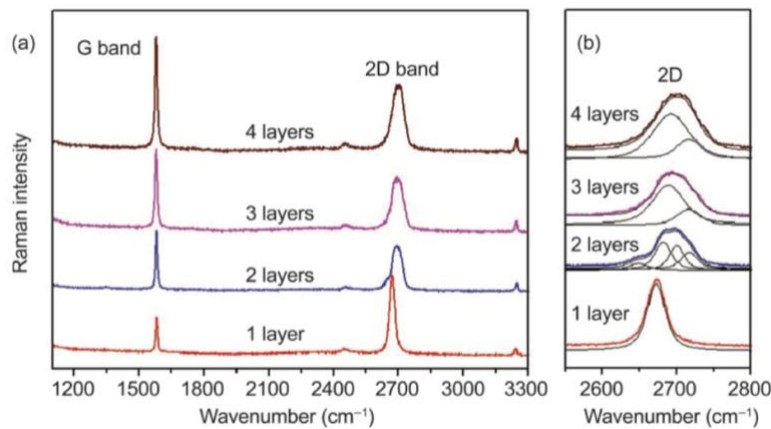


Figura 10. a) Espectros Raman de grafeno con 1, 2, 3 y 4 capas. (b) Las regiones ampliadas de la banda 2D con ajuste de curvas [29].

Se estima que, para proporciones entre $2 < \frac{2D}{G}$ la muestra presenta una capa, entre $1 < \frac{2D}{G} < 2$ presenta dos capas y entre $1 > \frac{2D}{G}$ presenta tres o más capas. Este método es óptimo en ausencia de banda D [7].

Transferencia

Con fines de investigación, el grafeno se transfiere a sustratos de silicios con características de dopaje específicas. En la primera fase, se recortan cuadrados de la muestra de grafeno sobre cobre, con lados de aproximadamente 3 cm, para facilitar su traslado posterior. Estos cuadrados flotan en una solución compuesta por 20 mL de agua desionizada (H_2O) y 4 mL de ácido nítrico (HNO_3) al 69-70%, dentro de un vidrio de reloj durante 5 minutos. Esta mezcla homogénea tiene la función de eliminar los residuos de carbono que podrían estar presentes en la cara posterior del grafeno depositado en la lámina de Cu .

Posteriormente, se retira la muestra y se introduce en una solución de 50 [g] de nitrato férrico $Fe(NO_3)_3$ en 100 mL de H_2O . Este paso busca disolver completamente los residuos de cobre, revelando así la lámina de grafeno obtenida. La muestra se mantiene suspendida en la solución durante 1 hora, o hasta que ya no se observen residuos de Cu .

Luego, se retira la muestra del sistema anterior y se coloca en un vidrio de reloj con agua destilada. Empleando una pipeta, se eliminan con cuidado los residuos de nitrato férrico, sustituyéndolos con H_2O con extrema precaución para no afectar la integridad de la estructura del grafeno. Es crucial asegurarse de que no queden restos visibles de $Fe(NO_3)_3$. En la etapa final, el grafeno obtenido se traslada y se suspende nuevamente en agua destilada en un recipiente que contiene el sustrato deseado en su fondo. Se procede a retirar el agua de manera controlada para posicionar el material alotrópico en el silicio.

Para mayor claridad, los pasos del proceso de transferencia se encuentran ilustrados en la Figura 11.

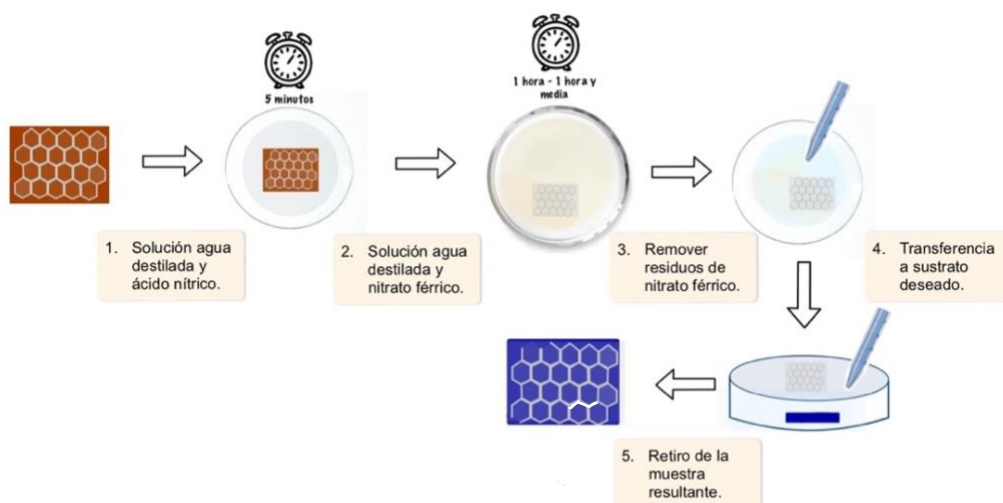


Figura 11. Proceso de transferencia de grafeno desde un material catalizador de cobre a un sustrato deseado.

3.2. Sistema de medición de Voltaje de Repulsión

El sistema de medición del voltaje de repulsión consta de dos componentes principales: un cañón de electrones y un porta-muestras conectado a un sistema de voltaje que genera una polarización negativa sobre los electrones, tal como se muestra en la Figura 12.

Un cañón de electrones es un dispositivo diseñado para generar y dirigir un haz o flujo controlado de electrones con la suficiente energía hacia una muestra o superficie específica. Para su funcionamiento óptimo, es esencial que la muestra se encuentre ubicada de manera ortogonal con respecto al cañón, a una distancia de separación típica de aproximadamente 2 centímetros.

Es fundamental posicionar la muestra de manera perpendicular a la apertura del cañón, dado que de lo contrario, los electrones podrían verse afectados por un campo eléctrico distinto. Esto podría provocar mediciones inexactas debido a las alteraciones en el momento de los electrones, generando variaciones en su energía cinética.

Para comprender la generación controlada de un flujo de electrones que incide en la muestra, resulta esencial examinar la electrónica que compete al cañón de electrones. Una síntesis concisa de su estructura se presenta en el esquema ilustrado en la Figura 12. El proceso de generación de electrones sucede en el cátodo (parte 1, Figura 12). Para iniciar la producción de electrones, se calienta un filamento que se encuentra dentro de la estructura del cátodo, lo que provoca la emisión de dichas cargas debido al fenómeno de emisión termoiónica. Estos electrones forman un haz o nube, y el voltaje de cátodo crea un campo eléctrico que los acelera, determinando así su energía cinética. Los electrones se dirigen hacia un ánodo al aplicar un voltaje de aceleración, conocido como voltaje de ánodo. Este voltaje cumple la función principal de atraer y dirigir los electrones hacia una ubicación específica o un objetivo.

El voltaje de foco se refiere al voltaje aplicado a una lente de enfoque, ya sea electromagnética o electrostática. Su función consiste en controlar la convergencia de los electrones en el haz electrónico, lo cual incide directamente en la sección eficaz del haz y en su enfoque al salir del cañón de electrones (parte 2, Figura 12).

Gracias a este sistema, se logra obtener un haz de electrones alineado e impactar la muestra en un punto específico (parte 3, Figura 12) de manera perpendicular para generar una corriente. La muestra ubicada en el plato porta-muestras está representada en la Figura 13.

Es importante destacar que para que esta corriente se produzca, la muestra debe estar conectada tierra, debido a que los electrones siempre van de un mayor potencial a uno menor.

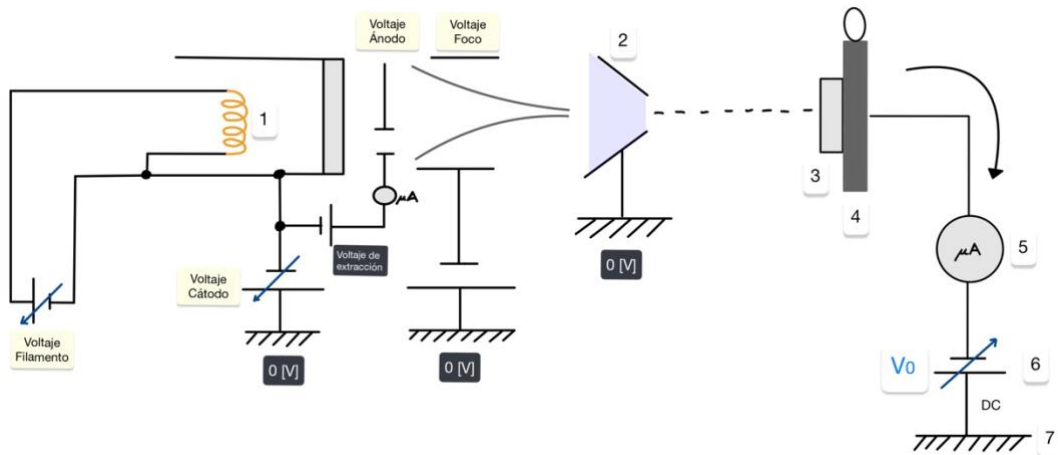


Figura 12. Electrónica del funcionamiento del cañón de electrones. 1. Filamento 2. Apertura del cañón de electrones 3. Muestra 4. Plato porta-muestra 5. Amperímetro 6. Voltaje de repulsión 7. Voltaje a tierra.

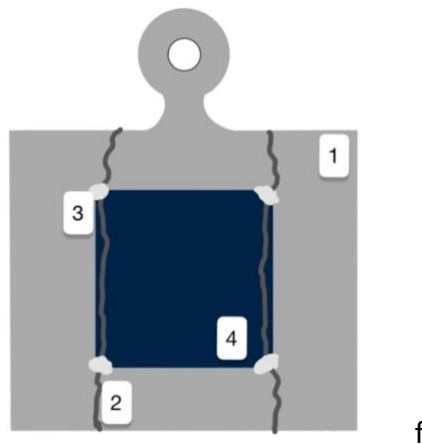


Figura 13. Configuración de la muestra ubicada en el plato porta-muestras. 1. Plato porta-muestras. 2. Alambre de tungsteno. 3. Adhesivo epóxico conductor. 4. Muestra.

Al aplicar un voltaje de frenado, los electrones incidentes comienzan a ser repelidos hasta que para cierto valor de V_0 la corriente en la muestra cae a cero, este punto es conocido como el voltaje de repulsión.

Para entender por qué las cargas se repelen, veamos la Ecuación (6), la cual explica la relación entre la diferencia de potencial eléctrico y el campo eléctrico.

$$\Delta V = V_0 = - \int \vec{E} \cdot d\vec{l} \quad (6)$$

Cuando los electrones emitidos por el cañón se encuentran con el campo eléctrico generado por la variación de potencial, se desplazan en dirección opuesta al vector del campo $\vec{E}$. A medida que la magnitud del campo eléctrico aumenta, la repulsión experimentada por los electrones dirigidos hacia la muestra también se intensifica. Ya que, la relación entre la magnitud del campo y la fuerza repulsiva sobre los electrones se vuelve directamente proporcional, $\vec{F} = -e \cdot \vec{E}$.

El voltaje de frenado cumple la función de evitar que los electrones se aceleren hacia la muestra, lo que provoca una disminución gradual de la corriente hasta llegar a cero. Estos datos son relevancia en la investigación y constituyen información crucial para calcular la función de trabajo en cada muestra que se analiza. En consecuencia, la recopilación de datos se centra en registrar la corriente de la muestra en función de frenado. Conocido el V_{rep} se utiliza el modelo presentado en la Ecuación (5) para determinar la función trabajo de la muestra para distintos valores de la energía cinética de los electrones. Los parámetros que serán utilizados para la configuración instrumental del equipo están representados en la Tabla 4. Estos datos fueron obtenidos por Pia Vásquez, a partir su trabajo realizado en el equipo de medición en su pasantía de investigación.

Tabla 4. Parámetros de voltaje óptimos para el sistema de medición respecto a un rango de voltaje de cátodo de interés.

Voltaje de Filamento V_{Fil} [V]	Voltaje de Cátodo V_C [V]	Voltaje de Ánodo V_A [V]	Voltaje de Foco V_F [eV]
5.2	15	77.2	16.0
5.2	20	102.8	20.3
5.2	25	128.4	24.7
5.2	30	154.0	28.7

4. Resultados y Análisis

En esta sección se presentan cuatro muestras, incluyendo la calibración del sistema mediante la utilización de oro Au(111). Se llevaron a cabo mediciones en distintos materiales, como el platino Pt(111), óxido de grafeno sobre óxido de silicio cristalino tipo p, silicio cristalino tipo n, y mediciones en ambas caras de una juntura np de silicio cristalino tipo n con emitter amorfo tipo p.

4.1. Calibración del sistema usando Au(111)

El oro Au(111) exhibe propiedades particulares que lo hacen adecuado para aplicaciones de calibración. Entre ellas se encuentran la estabilidad superficial, la conductividad eléctrica y la inalterabilidad a lo largo del tiempo.

Es por ello, que para el presente proyecto se utiliza dicho metal para obtener la energía cinética de los electrones emitidos por el cañón utilizado en el sistema. Los datos reportados en la Tabla 5 corresponden a valores obtenidos por Esparza *et al.* [18], el instrumento utilizado corresponde al mismo ocupado en el sistema de medición del presente proyecto.

Tabla 5. Voltaje de repulsión y energía cinética de los electrones del sistema utilizando una muestra de Au(111) [18].

Voltaje de Cátodo [V]	Voltaje de Repulsión [V] (Punto mínimo de la derivada)	Energía Cinética [eV]
15	16.28	20.73

20	21	25.71
25	25.88	30.69
30	29.8	35.67

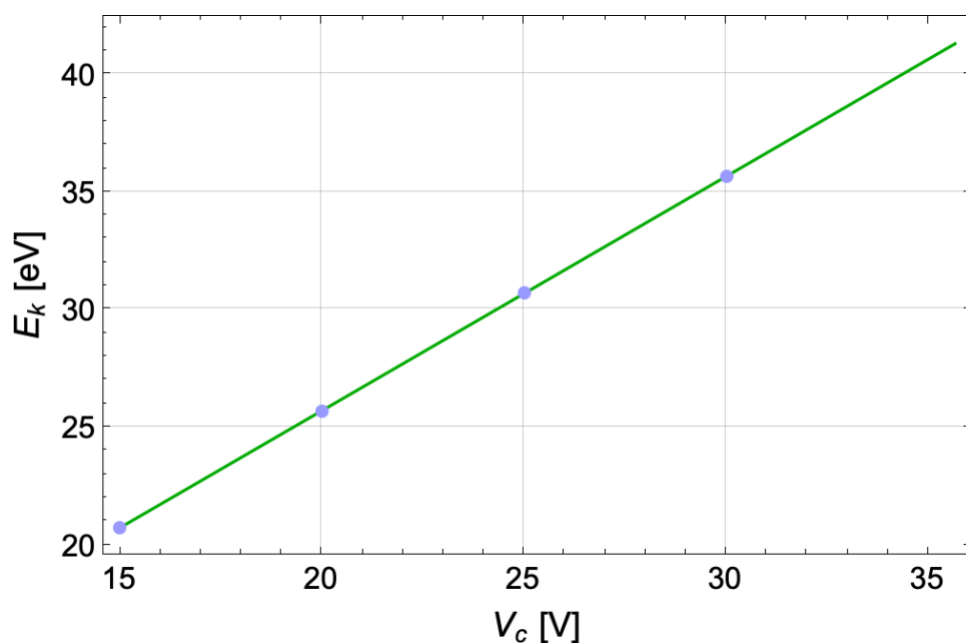


Figura 14 . Energía cinética vs Voltaje de cátodo para una muestra de Au(111).

En esencia, los valores de la recta obtenida estarán relacionados con las características del sistema de medición. Este vínculo se ilustra a través de un ajuste de modelo lineal que describe la curva observada.

$$E_k = 0.996 \cdot V_c + 5.79 \quad (7)$$

E_k : Energía cinética de los electrones emitidos por el cañón.

V_c : Voltaje de cátodo.

Esta relación establece la energía cinética de los electrones en el sistema de medición, lo cual nos permitirá para emplear la Ecuación (5) con el fin de determinar la función de trabajo de otros materiales.

4.2. Platino

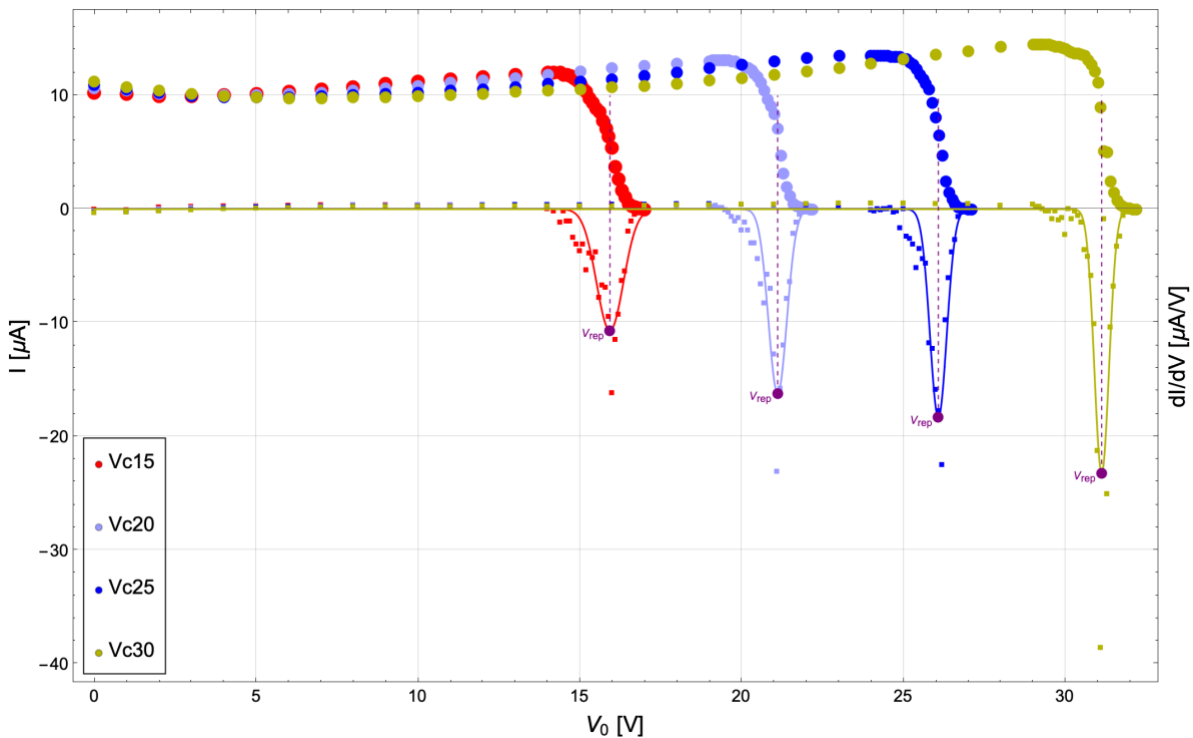


Figura 15 . Gráfico de corriente que llega a la muestra de platino en función del voltaje de frenado, el eje derecho representa la derivada de dicha corriente respecto al voltaje.

En el sistema, el voltaje de frenado asociado a cada voltaje de cátodo investigado, proporciona la energía adicional necesaria para que los electrones superen cierta barrera de energía, permitiéndoles escapar del material y ser liberados al vacío, es decir la función trabajo. A medida que el voltaje de frenado alcanza un valor lo suficientemente alto para generar un campo eléctrico de magnitud tal que repela a los electrones, se evidencia una estabilización en la corriente que, finalmente, disminuye hasta alcanzar cero. Este fenómeno se aprecia claramente en la Figura 15, donde se observa un punto de inflexión en la curva de los datos recopilados para cada caso, este punto es el voltaje de repulsión. Para obtener con precisión el valor de esta fluctuación, se realiza el cálculo de la derivada de los datos de corriente en función del voltaje de frenado aplicado al sistema. La función gaussiana, utilizada como ajuste, resulta ser suave y bien definida, lo que facilita la identificación precisa de las características de la curva. Esto contribuye a mejorar la precisión en la localización de los puntos clave deseados, representados en este caso por el mínimo de dicho ajuste.

A partir de la expresión obtenida en la Ecuación (7), podemos determinar el valor de la energía cinética de los electrones emitidos por el cañón al aplicar un voltaje de cátodo específico. En este caso, los voltajes corresponden a los reportados en la columna 1 de la Tabla 6. Una vez que hemos registrado los valores de voltaje de repulsión y energía cinética para cada caso de estudio, utilizamos la Ecuación (5), para deducir la función trabajo del material analizado.

Tabla 6. Voltaje de repulsión obtenido, energía cinética y función trabajo para Pt(111) obtenidos a partir de la Figura 15.

Voltaje de Cátodo [V]	Voltaje de Repulsión [V] (Punto mínimo de la derivada)	Energía Cinética [eV]	Función trabajo [eV] de Pt(111)
15 —	15.93 ± 0.03	20.73	4.80 ± 0.03
20 —	21.11 ± 0.02	25.71	4.60 ± 0.02
25 —	26.07 ± 0.01	30.69	4.62 ± 0.01
30 —	31.12 ± 0.03	35.67	4.53 ± 0.03

En promedio, el valor obtenido para la función trabajo del platino es de $\phi_{Pt} = 4.6 \pm 0.1$ eV. El resultado obtenido no concuerda con lo reportado en la literatura (5.71 [eV]), de hecho, se presenta una discrepancia de un 19.4%, esto se debe a que la muestra analizada exhibe evidencia de contaminación superficial, este factor puede generar errores en las mediciones debido a que si las impurezas introducen niveles de energía adicionales por debajo del nivel de Fermi, podrían facilitar la emisión de electrones y reducir la energía necesaria para liberarlos. Es decir, si las impurezas introducen niveles de energía adicionales por debajo del nivel de Fermi, estos niveles pueden actuar como “escalones” desde los cuales los electrones pueden saltar más fácilmente.

Al tener estos escalones adicionales, los electrones pueden liberarse con menos energía aplicada, haciendo que la función trabajo sea menor, como ocurre para el caso del platino estudiado.

4.3. Óxido de grafeno sobre óxido de silicio cristalino tipo p

Se transfiere una muestra de óxido de grafeno, Figura 14, sobre silicio cristalino tipo p, el cual posee una capa de óxido de silicio superficial de $500 \pm 25 \mu m$.

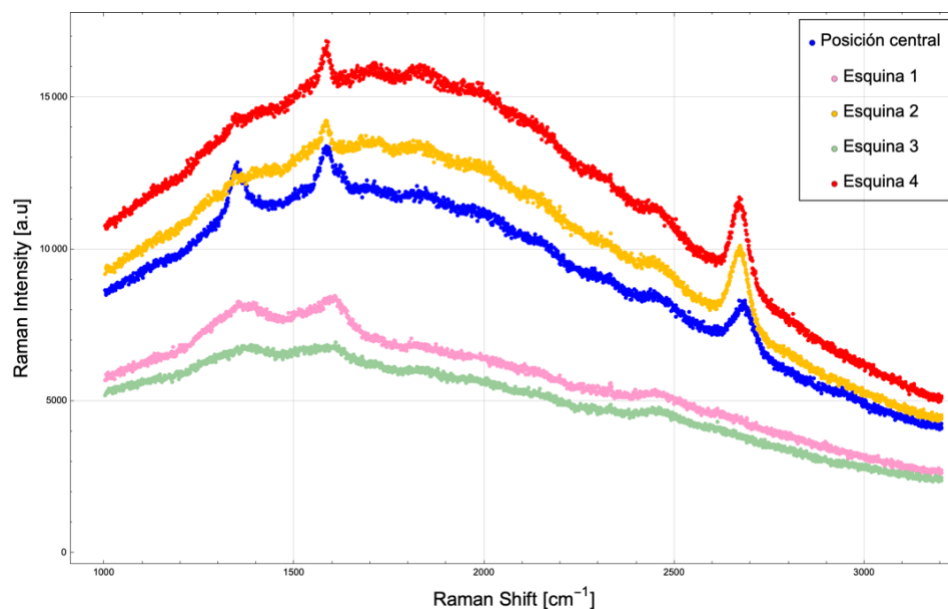


Figura 16 . Espectro Raman muestra grafeno sobre cobre.

La Figura 16, presenta el espectro Raman de una muestra de grafeno sintetizada sobre un sustrato de cobre, mostrando el espectro en diversas ubicaciones de la muestra. Se evidencia la presencia de grafeno en el espécimen, lo cual se refleja en la ausencia del pico D en las esquinas 2 y 4 del espectro. Además, se destaca la precisa ubicación del pico G en 1600 cm^{-1} y 2D alrededor de 2700 cm^{-1} .

No obstante, se observa también la presencia de óxido de grafeno en la muestra. Al examinar las esquinas 1 y 3, no se evidencia de manera suficiente ni el pico G ni el pico 2D, lo que caracteriza a estas áreas como GO. El óxido de grafeno presenta propiedades eléctricas distintas en comparación con el grafeno puro, principalmente debido a la incorporación de grupos funcionales de oxígeno en su estructura. Estos grupos oxigenados pueden ejercer un impacto considerable en la conductividad eléctrica del material.

Al transferir esta muestra de grafeno heterogéneo a un sustrato de de silicio tipo p con orientación (100) cubierto por una capa de óxido de $500 \pm 25\text{ }\mu\text{m}$ de SiO_2 , se obtiene el siguiente espectro Raman.

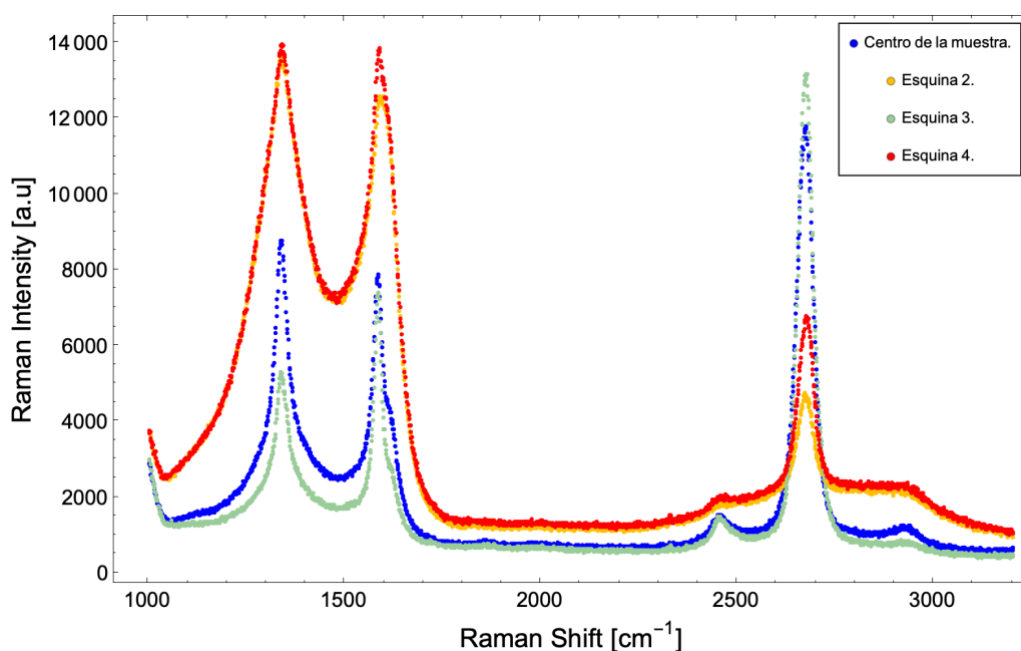


Figura 17. Espectro Raman muestra grafeno sobre óxido de silicio tipo p.

El comportamiento de la muestra de grafeno sintetizada en cobre varía mucho su una vez es transferida a silicio, al observar el espectro de la Figura 17, en cada posición estudiada del silicio utilizado de 1 cm^2 de área, el peak de defectos es más prominentes que los picos G y 2D. Indicando así un mayor nivel de defectos estructurales en el grafeno. Esto podría señalar la presencia de impurezas, la existencia de bordes de grano o defectos en la red cristalina.

Al recopilar datos de corriente que llega esta muestra de óxido de grafeno sobre óxido de silicio dopado tipo p (100) en función del voltaje de frenado, se obtiene la gráfica mostrada en la Figura 18.

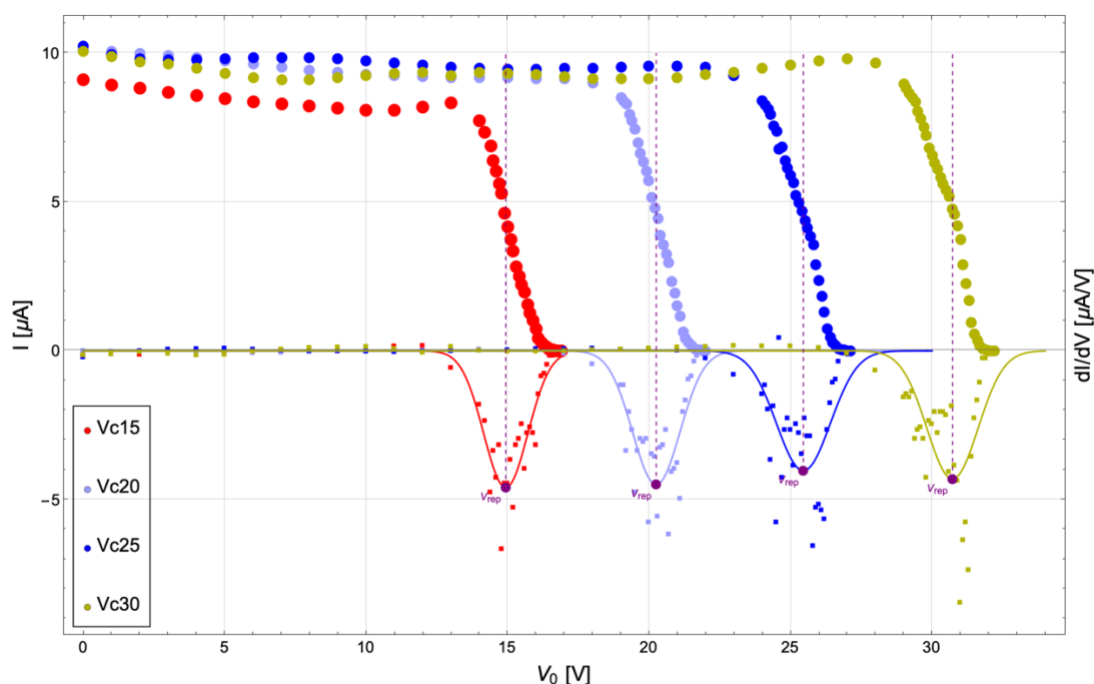


Figura 18. Gráfico de corriente que llega a la muestra de GO sobre óxido de silicio tipo p en función del voltaje de frenado, el eje derecho representa la derivada de dicha corriente respecto al voltaje.

A partir de la gráfica correspondiente a la Figura 18, es posible visualizar un mayor grado de error en las curvas gaussianas para cada voltaje de cátodo (segunda columna Tabla 7) en comparación al platino. Este fenómeno se atribuye a la presencia de óxido de grafeno heterogéneo en la superficie del óxido de silicio tipo p. Esta heterogeneidad se refleja también en el espectro Raman asociado a la muestra en cuestión, donde la prominencia del peak D indica una elevada presencia de defectos en la estructura cristalina del material.

Tabla 7. Voltaje de repulsión, energía cinética y función trabajo para muestra de GO sobre óxido de silicio tipo p obtenidos a partir de la Figura 18.

Voltaje de Cátodo [V]	Voltaje de Repulsión [V] (Punto mínimo de la derivada)	Energía Cinética [eV]	Función trabajo [eV] de GO sobre óxido de c-Si(p)
15 —	14.93 ± 0.06	20.73	5.80 ± 0.06
20 —	21.15 ± 0.07	25.71	5.46 ± 0.07
25 —	25.6 ± 0.1	30.7	5.2 ± 0.1
30 —	30.7 ± 0.1	35.7	4.9 ± 0.1

El valor promedio obtenido para la función trabajo del óxido de grafeno sobre óxido de silicio dopado tipo p es $\phi_{GO} = 5.3 \pm 0.3$ eV, una cifra que se aproxima significativamente a la reportada en la literatura, 5.23 eV. Esta coincidencia refuerza la confiabilidad de nuestras mediciones, respaldando la coherencia de los resultados obtenidos con investigaciones previas en el campo. Por otra parte, si consideramos el valor máximo del rango de función

trabajo para el óxido de indio y estaño, 4.7 eV, existe una diferencia porcentual entre las magnitudes obtenidas para ambos materiales del 12.7%.

Aunque la barrera de Schottky se encuentra presente en el sistema de análisis, debido a la disparidad en los valores de la función trabajo entre el óxido conductor transparente, en este caso, el óxido de grafeno, y el semiconductor, representado por el óxido de silicio, se observa que este último presenta una WF de 4.85 eV . Este dato resulta más lejano a la función trabajo del óxido de grafeno con una discrepancia porcentual entre las magnitudes obtenidas para ambos materiales del 8.5%, en cambio, la diferencia entre el óxido de silicio y el ITO es de 3.2%. Si el material obtenido hubiera sido una monocapa de grafeno, aún existiría una diferencia considerable con respecto a la función trabajo del material semiconductor del 13.4%, aumentando aún más la discrepancia y el rol protagónico del ITO como TCO.

4.4. Silicio cristalino tipo n

El silicio cristalino c-Si(n) estudiado tiene una capa nativa de óxido de silicio en su superficie.

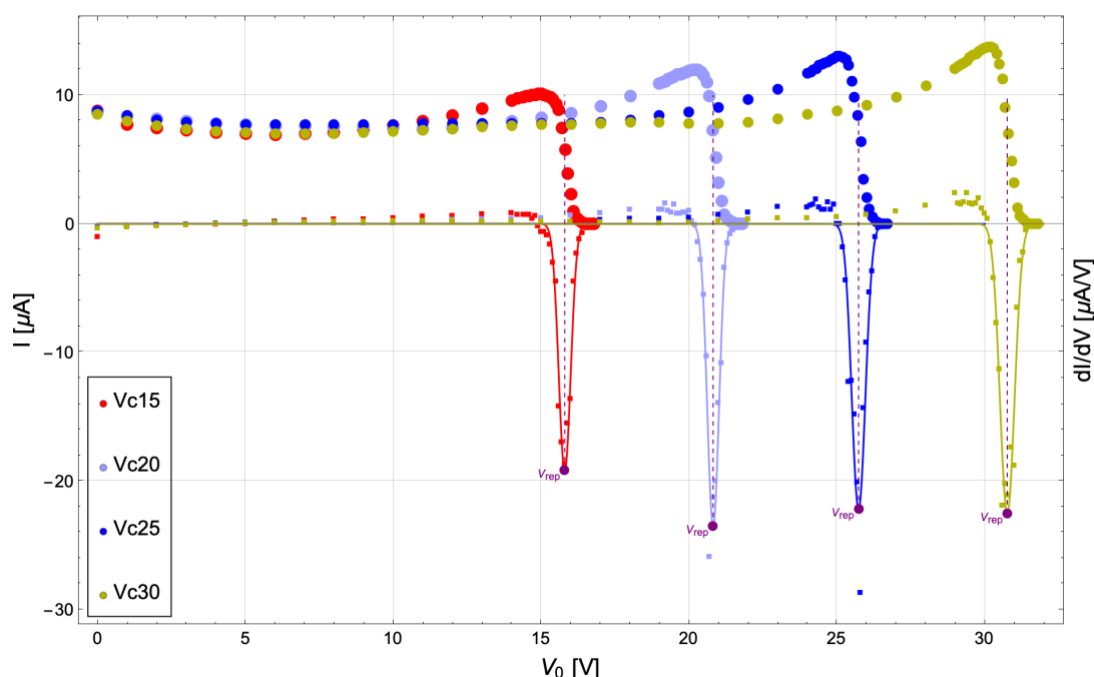


Figura 19. Gráfico de corriente que llega a la muestra de c-Si(n) en función del voltaje de frenado, el eje derecho representa la derivada de dicha corriente respecto al voltaje.

Tabla 8. Voltaje de repulsión, energía cinética y función trabajo para c-Si(n) obtenidos a partir de la Figura 19.

Voltaje de Cátodo [V]	Voltaje de Repulsión [V] (Punto mínimo de la derivada)	Energía Cinética [eV]	Función trabajo [eV] de c-Si(n)
15 —	15.793 ± 0.007	20.730	4.938 ± 0.007
20 —	20.811 ± 0.008	25.710	4.899 ± 0.008

25 —	25.73 ± 0.01	30.69	4.96 ± 0.01
30 —	30.758 ± 0.009	35.670	4.912 ± 0.009

El valor promedio obtenido para la función trabajo correspondiente a silicio cristalino dopado tipo n es de $\phi_{c-Si(n)} = 4.9 \pm 0.1$ eV, concordando con la literatura la cual reporta un valor de 4.85 eV para este material. Esta cifra presenta una diferencia del 14.3% en comparación con el grafeno. Sin embargo, al compararse con el ITO, la diferencia disminuye significativamente a un 4.08%, lo que resulta en una reducción más efectiva de la barrera de Schottky en comparación con el grafeno.

4.5. Silicio cristalino tipo n con emitter amorfo tipo p

Se mide el voltaje de repulsión del sustrato previo al proceso de transferencia de grafeno. Se estudiaron las dos caras de la muestra.

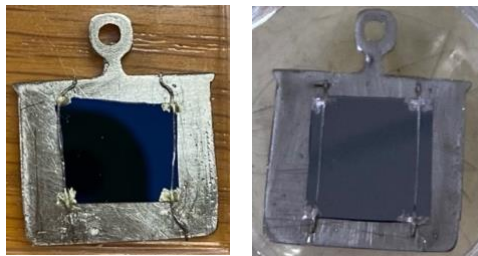


Figura 20. a) Muestra de c-Si(n) emitter tipo p sobre un plato porta-muestras, cara trasera (c-Si(n)). b) Muestra de c-Si(n) emitter amorfo tipo p sobre un plato porta-muestras, cara frontal (emitter amorfo tipo p).

Cara trasera, silicio cristalino tipo n

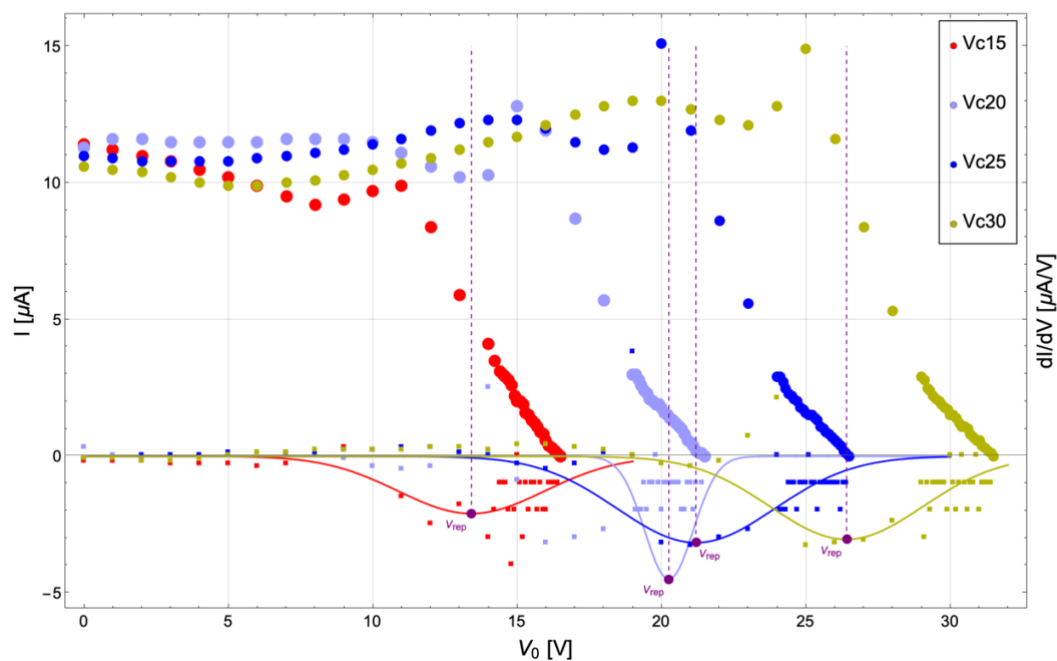


Figura 21. Gráfico de corriente que llega a la muestra de c-Si(n) con emitter amorfo tipo p (cara trasera, c-Si(n)), en función del voltaje de frenado, el eje derecho representa la derivada de dicha corriente respecto al voltaje.

El comportamiento de la muestra c-Si(n) es inusual y no funciona acorde al modelo teórico planteado para la energía cinética emitida por el cañón (Ecuación (7)). En la Figura 21 vemos que las curvas gaussianas son bastantes anchas y se sobreponen entre sí, difiriendo de lo obtenido para la misma superficie de silicio cristalino tipo n en la Figura 20, además al calcular los parámetros relevantes de este sistema obtenemos en algunos casos voltajes de repulsión menores al voltaje de cátodo (Tabla 9).

Tabla 9. Voltaje de repulsión, energía cinética y función trabajo para la cara trasera (c-Si(n)) obtenidos a partir de la Figura 21.

Voltaje de Cátodo [V]	Voltaje de Repulsión [V] (Punto mínimo de la derivada)	Energía Cinética [eV]	Función trabajo [eV] de la cara trasera c-Si(n)
15 —	13.4 $\pm$ 0.5	20.7	7.3 $\pm$ 0.5
20 —	20.25 $\pm$ 0.07	25.71	5.46 $\pm$ 0.07
25 —	21.2 $\pm$ 0.2	30.7	9.5 $\pm$ 0.2
30 —	26.4 $\pm$ 0.2	35.7	9.3 $\pm$ 0.2

En la cuarta columna de la Tabla 9, se presenta el valor calculado de la función trabajo correspondiente a cada voltaje de cátodo. Obteniéndose un valor promedio de $\phi_{c-Si(n)} = 7.89 \pm 0.18$ eV.

Estos resultados exhiben valores inusualmente elevados, divergentes de manera significativa con respecto a los valores de WF previamente documentados en la literatura para silicio cristalino tipo n 4.85 eV, ni tampoco para el valor obtenido en la sección 4.5 del presente trabajo para c-Si(n) con una capa nativa de óxido. La presencia de un punto de inflexión en las curvas antes de alcanzar el voltaje de cátodo previsto (a excepción del voltaje de cátodo de 20 V). Este fenómeno sugiere que los electrones están experimentando repulsión antes de que el voltaje de frenado actúe completamente sobre la muestra.

Uno de los factores que podría contribuir a este suceso, además de las limitaciones inherentes al modelo para la energía cinética presentado en la Ecuación (7) en ciertos tipos de materiales, como se observa en este caso, es la posibilidad de que la muestra tenga una alta resistencia. Esta alta resistencia podría generar una acumulación de carga espacial en la muestra, ya que el flujo de carga que llega al semiconductor no se evacua completamente antes de que se manifieste el efecto del voltaje de repulsión. Por ende, la muestra no es conductora.

Para comprobar si ese es el caso de la muestra de estudio, se realizó la medición de su resistencia sobre el plato porta muestras usando dos puntas. En donde para llevar a cabo la medición se considera la configuración experimental correspondiente a la Figura 22.

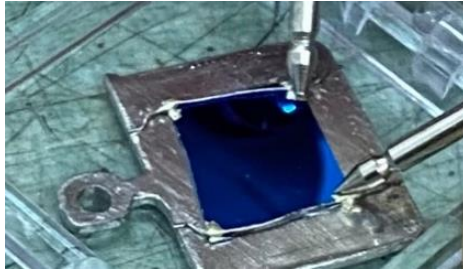


Figura 22 . Medición de la resistencia usando dos puntas de la cara trasera de la muestra de estudio.

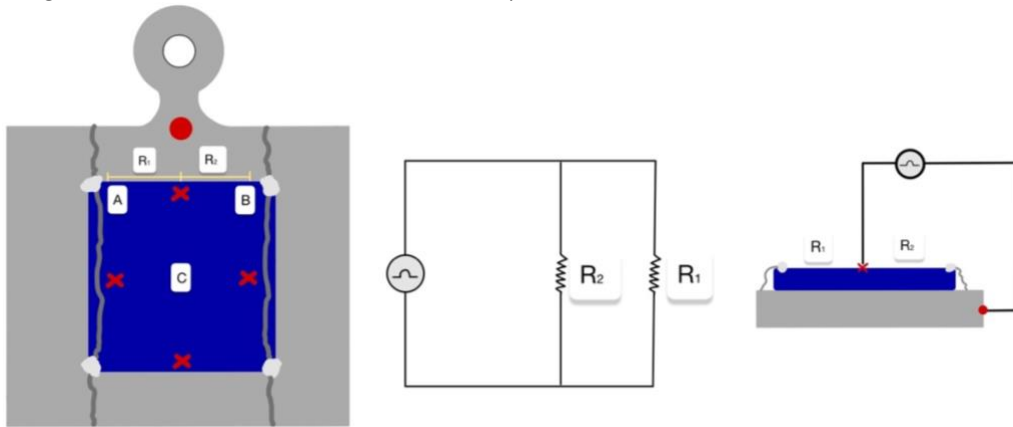


Figura 23 . Sistema de medición de resistencia sobre la muestra y circuito en paralelo de las resistencias, cara trasera.

Las puntas del multímetro deben ubicarse en la posición circular roja y en las X del mismo color, como se indica en la Figura 23, donde el circuito de corriente se dispone en paralelo. Al realizar las mediciones se obtiene un valor constante de 130Ω en cada punto delimitado. Cabe recalcar que la resistencia del plato porta-muestras, los alambres de tungsteno y adhesivo epóxico conductor, es menor a 1Ω . Para encontrar la resistencia total desde el segmento A al segmento B de la muestra de silicio, sumamos los inversos de cada resistencia.

$$\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} = \frac{1}{130 [\Omega]} \quad (6)$$

$$\frac{R_2 + R_1}{R_1 \cdot R_2} = \frac{1}{130 [\Omega]} \quad (7)$$

Asumiendo simetría central entre los vértices de la muestra, tenemos que $R_1 \approx R_2$.

$$\frac{2R}{R^2} = \frac{1}{130 [\Omega]} \quad (8)$$

$$R = 260 [\Omega] \quad (9)$$

Cada resistencia individual tiene un valor de 260Ω . Por ende, la resistencia total de la muestra, medida desde el segmento A al segmento B, es de 520Ω . Este valor de resistencia es bajo y no puede explicar el fenómeno observado en la Figura 21.

Al medir la resistencia de la muestra de forma aislada, sin estar conectada al porta-muestras y utilizando el método de doble punta en el segmento C, se obtiene una

resistencia de aproximadamente $170\ \Omega$, esta diferencia de valores se debe a la distancia en la posición de las puntas, recordar que dicho parámetro es proporcional a la resistencia. Por lo tanto, la hipótesis de que esta cara de la muestra no es conductora y posee una alta resistividad se descarta.

Además, se examina la superficie en la cara trasera de la muestra mediante microscopía óptica Raman con el objetivo de analizar si el comportamiento observado en la muestra se debe a irregularidades o heterogeneidades en su superficie (Figura 24). La estructura superficial de c-Si(n) es homogénea, por ende, no hay mayores diferencias significativas diferentes secciones estudiadas de dicho material, en lo que respecta a su superficie. La ausencia de irregularidades superficiales disminuye la probabilidad de que el fenómeno observado sea atribuible a tal parámetro.



Figura 24. Superficie de la cara trasera de la muestra de estudio mediante microscopía óptica Raman.

Cara frontal, emitter amorfo tipo p

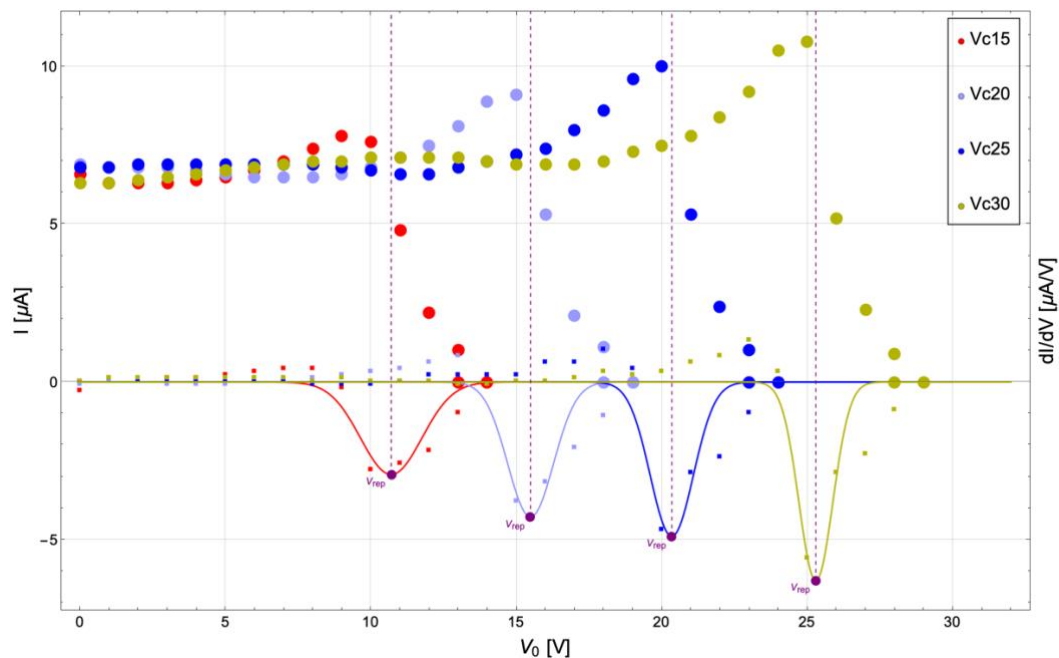


Figura 25 . Gráfico de corriente que llega a la muestra de a-Si(n) con emitter amorfo tipo p (cara frontal, emitter tipo p), en función del voltaje de frenado, el eje derecho representa la derivada de dicha corriente respecto al voltaje.

En esta cara de la muestra que corresponde al *emitter* (silicio amorfo tipo p), las curvas exhiben un comportamiento análogo al de las muestras previas, caracterizado por un margen de error más estrecho y curvas consecutivas en respuesta al voltaje de cátodo aplicado. No obstante, se reitera el fenómeno observado en la segunda columna de la [Tabla 9](#): el voltaje de repulsión se manifiesta antes de superar el voltaje de cátodo suministrado al sistema.

Tabla 10. Voltaje de repulsión, energía cinética y función trabajo para la cara frontal (*emitter* amorfo tipo p) obtenidos a partir de la Figura 25.

Voltaje de Cátodo [V]	Voltaje de Repulsión [V] (Punto mínimo de la derivada)	Energía Cinética [eV]	Función trabajo [eV] de la cara frontal <i>emitter</i> amorfo tipo p
15 —	10.7 ± 0.1	21.7	10.0 ± 0.1
20 —	15.5 ± 0.1	25.7	10.2 ± 0.1
25 —	20.3 ± 0.1	30.7	10.3 ± 0.1
30 —	26.40 ± 0.09	35.67	9.27 ± 0.09

En la cuarta columna de la Tabla 10, se presenta el valor calculado de la función trabajo correspondiente a cada voltaje de cátodo. Se obtiene un valor promedio de $\phi_{emitter(p)} = 9.843 \pm 0.005$ eV. Aunque este valor es elevado, no refleja con precisión la función trabajo real de la superficie. Al medir la resistencia de la cara frontal de la muestra (sin estar en el plato porta-muestra) mediante el sistema de dos puntas, se obtiene un valor de aproximadamente ≈ 10.73 M Ω . Este orden de magnitud sugiere un comportamiento aislante de la superficie, lo cual tiene sentido debido a la delgadez de la capa. El volumen reducido de la capa delgada contribuye significativamente al aumento de la resistencia. La literatura reporta que para un celda solar de silicio de heterojuntura la resistencia de su *emitter* a-Si:H(p) con el TCO es de $0.38 \Omega \text{ cm}^2$ [30], lo cual discrepa en gran medida con lo obtenido para la superficie de estudio.

Esta alta resistencia explica por qué se observa repulsión antes de alcanzar el voltaje de cátodo necesario. Se genera una acumulación de carga espacial en la muestra, desempeñando el papel de repeler los electrones en lugar de depender exclusivamente del voltaje de repulsión del sistema. En consecuencia, el modelo propuesto en la [Ecuación \(7\)](#) no es aplicable a este tipo de superficie.

5. Conclusión y Proyecciones

Se derivó una expresión lineal, a través del uso de oro Au(111) en el sistema de medición de voltaje de repulsión, que describe la energía cinética emitida por los electrones del cañón. Esta expresión, representada por la Ecuación (7) junto con su reemplazo en la Ecuación (5), permite la obtención de la función trabajo de los materiales analizados. Sin embargo, es importante destacar que esta expresión no resulta adecuada para todos los tipos de materiales investigados. En el caso del platino al utilizar el modelo se obtiene de

$\phi_{Pt} = 4.6 \pm 0.1$ eV valor que discrepa de lo reportado por la literatura por 1.11 eV, esta diferencia no se debe a una problemática en el modelo, sino que en la calidad superficial de la muestra de platino utilizada. En contraste, el modelo demuestra su eficacia en el caso del silicio cristalino tipo n (c-Si(n)) y el óxido de grafeno sobre silicio tipo p. En el caso del c-Si(n), se obtienen valores de la función trabajo de $\phi_{c-Si(n)} = 4.9 \pm 0.1$ eV, con una discrepancia de 0.05 eV respecto a los datos reportados en la literatura. De manera similar, para el óxido de grafeno sobre silicio tipo p, se obtiene un valor de $\phi_{GO} = 5.3 \pm 0.1$ eV, presentando una discrepancia de 0.07 eV en comparación con los valores literarios de la función trabajo. Ahora bien, el ITO posee un valor de función trabajo $\phi_{ITO} = 4.7$ eV más similar a los silicios analizados y para los cuales el modelo funciona con una diferencia de 0.15 eV, en cambio el óxido de grafeno presenta según la literatura un valor de $\phi_{GO} = 5.23$ eV difiriendo así con c-Si(n) y c-Si(p) en 0.38 eV. Por ende, el ITO logra una reducción más efectiva de la barrera de Schottky en comparación con el óxido de grafeno.

Una conclusión adicional es que el modelo que describe la energía cinética de los electrones en el sistema de medición (Ecuación (7)) solo es válido para materiales que no generan una repulsión adicional al voltaje de frenado. En el caso de la muestra de silicio cristalino tipo n con emitter amorfo tipo p, se evidencia una repulsión antes de superar el voltaje de cátodo suministrado al sistema. Por lo tanto, los valores obtenidos para la función trabajo, tanto en la cara trasera como frontal de la muestra, carecen de veracidad. Esta discrepancia se manifiesta en los elevados valores de función trabajo, situados alrededor de 7 a 9 eV para un material semiconductor.

Una posible explicación para este fenómeno radica en la alta resistencia de la muestra, una característica que solo se verifica en la cara de la juntura que presenta emitter tipo p (10.73 M Ω). En contraste, en la otra cara, esta explicación no se sostiene. De hecho, al examinar su superficie homogénea, no es posible discernir la razón detrás de este fenómeno que genera discrepancias, esto es sumamente extraño dado que fue posible medir la función trabajo del c-Si(n) en la sección 4.4 del presente proyecto sin problemas, obteniendo un valor de $\phi_{c-Si(n)} = 4.9 \pm 0.1$ eV. Por lo tanto, es esencial que futuras investigaciones aborden este fenómeno para arrojar luz sobre las observaciones actuales, además de esto, entre otras proyecciones futuras se buscará estudiar el comportamiento de este silicio considerando la cara que contiene el emitter amorfo tipo p con una capa de grafeno sobre este.

Aunque los resultados respaldan la eficacia del ITO, se identifican desafíos significativos en la aplicación del modelo propuesto, lo que destaca la complejidad de la interacción entre el grafeno y diferentes tipos de silicio en celdas de silicio de heterojuntura, desafíos los cuales se busca mejorar en investigaciones futuras.

6. Bibliografía

- [1] M. A. Green *et al.*, “Solar cell efficiency tables (Version 61),” *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 31, no. 1, pp. 3–16, Jan. 2023, doi: 10.1002/pip.3646.
- [2] R. Garg, N. K. Dutta, and N. R. Choudhury, “Work function engineering of graphene,” *Nanomaterials*, vol. 4, no. 2, pp. 267–300, 2014, doi: 10.3390/nano4020267.
- [3] Y. Zhang, M. Kim, L. Wang, P. Verlinden, and B. Hallam, “Design considerations for multi-terawatt scale manufacturing of existing and future photovoltaic technologies: Challenges and opportunities related to silver, indium and bismuth consumption,” *Energy Environ Sci*, vol. 14, no. 11, pp. 5587–5610, 2021, doi: 10.1039/d1ee01814k.
- [4] P. Procel, G. Yang, O. Isabella, and M. Zeman, “Theoretical evaluation of contact stack for high efficiency IBC-SHJ solar cells,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 186, no. April, pp. 66–77, 2018, doi: 10.1016/j.solmat.2018.06.021.
- [5] H. S. Simon, “The Oxford Solid State Basics,” in *The Oxford Solid State Basics*, 1st ed., Oxford: Oxford University Press, 2013, p. 290.
- [6] EEEGUIDE, “Energy Band Diagram of Semiconductors, Insulators and Metals.” [Online]. Available: <https://www.eeeguide.com/energy-band-diagram-of-semiconductors-insulators-and-metals/>
- [7] A. M. Leiva, “GRAFENO COMO CONDUCTOR TRANSPARENTE EN CELDAS SOLARES DE,” 2023.
- [8] V. Malgras, A. Nattestad, J. H. Kim, S. X. Dou, and Y. Yamauchi, “Understanding chemically processed solar cells based on quantum dots,” *Sci Technol Adv Mater*, vol. 18, no. 1, pp. 334–350, 2017, doi: 10.1080/14686996.2017.1317219.
- [9] H. C and B. S, “Photovoltaics Education Website”.
- [10] A. Stadler, “Transparent Conducting Oxides—An Up-To-Date Overview,” *Materials*, vol. 5, no. 12, pp. 661–683, 2012, doi: 10.3390/ma5040661.
- [11] G. T. Chavan *et al.*, “A Brief Review of Transparent Conducting Oxides (TCO): The Influence of Different Deposition Techniques on the Efficiency of Solar Cells,” *Nanomaterials*, vol. 13, no. 7, 2023, doi: 10.3390/nano13071226.
- [12] a K. Geim, “GRAPHENE: STATUS AND PROSPECTS A. K. Geim Manchester Centre for Mesoscience and Nanotechnology, University of Manchester, Oxford Road M13 9PL, Manchester, UK,” *Prospects (Paris)*, vol. 324, no. 6, pp. 1–8, 2009, doi: 10.1126/science.1158877.
- [13] C. Honsberg and S. Bowden, “Photovoltaics Education Website,” Photovoltaics Education Website. [Online]. Available: <https://www.pveducation.org/>
- [14] K. S.O, *Principles of electronic materials and devices*. New York, NY: McGraw-Hill,.
- [15] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2005.
- [16] S. H. Chou, J. Voss, I. Bargatin, A. Vojvodic, R. T. Howe, and F. Abild-Pedersen, “An orbital-overlap model for minimal work functions of cesiated metal surfaces,”

- Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 24, no. 44, 2012, doi: 10.1088/0953-8984/24/44/445007.
- [17] K. U. Ritzau *et al.*, “TCO work function related transport losses at the a-Si:H/TCO-contact in SHJ solar cells,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 131, pp. 9–13, 2014, doi: 10.1016/j.solmat.2014.06.026.
 - [18] R. Esparza *et al.*, “Energy calibration of a Rowland circle spectrometer for inverse photoemission,” *Nucl Instrum Methods Phys Res A*, vol. 945, no. August, p. 162570, 2019, doi: 10.1016/j.nima.2019.162570.
 - [19] J. Shi *et al.*, “MoOx modified ITO/a-Si:H(p) contact for silicon heterojunction solar cell application,” *Mater Res Bull*, vol. 97, no. June 2017, pp. 176–181, 2018, doi: 10.1016/j.materresbull.2017.09.005.
 - [20] G. Shao, “Work Function and Electron Affinity of Semiconductors: Doping Effect and Complication due to Fermi Level Pinning,” *Energy and Environmental Materials*, vol. 4, no. 3, pp. 273–276, 2021, doi: 10.1002/eem2.12218.
 - [21] Y. Zhou *et al.*, “Direct correlation between work function of indium-tin-oxide electrodes and solar cell performance influenced by ultraviolet irradiation and air exposure,” *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 14, no. 34, pp. 12014–12021, 2012, doi: 10.1039/c2cp42448g.
 - [22] M. Serhan *et al.*, “Total iron measurement in human serum with a smartphone,” *AIChE Annual Meeting, Conference Proceedings*, vol. 2019-Novem, 2019, doi: 10.1039/x0xx00000x.
 - [23] F. Gossenberger, T. Roman, K. Forster-Tonigold, and A. Groß, “Change of the work function of platinum electrodes induced by halide adsorption,” *Beilstein Journal of Nanotechnology*, vol. 5, no. 1, pp. 152–161, 2014, doi: 10.3762/bjnano.5.15.
 - [24] C. Untiedt *et al.*, “Calibration of the length of a chain of single gold atoms,” *Phys Rev B Condens Matter Mater Phys*, vol. 66, no. 8, pp. 854181–854186, 2002, doi: 10.1103/PhysRevB.66.085418.
 - [25] M. Bivour, S. Schröer, and M. Hermle, “Numerical analysis of electrical TCO / a-Si:H(p) contact properties for silicon heterojunction solar cells,” *Energy Procedia*, vol. 38, pp. 658–669, 2013, doi: 10.1016/j.egypro.2013.07.330.
 - [26] B. Huet and J. P. Raskin, “Role of the Cu substrate in the growth of ultra-flat crack-free highly-crystalline single-layer graphene,” *Nanoscale*, vol. 10, no. 46, pp. 21898–21909, 2018, doi: 10.1039/c8nr06817h.
 - [27] L. M. Malard, M. A. Pimenta, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, “Raman spectroscopy in graphene,” *Phys Rep*, vol. 473, no. 5–6, pp. 51–87, 2009, doi: 10.1016/j.physrep.2009.02.003.
 - [28] A. Crawford, E. Silva, K. York, and C. Li, “Raman Spectroscopy : A Comprehensive Review,” *Www.Academia.Edu*, p. 34, 2017, [Online]. Available: https://www.academia.edu/1131363/Raman_Spectroscopy_A_Comprehensive_Review
 - [29] Z. Ni, Y. Wang, T. Yu, and Z. Shen, “Raman spectroscopy and imaging of graphene,” *Nano Res*, vol. 1, no. 4, pp. 273–291, 2008, doi: 10.1007/s12274-008-8036-1.

- [30] S. Y. Lee *et al.*, “Analysis of a-Si:H/TCO contact resistance for the Si heterojunction back-contact solar cell,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 120, no. PART A, pp. 412–416, 2014, doi: 10.1016/j.solmat.2013.06.026.