

**DISEÑO DE UNA HERRAMIENTA DE SOFTWARE PARA DETERMINAR
CONSTANTES ÓPTICAS EN PELÍCULAS DELGADAS SEMICONDUCTORAS
NO HOMOGÉNEAS**

**ERIK ALEXANDER AFRICANO MEJÍA
DEISY YESENIA TORRES CELIS**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA ELÉCTRICA, ELECTRÓNICA Y
TELECOMUNICACIONES
BUCARAMANGA
2020**

**DISEÑO DE UNA HERRAMIENTA DE SOFTWARE PARA DETERMINAR
CONSTANTES ÓPTICAS EN PELÍCULAS DELGADAS SEMICONDUCTORAS
NO HOMOGÉNEAS**

**ERIK ALEXANDER AFRICANO MEJÍA
DEISY YESENIA TORRES CELIS**

**Trabajo de investigación para optar
al título de Ingeniero Electrónico**

Directora:

**Mónica Andrea Botero Londoño
Dra. en Ciencias Físicas**

Codirector:

**Franklin Alexander Sepúlveda S
Dr. en Ingeniería**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA ELÉCTRICA, ELECTRÓNICA Y
TELECOMUNICACIONES
BUCARAMANGA**

2020

DEDICATORIA

A Dios por brindarme fortaleza en los momentos de dificultad y por no permitirme desfallecer. Aunque no fue fácil gracias a el fue posible culminar con éxito mi carrera universitaria.

A mi madre, Irene Celis por todos los sacrificios que ha realizado a lo largo de mi vida para darme lo mejor, por creer en mí, por su amor y su apoyo incondicional. Por ser mi ejemplo de superación y valentía. Espero poder recompensar todo su esfuerzo de la misma manera.

A mi hermano Ferney Celis por estar a mi lado durante este proceso. Para que siga mis pasos y comprenda que con esfuerzo y dedicación todo es posible.

A mi novio Hugo Daza por su constante apoyo, por sus palabras de aliento en los momentos donde sentí que ya no podía seguir. Por creer en mi incluso cuando yo no lo hacía. Por su compañía todos estos años y todo su amor.

A mi abuela Irene Rodríguez por sus enseñanzas durante mi niñez, aunque ya no está siempre he sentido su presencia.

A mi compañero Erik Africano, por comprenderme en los momentos que sentí que no podía seguir. Gracias a su dedicación, paciencia y compromiso fue posible llevar a cabo este trabajo de grado.

Deisy Celis

DEDICATORIA

Dedico este triunfo a Dios por brindarme la oportunidad de estudiar y me guio para terminar mi carrera.

A mis padres Fermín Africano y Marleny Mejía, que, con sus esfuerzos, sacrificios, amor y valores inculcados me enseñaron a luchar para alcanzar mis metas, siempre en busca del éxito. Este triunfo es también un triunfo de ustedes, Dios los bendiga siempre.

A toda mi familia, en especial a mis hermanos Diana y Fermín por estar conmigo en las etapas de este proceso formativo, motivándome y ayudándome a no desfallecer.

Erik Africano.

AGRADECIMIENTOS

A Dios por las bendiciones recibidas a lo largo de nuestra carrera y por permitirnos culminarla con éxito.

A la profesora Mónica Andrea Botero Londoño, directora del proyecto, por su tiempo, apoyo y sabiduría, gracias a esto fue posible realizar este trabajo de grado.

A nuestros compañeros y amigos quienes nos apoyaron y acompañaron durante este proceso de formación.

TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN.....	15
1. OBJETIVOS.....	18
1.1 OBJETIVO GENERAL.....	18
1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	18
2. ANTECEDENTES.....	19
3. MARCO TEÓRICO CONCEPTUAL.....	21
3.1 FUNCIONAMIENTO DE CELDAS SOLARES DE PELÍCULA DELGADA.....	21
3.4 LENGUAJE DE PROGRAMACIÓN PYTHON.....	35
4. PROCEDIMIENTO.....	38
4.1 PROGRAMACIÓN EN PYTHON.....	38
5. RESULTADOS.....	44
5.1 GUÍA PARA EL USO DEL SOFTWARE COPS II.....	44
6. ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	51
6.1 COMPARACIÓN ENTRE ESPECTRO EXPERIMENTAL Y TEÓRICO.....	51
6.1.1 Películas homogéneas.....	53
6.1.2 Películas no homogéneas.....	57
7. CONCLUSIONES.....	64
8. RECOMENDACIONES.....	65
BIBLIOGRAFÍA.....	66

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Sección transversal de una celda solar de tipo heterojuntura.....	22
Figura 2. Regiones del espectro de transmitancia.	26
Figura 3. Sistema de una película delgada absorbente con una variación de grosor en un sustrato transparente finito y grueso.	27
Figura 4. Espectro de transmitancia simulada para una película absorbente con espesor uniforme (curva de puntos) en comparación con el de una película no homogénea (curva completa).	28
Figura 5. Gráfica de $l/2$ vs θ_1 para determinar θ en la región de absorción.	30
Figura 6. Curva de n vs $1/\lambda^2$ usada para determinar los parámetros a y b de la ecuación de Cauchy.	32
Figura 7. Gráfica de $l/2$ contra n/λ para determinar el espesor.	33
Figura 8. Curva de ahv^2 vs hv usada para determinar el gap óptico.	35
Figura 9. Esquema usado para la construcción del software COPS II.....	38
Figura 10. Pasos para calcular constantes ópticas.....	39
Figura 11. Puntos extremos del espectro de transmitancia.	40
Figura 12. Puntos extremos y envolventes del espectro de transmitancia.	41
Figura 13. Ventana inicio COPS II.	44
Figura 14. Ventana principal software COPS II.....	45
Figura 15. Información de software COPS II.	46
Figura 16. Ventana cálculo de constantes ópticas.....	47
Figura 17. Especificaciones de los parámetros de entrada.	48
Figura 18. Ventana de cálculo con resultados de las constantes ópticas.	49
Figura 19. Pasos para realizar el cálculo de las constantes ópticas en COPS II...50	50
Figura 20. Comparación entre espectros Teórico y Experimental.	51
Figura 21. Acercamiento de la figura 20 para una mejor visualización.	52
Figura 22. Índice de Refracción.	54
Figura 23. Coeficiente de Absorción.	55
Figura 24. Gap directo.	56

Figura 25. Espectro de Transmitancia (Simulación).	59
Figura 26. Índice de refracción.....	60
Figura 27. Coeficiente de Absorción.	61
Figura 28. Espectro de película no homogéneo con variación de espesor.....	62
Figura 29. Espectro de película no homogéneo con variación en Δd	63

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Datos espectro experimental y simulado	59
---	----

RESUMEN

TÍTULO: DISEÑO DE UNA HERRAMIENTA DE SOFTWARE PARA DETERMINAR CONSTANTES ÓPTICAS EN PELÍCULAS DELGADAS SEMICONDUCTORAS NO HOMOGENÉAS.*

AUTORES: ERIK ALEXANDER AFRICANO MEJÍA
DEISY YESENIA TORRES CELIS**

PALABRAS CLAVES: Software, materiales semiconductores, celdas solares, película delgada, constantes ópticas.

DESCRIPCIÓN:

Mediante el estudio de las propiedades ópticas es posible conocer si los materiales semiconductores usados en la síntesis de las películas son adecuados para usarse en celdas solares. En este proyecto se realizó el diseño de una herramienta de software que sirve como apoyo a entidades que se dedican a la síntesis de películas delgadas de materiales semiconductores, específicamente los empleados como capa absorbente en celdas solares. El desarrollo de la herramienta se basó en los métodos propuestos por Swanepoel en 1983 y 1984, los cuales permiten determinar las constantes ópticas de los semiconductores homogéneos¹ y no homogéneos², es decir, determinan índice de refracción, coeficiente de absorción, gap y la variación del espesor. Esta información se evalúa a partir del análisis de las curvas de transmitancia espectral.

* Trabajo de grado.

** Facultad de Facultad de ingenierías Físico-mecánicas. Escuela de Ingenierías Eléctrica, Electrónica y de Telecomunicaciones. Directora: Dra. en Ciencias Físicas, Mónica Andrea Botero Londoño. Codirector: Dr. en Ingeniería, Alexander Sepúlveda S.

¹ Swanepoel, R. Home Search and others. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon. Printed in Great Britain. Department of Physics, Rand Afrikaans University, Johannesburg, South Africa, J. Phys. E: Sci. Instrum. Vol. 16, 1983, p.1214-1222.

² Swanepoel, R. Home Search and others. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films. Printed in Great Britain. Department of Physics, Rand Afrikaans University, Johannesburg, South Africa, J. Phys. E: Sci. Instrum. Vol. 17, 1984, p.896-903.

ABSTRACT

TITLE: DESIGN OF A SOFTWARE TOOL TO DETERMINE OPTICAL CONSTANTS IN NON-HOMOGENEOUS SEMICONDUCTOR THIN FILMS.*

AUTHORS: ERIK ALEXANDER AFRICANO MEJÍA
DEISY YESENIA TORRES CELIS**

KEY WORDS: Software, semiconductor materials, solar cells, thin film, optical constants.

DESCRIPTION:

By studying the optical properties, it is possible to know if the semiconductor materials used in the synthesis of the films are suitable for each of the layers of the solar cell. In this bachelor project the design of a software tool was carried out to serve as support for entities dedicated to the synthesis of thin films of semiconductor materials, specifically those used as an absorbing layer in solar cells. The development of the tool was based on the methods proposed by Swanepoel in 1983 and 1984, which allow determining the optical constants of homogeneous³ and non-homogeneous⁴ semiconductors, that is, determining, refractive index, absorption coefficient, gap and variation of the thickness. This information is evaluated from the analysis of spectral transmittance curves.

* Bachelor Thesis.

** Physical-Mechanical Engineering Faculty. School of Electrical, Electronics and Telecommunication Engineering. Director: Dra. in Physical Sciences, Mónica Andrea Botero Londoño. Co-director: Dr. in Engineering, Alexander Sepúlveda S.

³ Swanepoel, R. Home Search and others. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon. Printed in Great Britain. Department of Physics, Rand Afrikaans University, Johannesburg, South Africa, J. Phys. E: Sci. Instrum. Vol. 16, 1983, p.1214-1222.

⁴ Swanepoel, R. Home Search and others. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films. Printed in Great Britain. Department of Physics, Rand Afrikaans University, Johannesburg, South Africa, J. Phys. E: Sci. Instrum. Vol. 17, 1984, p.896-903.

INTRODUCCIÓN

Debido al alto consumo de energía que se ha presentado a nivel mundial y el impacto negativo que generan los combustibles fósiles en el medio ambiente ha sido necesario buscar nuevas formas de generación de energía como lo son las energías limpias, las cuales son amigables con el medio ambiente y se obtienen de fuentes naturales inagotables. Estas son elementales para el desarrollo del país, así como para su población ya que permiten solucionar el problema de suministro de energía en zonas rurales. Las más representativas son eólica, geotérmica, hidroeléctrica, bioenergía, mareomotriz y solar fotovoltaica. Las energías mareomotriz y geotérmica requieren gran inversión inicial y la construcción de sus instalaciones toma largo tiempo. Por su parte, la energía de la biomasa requiere gran cantidad de espacio, además el proceso de obtención y producción es costoso. Las centrales hidroeléctricas a pesar de ser muy utilizadas actualmente afectan el ecosistema ya que modifican el hábitat de las especies que viven en el agua. La energía eólica, aunque ha sido usada desde la antigüedad, presenta dificultades a la hora de intentar controlar el viento, por esta razón, en ocasiones no será suficiente para la producción de energía.

Por otro lado, se encuentra la energía solar fotovoltaica, que transforma directamente la luz solar en electricidad mediante el efecto fotovoltaico, esta es inagotable y contamina en menor proporción. Según REN 21⁵ en el año 2017 la tecnología más usada en cuanto a generación de energía fue la solar fotovoltaica, a nivel mundial se instalaron alrededor de 98 GWdc de capacidad, lo cual aumentó la capacidad total que se encuentra aproximadamente en 402 GW.

En Latinoamérica la energía solar fotovoltaica está desempeñando un papel importante en el suministro de energía, gran parte de la capacidad instalada ha sido

⁵ REN21. Renewables 2018 global status report. [En línea]. Technical report, REN 21, 2018. (Recuperado en 20 Abril 2019). Disponible en internet: <http://www.ren21.net>

en proyectos a gran escala. Colombia no es ajena a las tendencias a nivel mundial, en 2014 el gobierno aprobó la ley 1715⁶ por medio de la cual se regula la integración de fuentes no convencionales de energía, principalmente las renovables. Esta ley incentiva a las empresas del sector energético y a los consumidores hacia el uso eficiente de la energía y a que aporten a la protección del medio ambiente.

Con el paso de los años se han desarrollado diversas tecnologías de fabricación de celdas solares entre las cuales se encuentran las celdas de silicio monocristalino, celdas de silicio amorfo, celdas sensibilizadas con colorantes, celdas basadas en compuestos orgánicos y celdas con tecnología de película fina o delgada; con esta última, ha sido posible reducir los costos de generación de energía eléctrica notablemente mediante el uso de nuevos materiales semiconductores⁷. Actualmente se fabrican módulos FV de película delgada con tres materiales semiconductores que pasaron del desarrollo a nivel de laboratorio a la producción industrial. Estos son: silicio amorfo (a-Si), telurio de cadmio (CdTe) y compuestos tipo calcopirita como los CIGS's⁸.

El grupo de investigación en Sistemas de Energía Eléctrica (GISEL) está comenzando a sintetizar películas delgadas semiconductoras empleadas en la fabricación de dichas celdas, por tanto, requiere trabajar en técnicas de caracterización que permitan determinar propiedades ópticas, eléctricas y morfológicas de los materiales. Uno de los parámetros más importantes para determinar si los materiales sintetizados son adecuados para su uso en celdas

⁶ COLOMBIA. CONGRESO DE LA REPÚBLICA. Ley 1715 (13, mayo, 2014). Por medio de la cual se regula la integración de las energías renovables no convencionales al Sistema Energético Nacional. Diario Oficial. Bogotá, D.C., 2014, no. 49150. p. 1-25.

⁷ JARAMILLO ISAZA, Franklin y MEJÍA ESCOBAR, Mario Alejandro. Celdas solares y nanotecnología. [En línea]. Universidad de Antioquia. p. 1-11. (Recuperado en 28 Abril 2019). Disponible en internet: <http://www.propiedadpublica.com.co/celdas-solares-y-nanotecnologia/>

⁸ OTÁLORA BASTIDAS, Camilo Andrés. Desarrollo de materiales usados en la fabricación de celdas solares orgánicas. Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de: Maestría en Ciencias-Química. Bogotá: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ciencias – Departamento de Química, 2013, 62p.

solares son las constantes ópticas, las cuales se pueden determinar a partir de medidas de transmitancia y parámetros virtuales mediante herramientas de software. Actualmente existe un software llamado COPS⁹, desarrollado en el grupo, el cual determina las constantes ópticas en películas delgadas; sin embargo, este software es adecuado para ser usado en películas homogéneas. De otra parte, se han realizado trabajos en los cuales las películas sintetizadas no son homogéneas, por tanto, surge la necesidad de crear una nueva herramienta de software que permita calcular estas constantes para películas no homogéneas.

Para la realización de este proyecto, se tomó como base el software COPS, que trabaja únicamente con películas homogéneas; buscando mejorar esto, se desarrolla la herramienta de software COPS II que permite trabajar tanto con películas homogéneas como no homogéneas, esto hace que el programa sea más integral. Además, maneja una tolerancia de 10^{-10} , esto permite tener aproximaciones más exactas. Los métodos usados para realizar los cálculos y análisis de datos se llevaron a cabo aplicando conceptos matemáticos.

⁹ VARGAS PEREA, Heiner Alexander y ROCHA GONZÁLES, Robinson. Diseño de una herramienta de software para determinar constantes ópticas en películas delgadas semiconductoras empleadas en celdas solares. Trabajo de grado para optar al título de Ingenieros Electrónicos. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Físico-Mecánicas, 2016, 192p.

1. OBJETIVOS

1.1 OBJETIVO GENERAL

Diseño de una herramienta de software para determinar constantes ópticas en películas delgadas semiconductoras no homogéneas.

1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Conceptualizar el método desarrollado por R Swanepoel para calcular las constantes ópticas en películas delgadas semiconductoras no homogéneas a partir de medidas de transmitancia espectral.
- Implementar las ecuaciones usadas por R Swanepoel para el desarrollo de la herramienta software, utilizando el lenguaje de programación Python.
- Realizar pruebas pertinentes para comprobar el funcionamiento de la herramienta diseñada.

2. ANTECEDENTES

El estadounidense C. E. Fritts¹⁰, colocó una lámina de selenio amorfo sobre la superficie de un metal y lo cubrió con una lámina de oro transparente, esto produjo una corriente continua, constante y de considerable fuerza cuando esta era expuesta a la luz solar. De esta manera, logró convertir la luz solar en electricidad, con una eficiencia menor al 1%.

El crecimiento de las celdas solares ha estado directamente relacionado con el silicio. Este material es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre (27,7%) después del oxígeno¹¹. En 1954, en los laboratorios Bell fue desarrollada la primera celda solar de silicio elaborada por Chapin obteniendo una eficiencia del 6%, la cual se logró mejorar hasta llegar a un 10%, a este tipo de celdas se le denominó de primera generación¹².

Más adelante, surgieron las celdas solares tipo película delgada, las cuales están conformadas por una o más capas. Dichas películas se han caracterizado por presentar homogeneidad en su superficie, sin embargo, en una tesis desarrollada en la Universidad Nacional sede Manizales se encontró que la superficie de las películas depositadas sobre sustratos de vidrio es no homogénea¹³.

¹⁰ FRAAS, Lewis y PARTAIN, Larry. Solar cells and their applications. Second edition. New Jersey: WILEY, 2010. p. 3. (Wiley series in microwave and optical engineering). ISBN 978-0-470-44633-1

¹¹ PONCE ALCÁNTARA, Salvador. Células solares de silicio: Fundamentos y aplicaciones. [En línea]. Málaga, España. 2008, 75 p. (Recuperado en 13 Octubre 2019). Disponible en internet: https://www.academia.edu/6347838/CÉLULAS_SOLARES_DE_SILICIO_FUNDAMENTOS_Y_APLICACIONES

¹² GONZÁLES GARZA, Jorge Oswaldo. Películas delgadas de seleniuro de plata y antimonio por medio de la combinación de baño químico y evaporación térmica para aplicaciones fotovoltaicas. Tesis con opción a grado de maestro en Ciencias de la Ingeniería Mecánica con Especialidad en Materiales. San Nicolás de los Garza: Universidad Autónoma de Nuevo León. Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, 2010, 137p.

¹³ MORENO MONTOYA, Luis y ARANGO, Pedro José. Caracterización estructural y morfológica de películas de ZnO crecidas sobre sustratos de vidrio. En: Dyna. Medellín: Universidad Nacional de Colombia-Manizales. Marzo, 2007, vol. 74, Nro. 151. p. 37-45. ISSN 0012-7353

Por otra parte, se han desarrollado métodos que permiten determinar las constantes ópticas en películas delgadas homogéneas. En el caso del índice de refracción, Dirk Poelman¹⁴ menciona algunos métodos, en donde unos requieren de la lectura del espectro de transmitancia, mientras que otros requieren del espectro de transmitancia y la reflectancia. Entre los más importantes y sencillos se encuentran las ecuaciones de Cauchy, la relación de Sellmeier, el Oscilador de Lorentz, las ecuaciones de Frouhi-Bloomer y el método de las envolventes de Swanepoel.

Asimismo, existen softwares que permiten calcular las constantes ópticas y el espesor de películas delgadas a partir del espectro de transmitancia, algunos de ellos son: PARAV¹⁵, COPS¹⁶ y Refractor¹⁷; los dos primeros están desarrollados para calcular las constantes ópticas únicamente para películas homogéneas, a diferencia de Refractor, el cual sirve tanto para películas homogéneas como para no homogéneas.

¹⁴ POELMAN, Dirk y PHILIPPE, Frederic Smet. Methods for the determination of the optical constants of thin films from single transmission measurements: a critical review. En: Journal of Physics D: Applied Physics. Department of Solid State Sciences: Ghent University. Julio, 2003, vol. 36, Nro. 15. p. 1850-1857. PII: S0022-3727(03)58303-6

¹⁵ GANJOO, A y GOLOVCHAK, R. Computer program PARAV for calculating optical constants of thin films and bulk materials: Case study of amorphous semiconductors. En: Journal of Optoelectronics and Advanced Materials. Junio, 2008, vol. 10, Nro. 6. p. 1328-1332.

¹⁶ VARGAS PEREA, Heiner Alexander y ROCHA GONZÁLES, Robinson. Diseño de una herramienta de software para determinar constantes ópticas en películas delgadas semiconductoras empleadas en celdas solares. Trabajo de grado para optar al título de Ingenieros Electrónicos. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Físico-Mecánicas, 2016, 192p.

¹⁷ CARICATO, A. P; FAZZI, A y LEGGIERI, G. A computer program for determination of thin films thickness and optical constants. En: Applied Surface Science. Julio, 2005, vol. 248, Nro. 1-4. p. 440-445.

3. MARCO TEÓRICO CONCEPTUAL

A continuación, se presentan los fundamentos teóricos que se deben tener en cuenta para lograr desarrollar la herramienta de software COPS II (constantes ópticas en películas delgadas semiconductoras). Este programa tiene como objetivo calcular las constantes ópticas (índice de refracción, coeficiente de absorción y brecha de energía prohibida) y espesor en películas delgadas usadas en celdas solares, tanto en películas homogéneas como no homogéneas.

3.1 FUNCIONAMIENTO DE CELDAS SOLARES DE PELÍCULA DELGADA

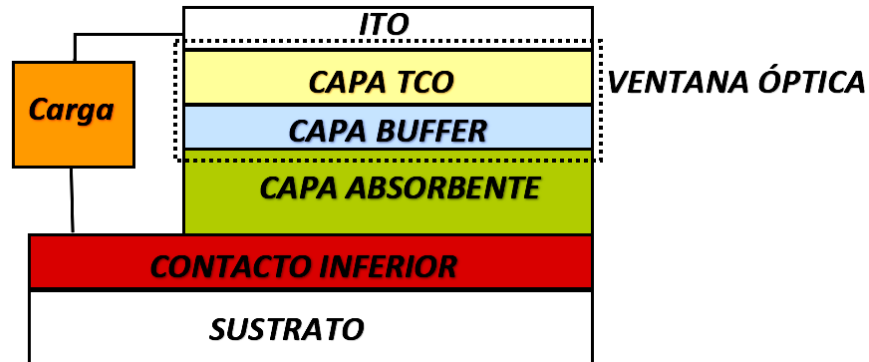
Las celdas solares de película delgada están conformadas por capas de diferentes semiconductores, cuyos espesores varían entre 20 [nm] y 5 [μm]; el área activa de una celda solar de este tipo presenta un espesor máximo de 7–8 [μm]; debido a esto reciben la denominación de celdas de película delgada¹⁸.

Como indica Espinós¹⁹, por su extrema delgadez y fragilidad estas películas no se suelen emplear aisladas, sino que se hallan soportadas sobre otros sólidos de mayor grosor y distintas propiedades físicas o químicas que denominamos sustratos. Estos, por lo general son de vidrio y de bajo costo.

¹⁸ VALLEJO LOZADA, William Andrés. Síntesis de capas buffer para celdas solares de película delgada. En: Revista Elementos. Junio, 2012, vol. 2, Nro. 1. p. 83-91.

¹⁹ ESPINÓS MANZORRO, Juan Pedro. Aplicaciones tecnológicas de películas delgadas. [En línea]. 2010, p. 25-28. (Recuperado en 13 mayo 2019). Disponible en internet: <https://core.ac.uk/download/pdf/36050748.pdf>

Figura 1. Sección transversal de una celda solar de tipo heterojuntura.



Fuente: Modificado de: VALLEJO LOZADA, William Andrés. Sección transversal de una celda solar con estructura ventana óptica / capa absorbente. [Figura]. Síntesis de capas buffer para celdas solares de película delgada. Bogotá: Universidad Americana. 2012. p. 85.

En la figura 1, se observa el esquema básico de una celda solar con tecnología película delgada tipo heterojuntura. La ventana óptica está compuesta por la capa buffer y la capa de óxido conductor transparente (TCO); su función básicamente es permitir el paso de radiación solar con el fin de que llegue la mayor cantidad hasta la capa absorbente. Según hurtado²⁰, la capa absorbente es la más importante de la celda solar, debido a que ésta es la única capa activa del dispositivo, donde se genera toda la fotocorriente.

La capa buffer se encarga de mejorar el acople mecánico entre la capa absorbente y el contacto eléctrico. Este último, actúa como contacto óhmico posterior, ayuda al amortiguamiento entre el sustrato de vidrio y la capa absorbente, y refleja parte de la luz que pasa a través de las capas anteriores²¹.

²⁰ HURTADO MORALES, Mikel, Fernando. Síntesis y caracterización de películas delgadas del semiconductor $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ y su uso como capa absorbente en celdas solares. Tesis de Doctorado en Ciencias – Química. Bogotá D.C: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ciencias – Departamento de Química, 2014. p. 11.

²¹ VARGAS PEREA, Heiner Alexander y ROCHA GONZÁLES, Robinson. Diseño de una herramienta de software para determinar constantes ópticas en películas delgadas semiconductoras empleadas

3.2 PROPIEDADES ÓPTICAS DE PELÍCULAS DELGADAS

Las celdas solares están conformadas por películas delgadas, las cuales presentan propiedades específicas según la capa en la que se ubiquen. Para saber el desempeño de las celdas, es necesario conocer las propiedades ópticas de las películas empleadas, con el fin de determinar si cumplen con su función específica dentro del dispositivo. Las capas que conforman la ventana óptica deben ser altamente transparentes a la radiación solar, además deben presentar una brecha de energía prohibida (gap) grande, superior a 2,4 electronvoltio²² [eV]. La capa absorbente debe tener un coeficiente de absorción alto, así como un gap entre 1,1 y 1,5 electronvoltio²³ [eV].

Las propiedades ópticas de un material semiconductor se determinan a partir de sus constantes ópticas, estas son: índice de refracción (n), coeficiente de absorción (α) y brecha de energía prohibida (gap, E_g). Estas constantes, se pueden obtener a partir de medidas experimentales de la transmitancia espectral y de cálculos teóricos usando modelos que tiene en cuenta fenómenos de interferencia observados en los espectros de transmitancia²⁴.

3.2.1 Índice de refracción (n). Castro²⁵, define el índice de refracción n como un parámetro propio de cada material que indica el comportamiento de la luz al

en celdas solares. Trabajo de grado para optar al título de Ingenieros Electrónicos. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Físico-Mecánicas, 2016, 192p.

²² VALLEJO LOZADA, William Andrés. Desarrollo de materiales fotovoltaicos usados como ventana óptica en celdas solares. Tesis de investigación presentada como requisito parcial para optar el título de: Doctor en Ciencias – Química. Bogotá D. C: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ciencias, Departamento de Química, 2011, 75p.

²³ GONZÁLES GARZA, Jorge Oswaldo. Desarrollo de estructuras fotovoltaicas tipo CdS/AgSb(SxSe1-x)2 por medio de técnicas de baja toxicidad y costo. Como requisito parcial para obtener el Grado de Doctor en Ingeniería de Materiales. San Nicolás de los Garza: Universidad Autónoma de Nuevo León. Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, 2013, 220p.

²⁴ MESA RODRIGUEZ, Fredy Giovanni. Síntesis y estudio de propiedades de nuevos materiales fotovoltaicos usados como capa buffer y capa absorbente en celdas solares. Trabajo de grado presentado para optar el título de Doctor en Ciencias-Física. Bogotá D. C: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ciencias, Departamento de Física, 2010, 90p.

²⁵ CASTRO LORA, Humberto Gabriel. Estudio de las propiedades ópticas y estructurales en películas delgadas de ZnSe. Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de: Magister en

atravesarlo, y se define como la razón de la velocidad de la luz en el vacío c y su velocidad en el medio v . La ecuación que representa el índice de refracción es:

$$n = \frac{c}{v} \quad (1)$$

3.2.2 Coeficiente de absorción (α). El coeficiente de absorción α , es proporcional a la probabilidad de absorción de un fotón por el material²⁶. La magnitud del coeficiente de absorción se expresa en cm^{-1} . Cuando la luz se propaga dentro de un medio absorbente, la intensidad de la luz I disminuye de forma exponencial, en base a la ecuación:

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha x} \quad (2)$$

Donde: I_0 es la intensidad del rayo reflejado, I es la intensidad del rayo incidente, x es el espesor del material y α es el coeficiente de absorción.

De igual importancia, se encuentra otra magnitud utilizada en el estudio de medios dieléctricos, denominada coeficiente de extinción, el cual se relaciona con el coeficiente de absorción así:

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (3)$$

Donde: k es el coeficiente de extinción, λ es la longitud de onda y α es el coeficiente de absorción.

Ciencias Físicas. Bogotá D. C: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ciencias Básicas, Departamento de Física, 2013, 107p.

²⁶ CARTAGENA SOTO, Luis Alberto; FLORES GAONA, Carlos Eduardo; GÁLVEZ SÁNCHEZ, Cosme Xavier y ROMERO, Bryan Armando. Propiedades ópticas de los semiconductores. [En línea]. Universidad Nacional de Loja, Loja, Ecuador. (Recuperado en 25 marzo 2019). Disponible en internet:

https://www.academia.edu/36553642/PROPIEDADES_ÓPTICAS_DE_LOS_SEMICONDUCTORES

3.2.3 Brecha de energía prohibida (Gap). La brecha de energía prohibida, Band gap o gap, es la diferencia de energía entre la banda de conducción y la banda de valencia. Es decir, el gap es la energía que requiere un electrón para ser excitado de la banda de valencia a la banda de conducción²⁷. En los materiales semiconductores el gap es inferior a 5 electronvoltio²⁸ [eV].

3.3 CÁLCULO DE LAS CONSTANTES ÓPTICAS Y ESPESOR APROXIMADO

R. Swanepoel en el año 1983 realizó un método para determinar las constantes ópticas en películas delgadas homogéneas²⁹. Un año más tarde, con el fin de realizar los análisis para películas delgadas semiconductoras no homogéneas³⁰ desarrolló uno nuevo. Ambos permiten determinar las propiedades ópticas de las películas a partir de datos experimentales del espectro de transmitancia.

Swanepoel dividió el espectro de transmitancia en cuatro regiones, la región transparente, la de absorción débil, absorción media y la región de fuerte absorción, tal y como se ve en la figura 2.

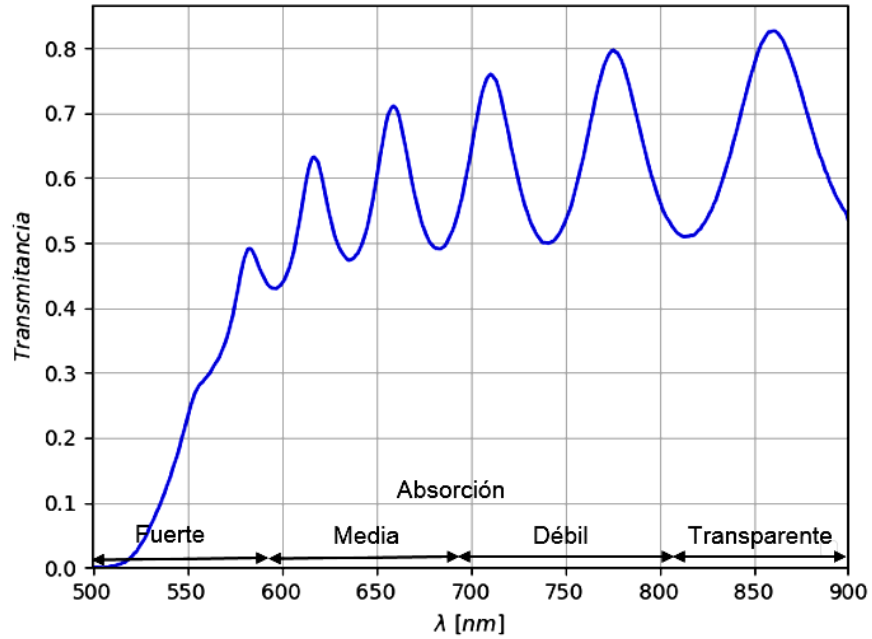
²⁷ TRAVIZANO, Matías; ROMANO, Sebastián y KAMIENKOWSKI, Juan. Determinación de la banda prohibida (band gap) en Si. [En línea]. Laboratorio 5, Departamento de física, UBA. 2002. (Recuperado en 25 Marzo 2019). Disponible en internet: http://users.df.uba.ar/sgil/labo5_uba/inform/info/pautadas/band_gap_sil_2k2a.pdf

²⁸ FARFÁN ARDILA, Paola Rocío. Determinación teórica de la banda prohibida band gap del Bi(OH)CrO₄ en su estructura mínima, celda unitaria y sistema periódico. Bogotá: Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales. Facultad de Ciencias, Programa de Química, 2015, 30p.

²⁹ Swanepoel, R. Home Search and others. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon. Printed in Great Britain. Department of Physics, Rand Afrikaans University, Johannesburg, South Africa, J. Phys. E: Sci. Instrum. Vol. 16, 1983, p. 1214-1222.

³⁰ Swanepoel, R. Home Search and others. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films. Printed in Great Britain. Department of Physics, Rand Afrikaans University, Johannesburg, South Africa, J. Phys. E: Sci. Instrum. Vol. 17, 1984, p. 896-903.

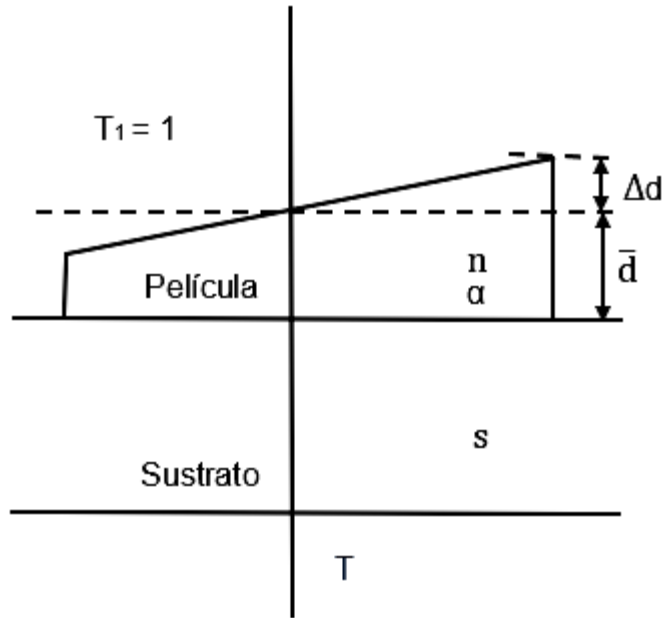
Figura 2. Regiones del espectro de transmitancia.



Las películas delgadas semiconductoras pueden presentar variaciones en su composición y estructura bajo ciertas condiciones de preparación. La no homogeneidad en las películas tiene gran influencia en el espectro de transmisión óptica.

En la figura 3, se muestra un sistema de película delgada no homogénea con variación de grosor, la cual según Swanepoel puede presentar una variación lineal en el espesor o algunas irregularidades en forma de rugosidad superficial.

Figura 3. Sistema de una película delgada absorbente con una variación de grosor en un sustrato transparente finito y grueso.



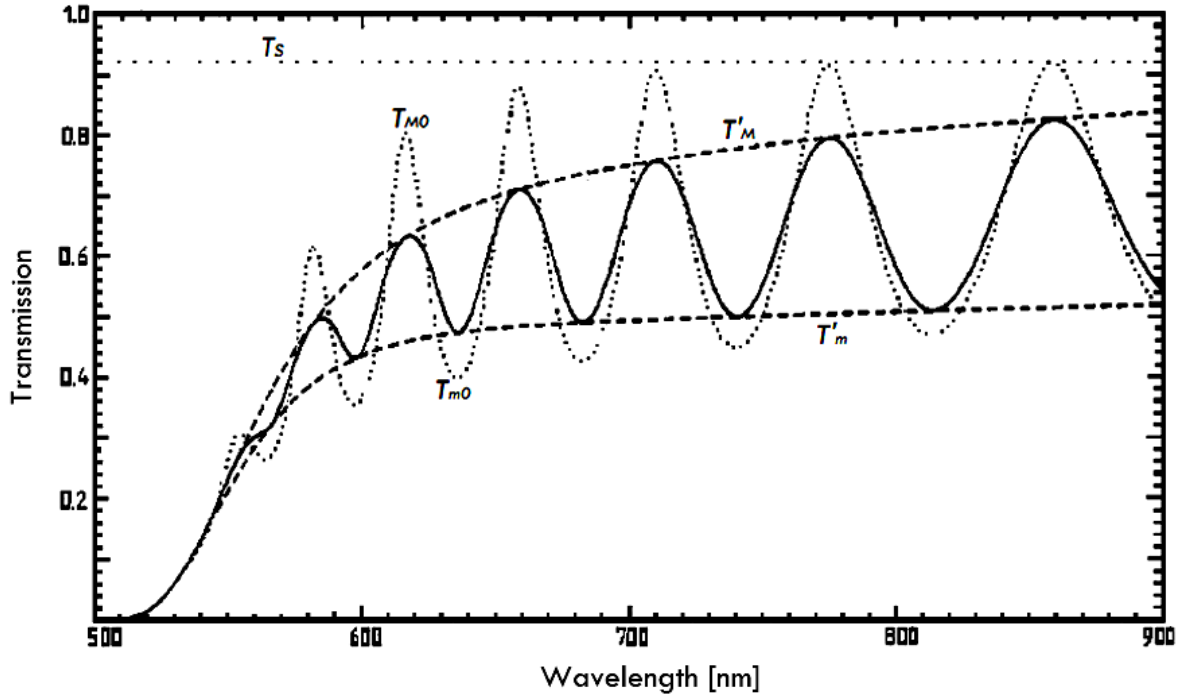
Fuente: Modificado de: Swanepoel, R. System of an absorbing thin film with a variation in thickness on a thick finite transparent substrate. [Figura]. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films. South Africa: Department of Physics, Rand Afrikaans University. 1984. p. 897.

Como se observa en la figura 3, las películas con índice de refracción n son depositadas sobre un sustrato transparente, el cual presenta un índice de refracción s y un espesor mayor al de la película. El grosor de la película delgada se expresa como:

$$d = \bar{d} \pm \Delta d \quad (4)$$

Donde: d es el espesor de la película; \bar{d} es el espesor promedio; Δd es la variación real en el espesor \bar{d} .

Figura 4. Espectro de transmitancia simulada para una película absorbente con espesor uniforme (curva de puntos) en comparación con el de una película no homogénea (curva completa).



Fuente: Swanepoel, R. Simulated transmission for an absorbing film with uniform thickness (dotted-curve spectrum) compared to that of a film with a thickness variation $\Delta d = 30 \text{ nm}$ (full-curve spectrum). [Figura]. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films. South Africa: Department of Physics, Rand Afrikaans University. 1984. p. 900.

Es posible transformar el espectro de una película no homogénea a homogénea manteniendo el espesor \bar{d} ; es decir, el \bar{d} de la película no homogénea es equivalente al d de la película homogénea.

Swanepoel plantea las ecuaciones (5) y (6); las cuales relacionan las envolventes T'_M y T'_m de una película no homogénea (curva sólida figura 4) con las envolventes T_{M0} y T_{m0} de una película homogénea (curva punteada figura 4), logrando así, un acople entre ellas.

Para los máximos:

$$T'_M = \frac{(T_{M0}T_{m0})^{\frac{1}{2}}}{\theta} \tan^{-1} \left[\left(\frac{T_{M0}}{T_{m0}} \right)^{\frac{1}{2}} \tan(\theta) \right] \quad (5)$$

Para los mínimos:

$$T'_m = \frac{(T_{M0}T_{m0})^{\frac{1}{2}}}{\theta} \tan^{-1} \left[\left(\frac{T_{m0}}{T_{M0}} \right)^{\frac{1}{2}} \tan(\theta) \right] \quad (6)$$

Los valores de los puntos T'_M y T'_m referentes a los máximos y mínimos respectivamente, son obtenidos a partir de las medidas del espectro de transmitancia experimental de la película no homogénea. Con estos puntos se obtiene una curva envolvente tanto para los mínimos como para los máximos.

A partir de las ecuaciones (5) y (6) se calcula T_{m0} y θ en la región transparente. En esta región T_{M0} es igual a T_s (7) siendo s el índice de refracción del sustrato. Los valores de θ son renombrados como θ_1 .

$$T_s = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (7)$$

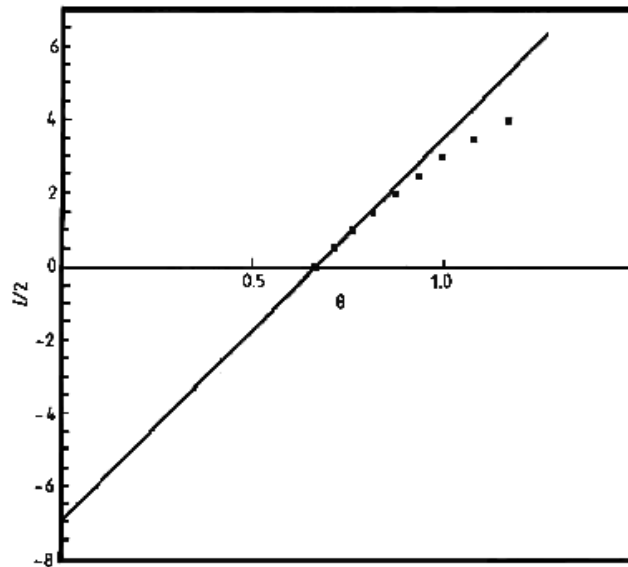
Con el fin de extrapolar la información obtenida de la región transparente a la región de absorción, se traza $\frac{l}{2}$ en función de θ_1 cómo se observa en la figura 5. Luego se encuentra el valor de la pendiente y el intercepto para escribir la ecuación de la recta manteniendo la forma de la ecuación (8). Para garantizar que se trabaja en la región transparente se descartan los puntos que presentan desviación ya que indican el inicio de la región de absorción.

$$\frac{l}{2} = \left(\frac{\bar{a}}{\pi \Delta d} \right) \theta - m_1, \quad l = 0,1,2,3... \quad (8)$$

Donde: $\frac{l}{2}$ es la variable dependiente; θ es la variable independiente; $\frac{\bar{d}}{\pi\Delta d}$ es equivalente al valor de la pendiente; m_1 es el intercepto con el eje vertical.

Asimismo, el valor de θ para cada par de puntos máximo y mínimo se calcula a partir de la ecuación (8). Luego, se calculan los valores de T_{M0} y T_{m0} con base en las ecuaciones (5) y (6), usando los valores de T'_M y T'_m y θ calculados anteriormente.

Figura 5. Gráfica de $l/2$ vs θ_1 para determinar θ en la región de absorción.



Fuente: Swanepoel, R. Plot of $l/2$ against θ_1 to determine θ in the región of absorption. [Figura]. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films. South Africa: Department of Physics, Rand Afrikaans University. 1984. p. 901.

Una vez realizada la transformación de la película, es posible calcular el \bar{d} , el índice de refracción ($n(\lambda)$) y el coeficiente de absorción ($\alpha(\lambda)$).

La ecuación que permite determinar la transmitancia T en función de la longitud de onda λ y de los parámetros α , n , s de una película delgada homogénea es:

$$T = \frac{Ax}{B-Cx+Dx^2} \quad (9)$$

Donde:

$$A = 16s(n^2 + k^2) \quad (9a)$$

$$B = [(n + 1)^2 + k^2][(n + 1)(n + s^2) + k^2] \quad (9b)$$

$$C = [(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2) - 2k^2(s^2 + 1)]2\cos(\varphi) - k[2(n^2 - s^2 + k^2) + (n^2 + 1)(n^2 - 1 + k^2)]2\sin(\varphi) \quad (9c)$$

$$D = [(n - 1)^2 + k^2][(n - 1)(n - s^2) + k^2] \quad (9d)$$

Donde, las ecuaciones de 9a a 9d dependen de las ecuaciones (3), (10) y (11)

$$\varphi = \frac{4\pi nd}{\lambda} \quad (10)$$

$$x = \exp(-\alpha d) \quad (11)$$

A partir de los valores T_{M0} y T_{m0} se calcula el índice de refracción n , mediante la ecuación:

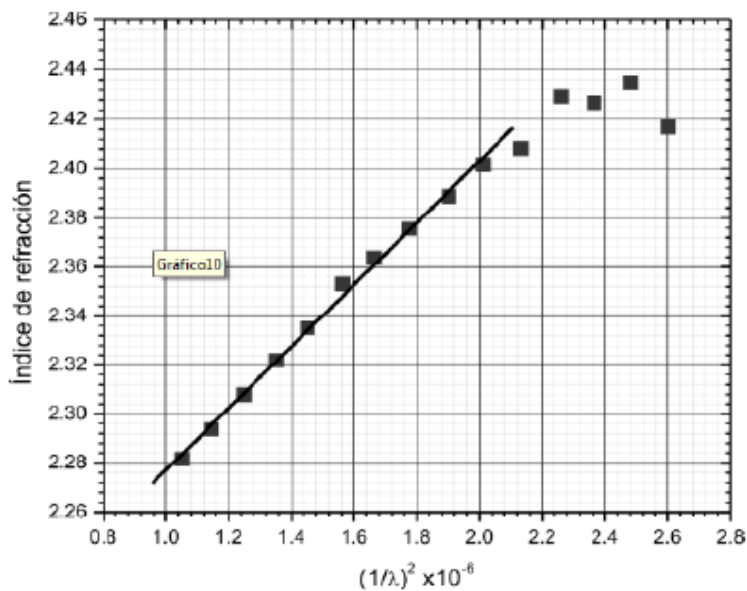
$$n = \left[N + (N^2 - s^2)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (12)$$

Donde:

$$N = 2s \frac{T_{M0} - T_{m0}}{T_{M0}T_{m0}} + \frac{s^2 + 1}{2}$$

La ecuación (12) se usa para calcular el índice de refracción únicamente en los puntos del espectro donde existen máximos y mínimos.

Figura 6. Curva de n vs $(1/\lambda^2)$ usada para determinar los parámetros a y b de la ecuación de Cauchy.



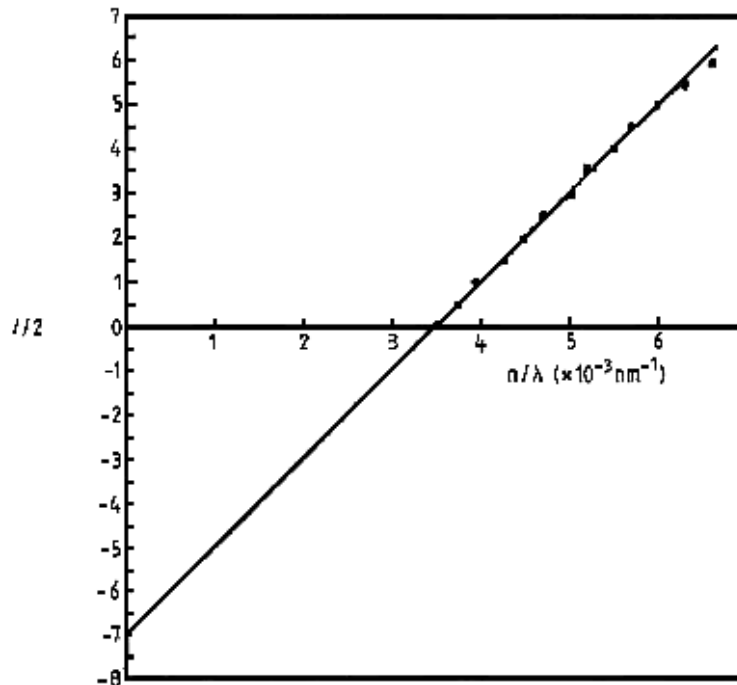
Fuente: CLAVIJO PENAGOS, Josué Itsman. Curva de n vs $(1/\lambda)^2$ usada para determinar los parámetros a y b de la ecuación de Cauchy. [Figura]. Síntesis y caracterización de las películas delgadas de $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ e In_2Se_3 para ser usadas en la fabricación de celdas solares tipo tándem. Bogotá: Universidad Nacional de Colombia. 2011. p. 33.

En la figura 6 se observa el procedimiento gráfico que permite obtener el índice de refracción en todo el rango de las longitudes de onda del espectro de transmitancia. Inicialmente, se grafican los valores de n calculados mediante la ecuación (12) en función de $(\frac{1}{\lambda^2})$, donde λ hace referencia a la posición en la que se encuentra ubicado

un máximo y mínimo. Después se encuentra la recta que mejor se adapte a estos puntos y se determina su ecuación manteniendo la forma de la ecuación de Cauchy, ecuación (13); esto con el fin de obtener los valores de las constantes a y b .

$$n = \frac{a}{\lambda^2} + b \quad (13)$$

Figura 7. Gráfica de $l/2$ contra n/λ para determinar el espesor.



Fuente: Swanepoel, R. Plot of $l/2$ versus n/λ to determine the order number and thickness. [Figura]. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon. South Africa: Department of Physics, Rand Afrikaans University. 1983. p. 1218.

Para el cálculo del espesor aproximado de la película homogénea, se grafica $\frac{l}{2}$ en función de $\frac{n}{\lambda}$, donde se obtiene una línea recta cuya ecuación es de la forma de la

ecuación (14) con pendiente $2d$ y corte en el eje vertical de $-m_1$. Finalmente, se despeja d .

$$\frac{l}{2} = 2d \left(\frac{n}{\lambda} \right) - m_1, \quad l = 0,1,2,3... \quad (14)$$

El error relativo reportado por Swanepoel para el índice de refracción usando la ecuación (12) y para el espesor aproximado d usando la ecuación (14) es del 1%.

El coeficiente de absorción se calcula resolviendo la siguiente ecuación de forma iterativa³¹:

$$e = [T_{exp}(\lambda) - T_{cal}(k)] \leq Tolerancia \quad (15)$$

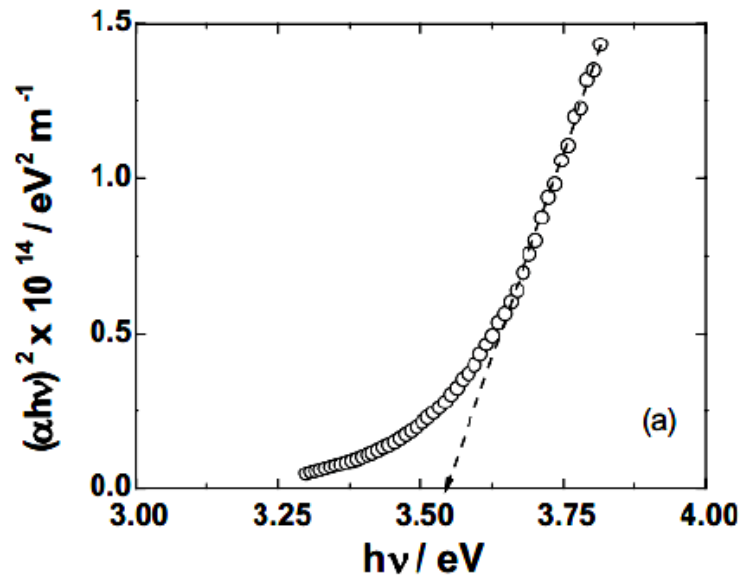
Donde $T_{exp}(\lambda)$ es obtenido a partir de los datos de transmitancia experimental del espectro, $T_{cal}(k)$ es obtenido a través de la ecuación (9). La tolerancia es un parámetro variable, el cual se define según el caso.

Por otra parte, los materiales semiconductores utilizados en películas delgadas presentan un gap directo³². El valor del gap es determinado gráficamente, como se observa en la figura 8. Donde h es la constante de Planck, α es el coeficiente de absorción, E_g es el gap y ν es la frecuencia de la radiación.

³¹ VALLEJO LOZADA, William Andrés. Desarrollo de materiales fotovoltaicos usados como ventana óptica en celdas solares. Tesis de investigación presentada como requisito parcial para optar el título de: Doctor en Ciencias – Química. Bogotá D. C: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ciencias, Departamento de Química, 2011, 75p.

³² YU, Peter and CARDONA, Manuel. Fundamentals of Semiconductors, Physics and Materials Properties. Fourth Edition. Boston University: Springer, 2010. 775p. ISBN 978-3-642-00709-5

Figura 8. Curva de $(\alpha h\nu)^2$ vs $h\nu$ usada para determinar el gap óptico.



Fuente: R, Henriquez, *et al.* Direct allowed band gap energy determination through $(\alpha h\nu)^2$ vs $h\nu$ plot. [Figura]. Electrodeposition of In_2O_3 thin films from a dimethylsulfoxide based electrolytic solution. *Phys, Status Solidi*: WILEY-VCH. 2013. p. 303.

3.4 LENGUAJE DE PROGRAMACIÓN PYTHON

Python ocupa el tercer lugar en la lista de los lenguajes de programación más usados en junio de 2019, según el informe realizado por la empresa TIOBE³³ Software, el cual es uno de los más conocidos.

Python³⁴ es un lenguaje interpretado de alto nivel, que posee estructura sintáctica y semántica legible. No requiere de un compilador para ser ejecutado sino de un intérprete, el cual ejecuta el programa directamente, ofreciendo de esta manera mayor rapidez de desarrollo en el código, con una menor velocidad de ejecución.

³³ TIOBE Index | TIOBE – The Software Quality Company: Índice TIOBE para septiembre de 2019 [En línea]. TIOBE.com. [Consultado: 27 de junio de 2019]. Disponible en Internet: <https://www.tiobe.com/tiobe-index/>

³⁴ Welcome to Python: Python [En línea]. PYTHON.org. [Consultado: 28 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: <https://www.python.org/>

Además, Python cuenta con algunas características de lenguaje como lo son: propósito general, multiplataforma, interactivo, orientado a objetos, funciones y librerías³⁵.

Adicionalmente, es el software más usado en computación científica, tanto para entornos académicos como en la industria. Tiene una sintaxis sencilla y cuenta con variedad de módulos que permite a los usuarios flexibilidad y facilidad para programar. El intérprete de Python está disponible para muchos sistemas operativos entre los que se encuentra Linux, MacOS X, Unix, Windows y Android.

Un módulo puede estar definido por funciones, clases y variables y también puede incluir código ejecutable dentro de un archivo `.py`³⁶. Algunos de estos son:

*Tkinter*³⁷, ideal para la construcción de interfaces gráficas de usuario, cuenta con una amplia gama de widgets esenciales para llevar a cabo las tareas más comunes como lo son botones, etiquetas, texto, etc.

*Matplotlib.pyplot*³⁸ es una colección de funciones que contiene diferentes comandos que hacen que matplotlib funcione igual que MATLAB, es ideal para crear gráficas en 2D, así como también crear un área de trazado de la figura.

³⁵ ALVAREZ, Miguel Ángel. Qué es Python [En línea]. DESARROLLOWEB.com. (19 de Noviembre de 2003). [Consultado: 28 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: <https://desarrolloweb.com/articulos/1325.php>

³⁶ 8.1. Módulos Python – Materiales del entrenamiento de programación en Python – Nivel básico: 8.1. Módulos Python [En línea]. ENTRENAMIENTO-PYTHON-BASICO.READTHEDOCS.io. [Consultado: 29 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: <https://entrenamiento-python-basico.readthedocs.io/es/latest/leccion8/modulos.html>

³⁷ Python Tkinter Introducción (Interfaz gráfica).pdf: Python Tkinter Introducción (Interfaz gráfica) [En línea]. PEREMANELV.com. [Consultado: 29 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: http://www.peremanelv.com/Pagina_Web_de_Pere_Manel/Tutoriales_files/Python%20Tkinter%20Introducci%C2%A2n%20%28Interface%20grafica%29.pdf

³⁸ PADILLA A, Jhon Jairo. Gráficas con la librería Matplotlib para Python [En línea]. JPADILLA.DOCENTES.UPBBGA.edu.co. [Consultado: 29 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: http://jpadilla.docentes.upbbga.edu.co/Logica_y_Algoritmia/Graficas%20con%20la%20libreria%20Matplotlib%20para%20Python.pdf

*Scipy*³⁹ es un paquete que está conformando por varias cajas de herramientas dedicadas a la computación científica, además está conformando por diferentes submódulos aplicables a la interpolación, integración, optimización, procesamiento de imágenes, estadística, funciones especiales y más.

*Numpy*⁴⁰ es uno de los paquetes principales que tiene Python debido a que contiene toda la capacidad matemática incorporando de esta forma matrices de N-dimensiones, las operaciones matemáticas básicas y las operaciones elemento por elemento.

Finalmente, algunas de las empresas que utilizan este lenguaje de programación son Google, YouTube o Facebook. Es así como Python va cada vez avanzando y captando territorio lo que lo ha llevado a convertirse en uno de los lenguajes más pedidos y esenciales hasta el momento⁴¹ .

³⁹ CHAUVE, Adrien; ESPAZE, Andre; GOUILLART, Emmanuelle; VAROQUAUX, Gael y GOMMERS, Ralf. 1.5. Scipy: computación científica de alto nivel [En línea]. CLAUDIOVZ.GITHUB.io. [Consultado: 29 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: <https://claudiovz.github.io/scipy-lecture-notes-ES/intro/scipy.html>

⁴⁰ BRESSERT, Eli. Scipy and Numpy. First edition. Printed in the United States of America: O'Reilly, 2012. 57p. ISBN: 978-1-449-30546-8

⁴¹ 7 razones para programar en Python – Bejob: 7 razones para programar en Python [En línea]. BeJob. 18 de Septiembre 2016. [Consultado: 1 de Julio de 2019]. Disponible en Internet: <https://www.bejob.com/7-razones-para-programar-en-python/>

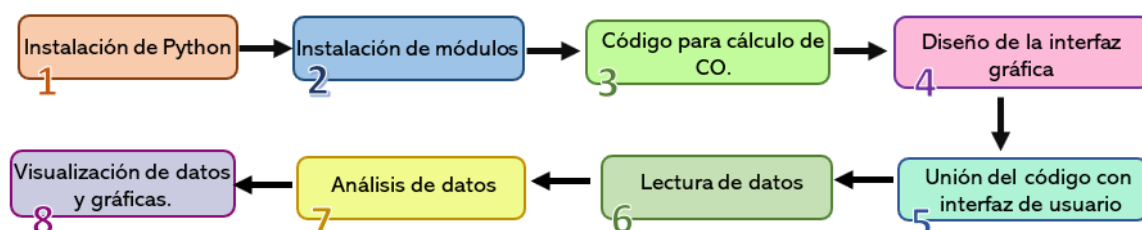
4. PROCEDIMIENTO

En este capítulo se describen los pasos que se realizaron para desarrollar la herramienta de software COPS II, la cual fue desarrollada en el lenguaje de programación de Python, versión 3.6. Este software permite calcular las constantes ópticas en películas delgadas semiconductoras homogéneas y no homogéneas, así como una aproximación de su espesor, a partir del espectro de transmitancia experimental. Cuenta con una interfaz de usuario sencilla que es de fácil manejo, la cual puede ser usada tanto en español como en inglés.

4.1 PROGRAMACIÓN EN PYTHON

Para el desarrollo del software COPS II, se realizó una investigación de los módulos que hacen parte de Python. Dichos módulos permiten organizar de mejor manera el código, haciéndolo más fácil de entender y usar. Todos ellos cumplen una determinada función dentro del programa, ayudando al buen funcionamiento del software.

Figura 9. Esquema usado para la construcción del software COPS II.

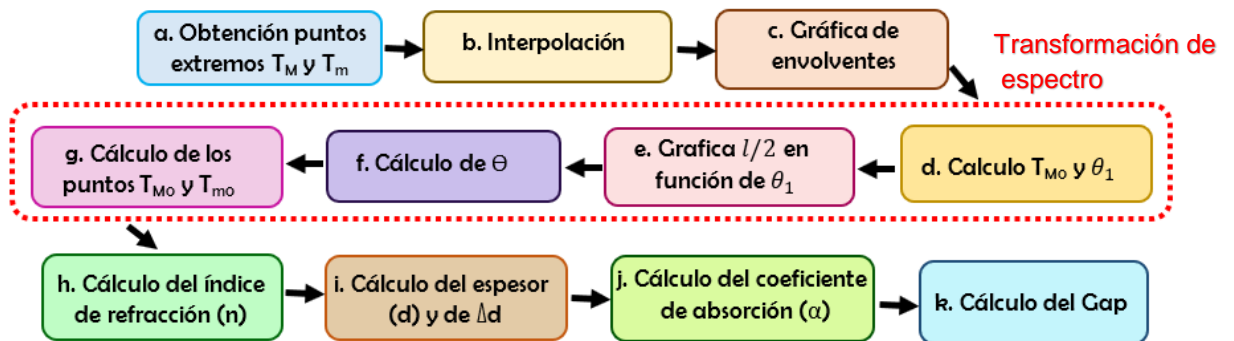


En la figura 9 se encuentra un esquema paso a paso, en el cual se evidencia el proceso que se siguió para llevar a cabo la construcción del software. A continuación, se realiza una descripción de cada uno de ellos.

1. Instalación de Python: Instalación de Python con todos sus ajustes predeterminados.

2. Instalación de módulos: Se instalaron los módulos necesarios para el desarrollo del código fuente y la interfaz gráfica.
3. Código para cálculo de CO: Se implementaron las ecuaciones presentadas en la sección 3.3. En la figura 10, se resumen los pasos que se siguieron para la creación del código, en el caso de películas homogéneas no se realiza la transformación del espectro ni el cálculo de Δd .

Figura 10. Pasos para calcular constantes ópticas.

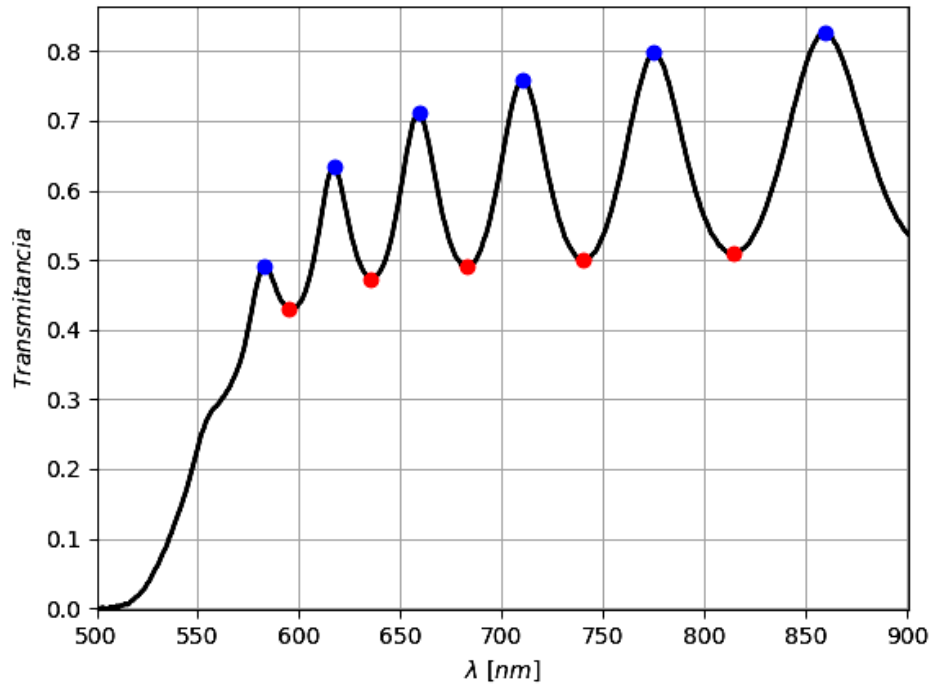


A continuación, se explican cada uno de estos pasos:

- a) A partir del espectro de transmitancia de la película se obtienen los valores de los puntos extremos⁴². En la figura 11, se observa el espectro de transmitancia de una película, en el cual se encuentran resaltados los puntos máximos T_M y mínimos T_m , con color azul y rojo respectivamente.

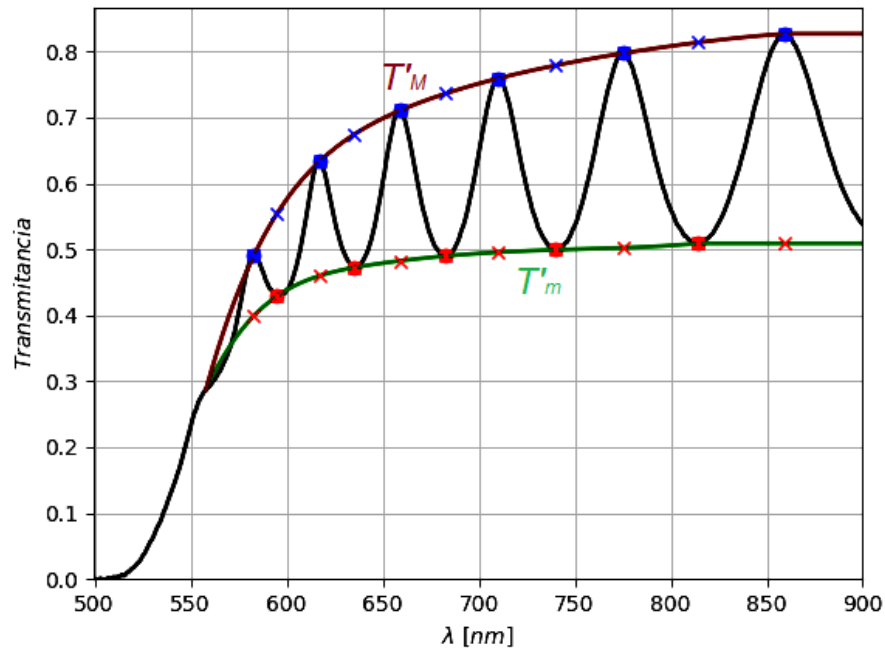
⁴² CARRILLO E, Julio C. Aplicaciones de las derivadas: a extremos de funciones [En línea]. 12p. [Consultado: 3 de Julio de 2019]. Disponible en Internet: <http://matematicas.uis.edu.co/jccarril/Cursos/C1/slides-ln-c1/C1-LN-Cap4-S2.pdf>

Figura 11. Puntos extremos del espectro de transmitancia.



- b) Con los puntos extremos, mediante interpolación se calculan puntos complementarios, esto con el fin de obtener para cada punto máximo un mínimo correspondiente y viceversa. En el espectro de la figura 12, los puntos extremos se encuentran representados con círculos, mientras que, los puntos hallados mediante interpolación están denotados con x.
- c) Se realiza la gráfica de las envolventes tanto para los máximos T'_M como los mínimos T'_m , como se evidencia mediante las líneas café y verde de la figura 12.
- d) Se calculan los valores T_{m0} y θ_1 con base en las ecuaciones (5) y (6), usando los valores T'_M y T'_m calculados anteriormente y reemplazando T_{M0} por la ecuación (7).

Figura 12. Puntos extremos y envolventes del espectro de transmitancia.



- e) Se grafica $\frac{l}{2}$ en función de θ_1 , donde $l = 0,1,2,3 \dots$ puesto que l depende de la cantidad de puntos extremos del espectro; es decir, para cada l corresponde un máximo y un mínimo. Luego, se traza la mejor línea recta que se adapte a los pocos puntos de la región transparente, con base en la figura 5; donde θ_1 se representa como θ . Una vez trazada la recta, se determina el valor de la pendiente y el intercepto con el eje vertical; esto con el fin reemplazar estos valores en la ecuación (8) para obtener la ecuación de la recta.
- f) Una vez obtenida la ecuación de la recta, de la ecuación (8) se despeja la variable independiente θ .
- g) Se determinan los valores de los puntos T_{M0} y T_{m0} utilizando las ecuaciones (5) y (6), reemplazando los valores de T'_M , T'_m y θ obtenidos anteriormente.
- h) Se calcula el índice de refracción reemplazando los valores T_{M0} y T_{m0} en la ecuación (12) y se realiza el procedimiento representado en la figura 6.

- i) Se grafica $\frac{l}{2}$ en función de $\frac{n}{\lambda}$ reemplazando los valores de n obtenidos de la ecuación (12). Se traza una recta que se adapte a los puntos y se determina su ecuación manteniendo la forma de la ecuación (14). Para obtener el valor del espesor de la película, se iguala el valor de la pendiente de la recta a $2d$ y se despeja d . Si la película es no homogénea, es necesario calcular la variación real en el espesor Δd , por esto, se sustituye el valor de d o bien \bar{d} en el término $\frac{\bar{d}}{\pi\Delta d}$ y se iguala al valor de la pendiente de la ecuación (8). Esto con el fin de despejar la variable Δd y obtener su respectivo valor.
- j) Una vez obtenido el índice de refracción y el espesor de la película, se realiza el cálculo del coeficiente de absorción usando la ecuación (15). Sin embargo, esta ecuación no se puede resolver de forma analítica, por esto, es necesario acudir a un método numérico. Para esto, se utilizó el método descrito a continuación:

Paso 1: Se define un valor de k en un rango $[a, b]$.

Paso 2: Se halla la diferencia entre los espectros, si no se encuentra dentro de la tolerancia permitida (10^{-10}), avanza al paso 3, de lo contrario, finaliza la rutina.

Paso 3: Si la diferencia entre los espectros es mayor a 0, se ejecuta el paso 3a. de no ser así, se ejecuta el paso el 3b.

Paso 3a: Se asigna el valor de k al límite superior y se calcula un nuevo valor de k , mediante la ecuación (16).

Paso 3b: Se asigna el valor de k al límite inferior y se calcula un nuevo valor de k , empleando la ecuación (16).

$$k = \frac{a+b}{2} \quad (16)$$

Donde, a es el límite inferior del rango y b el superior. De los pasos 3a y 3b se retorna al paso 2 para realizar nuevo cálculo.

Continuando con los pasos de la figura 10:

- k) Para el cálculo del gap, se gráfica $(\alpha h\nu)^2$ en función de $h\nu$, se traza una línea recta en la parte lineal de la curva y se toma el valor del corte con el eje horizontal, como se observa en la figura 8.
4. Diseño de la interfaz gráfica: Se definieron las dimensiones de la ventana y se ubicaron botones, etiquetas, cuadros de texto, radiobutton, combobox y cuadros de dialogo.
5. Unión del código con interfaz de usuario: Se enlazó la interfaz con el código del numeral 3. Para esto, se programaron los botones, incorporando en cada uno de ellos parte del algoritmo.
6. Lectura de datos: Se usó una función para abrir y leer archivos, así como un método para almacenar valores.
7. Análisis de datos: Se estableció que el código solamente se ejecuta si los parámetros son adecuados, de lo contrario se pedirá al usuario ingresarlos nuevamente.
8. Visualización de datos y gráficas: Se definieron dos formas para mostrar los resultados, los valores por medio de etiquetas y las gráficas en ventanas independientes. Adicionalmente, se usó una función para exportar los datos de las gráficas a un archivo de texto.

5. RESULTADOS

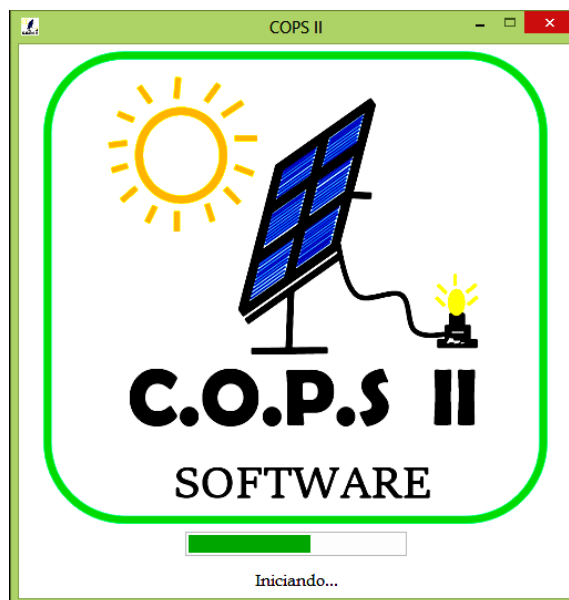
Una vez diseñada la herramienta software se realizó una guía básica con el fin de instruir al usuario en el uso y funcionamiento de esta. Para verificar su correcto funcionamiento se hicieron pruebas ingresando diferentes espectros de transmitancia de películas homogéneas y no homogéneas.

5.1 GUÍA PARA EL USO DEL SOFTWARE COPS II

En esta sección se presenta la guía básica de usuario, la cual cuenta con imágenes de la interfaz gráfica, las cuales permiten conocer su entorno incluso antes de que el usuario acceda al programa. Asimismo, se detallan los pasos a seguir por parte del usuario para llevar a cabo el cálculo de las CO en películas homogéneas y no homogéneas de forma correcta.

5.1.1 Ventana inicio. Al ejecutar el software COPS II se abrirá la ventana que se muestra en la figura 13, en la cual se observa el logo del software, esta permanecerá en pantalla mientras carga el programa.

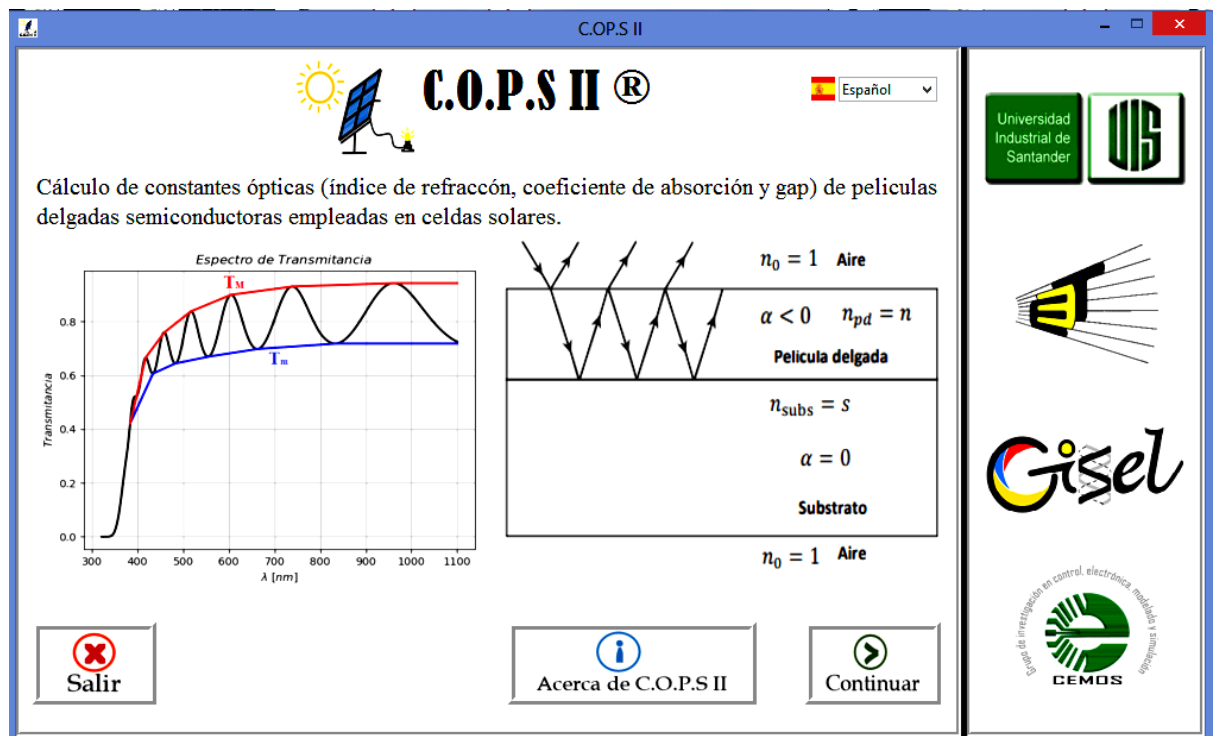
Figura 13. Ventana inicio COPS II.



5.1.2 Ventana principal. Posteriormente, se abre la ventana principal (figura 14) en donde se observa: nombre, descripción, logo de la universidad y de los grupos de investigación que aportaron en el desarrollo de la herramienta software.

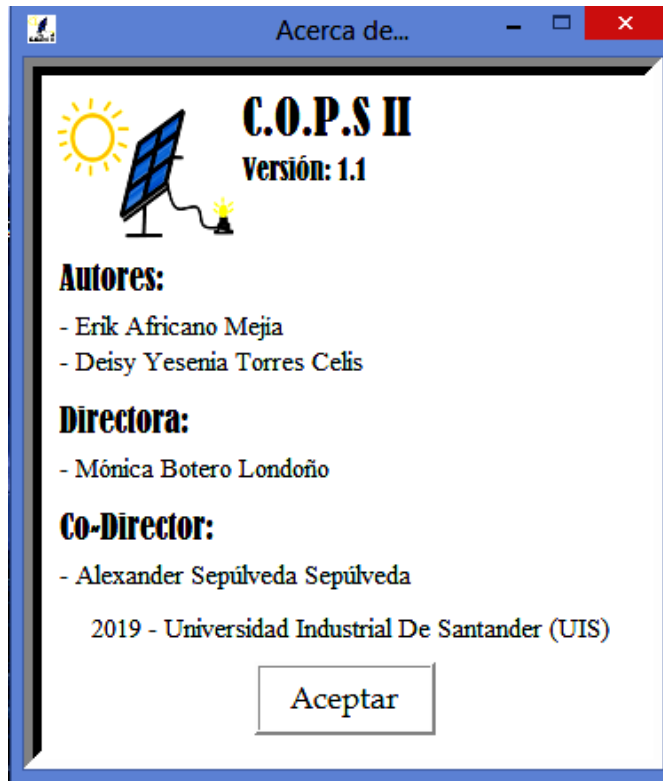
En la parte superior derecha, se observa una barra desplegable, esta permite cambiar el idioma, el cual puede ser inglés o español. Además, se encuentran los botones Salir, Continuar y Acerca de, los cuales corresponden a salir del programa, continuar con el cálculo de las constantes ópticas y obtener información acerca del software respectivamente.

Figura 14. Ventana principal software COPS II.



5.1.3 Acerca de COPS II. En la figura 15, se observa la ventana Acerca de, la cual presenta información relacionada con las personas involucradas en el desarrollo del programa y la versión del software.

Figura 15. Información de software COPS II.

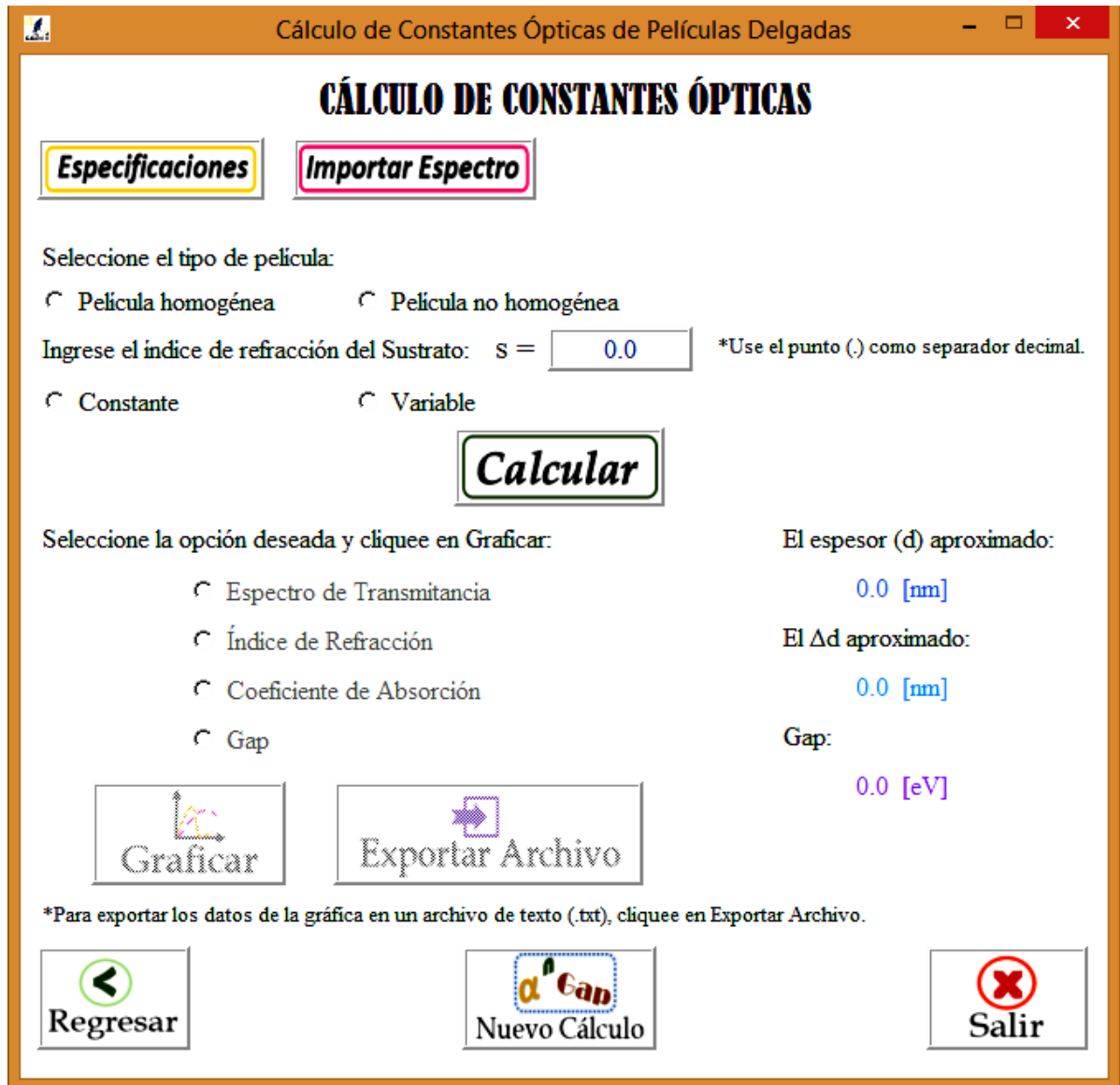


5.1.4 Ventana de cálculo. Independientemente del idioma seleccionado en la ventana principal, el funcionamiento de la herramienta es el mismo.

En la figura 16, se observa la ventana de cálculo, allí se requieren ciertos parámetros de entrada para que se puedan determinar las constantes ópticas. Estos son, el espectro de transmitancia de la película, el índice de refracción del sustrato y el tipo de película. En el caso de escoger película homogénea, es necesario seleccionar si el índice de refracción del sustrato es constante o variable, ya que depende del tipo de sustrato empleado en la fabricación de la película a diferencia de las películas no homogéneas, en donde se asume como constante.

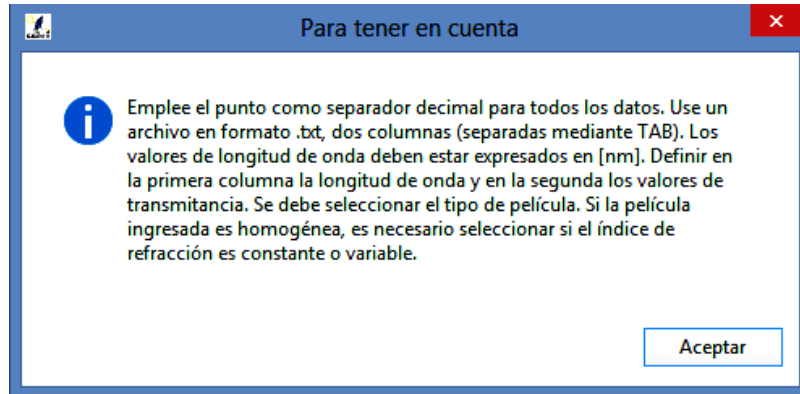
Las características que se deben tener en cuenta respecto a los parámetros de entrada se describen en la ventana Especificaciones (figura 17).

Figura 16. Ventana cálculo de constantes ópticas.



5.1.4.1 Especificaciones. Antes de ingresar los parámetros de entrada es necesario conocer los requerimientos que estos deben cumplir, los cuales se observan en la figura 17.

Figura 17. Especificaciones de los parámetros de entrada.



Inicialmente los botones Graficar y Exportar Archivo, así como la lista de opciones se encuentran deshabilitados hasta que se ingresen los parámetros de entrada correctamente y se seleccione el botón Calcular.

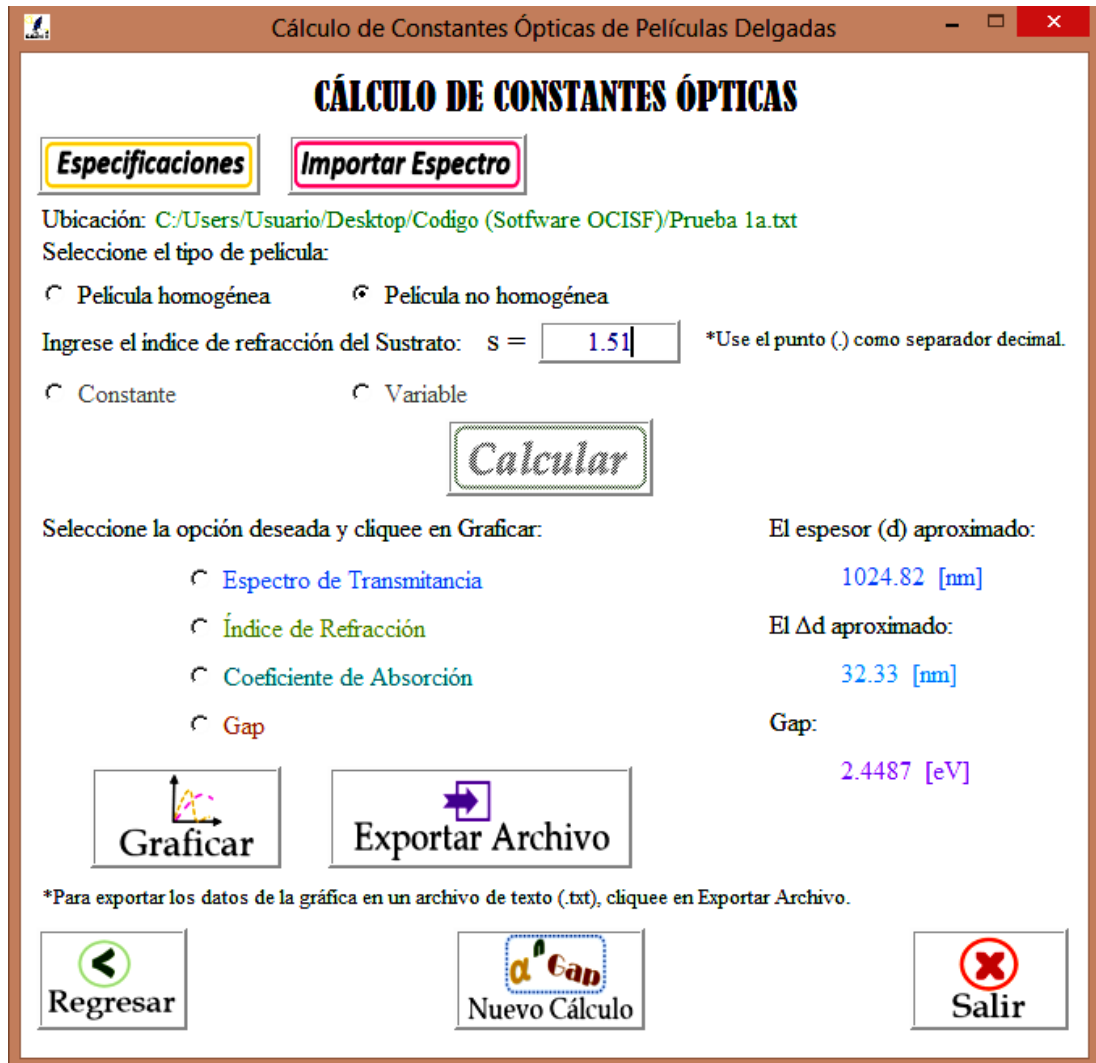
Para abrir el archivo de texto se selecciona la opción Importar Espectro, y allí es posible acceder al archivo, el cual puede estar en el ordenador o un dispositivo USB. Una vez cargado el archivo, digitado el valor del índice de refracción del sustrato y seleccionado el tipo de película se procede a dar clic en el botón Calcular, si los datos no son ingresados o son erróneos, el programa enviará un mensaje de información indicando que parámetro se debe ingresar o modificar.

Una vez seleccionado el botón calcular, este se deshabilitará y luego de unos segundos, según la capacidad de cómputo del equipo es posible observar los resultados tal y como se observa en la figura 18.

El programa permite realizar la gráfica del espectro de transmitancia ingresado, el índice de refracción, coeficiente de absorción y gap. Basta con seleccionar la opción deseada y dar clic en el botón Graficar. Estas gráficas se abren en ventanas independientes, por lo tanto, no se presentarán inconvenientes, tales como datos mezclados o gráficas superpuestas. Seleccionando el ícono de un disquete ubicado

en la parte inferior, es posible guardar la gráfica. Se presenta diferentes formatos para poder hacerlo, entre los cuales se encuentran png, jpg y pdf.

Figura 18. Ventana de cálculo con resultados de las constantes ópticas.

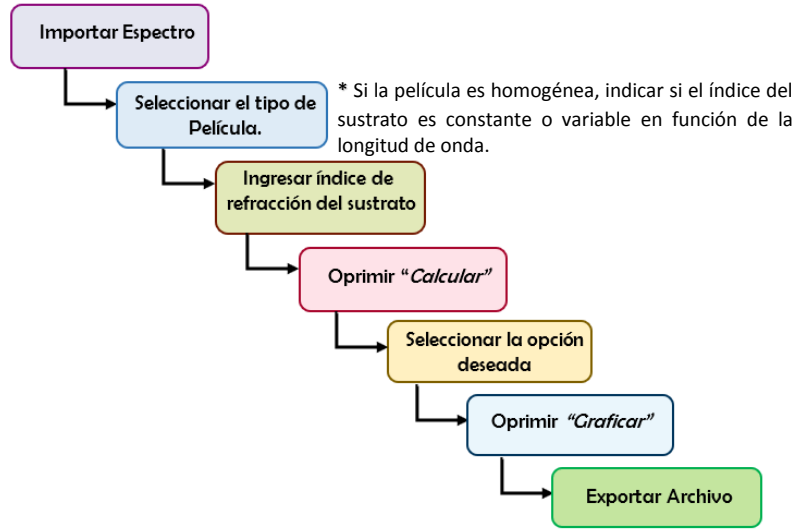


Los datos de las gráficas pueden ser exportados a un archivo de texto, seleccionando la opción deseada y seleccionando en el botón Exportar Archivo. Adicionalmente, el programa muestra en pantalla mediante etiquetas los valores calculados del espesor aproximado, Δd aproximado y gap.

Por otra parte, se tienen tres botones que permiten: realizar un nuevo cálculo, regresar a la ventana principal y salir del programa. Si se desea realizar un nuevo cálculo, se debe oprimir el botón Nuevo cálculo e ingresar nuevamente los parámetros requeridos.

En la figura 19 se resumen los pasos que se deben realizar dentro del software COPS II, para calcular las constantes ópticas en películas delgadas semiconductoras empleadas en celdas solares.

Figura 19. Pasos para realizar el cálculo de las constantes ópticas en COPS II.



5.1.4 Recomendaciones adicionales. Para la determinación de las constantes ópticas de películas delgadas semiconductoras por parte del software COPS II se requiere del ingreso del espectro de transmitancia experimental, por esto, se recomienda tener mucho cuidado a la hora de realizar la medida ya que, si existe ruido o no se da buen tratamiento a los datos, se puede generar errores en los valores estimados.

Los espectros ingresados al software deben tener una cantidad considerable de franjas de interferencia, como mínimo tres ya que si el espectro tiene pocas franjas se hacen imposible calcular sus envolventes y las constantes ópticas.

6. ANÁLISIS DE RESULTADOS

6.1 COMPARACIÓN ENTRE ESPECTRO EXPERIMENTAL Y TEÓRICO

En esta sección se realiza la comparación de los datos teóricos del espectro de transmitancia con los datos obtenidos mediante la ecuación (9). La cual, al resolverse de forma iterativa usando las constantes ópticas calculadas permite reconstruir el espectro de transmitancia.

En las figuras 20 y 21 se presenta el espectro típico de una película delgada de sulfuro de zinc. Se observa que al usar la ecuación propuesta por Swanepoel es posible obtener una buena aproximación del espectro de transmitancia teórico. Con el fin de observar mejor la diferencia entre los espectros se realiza el acercamiento que se muestra en la figura 21.

Figura 20. Comparación entre espectros Teórico y Experimental.

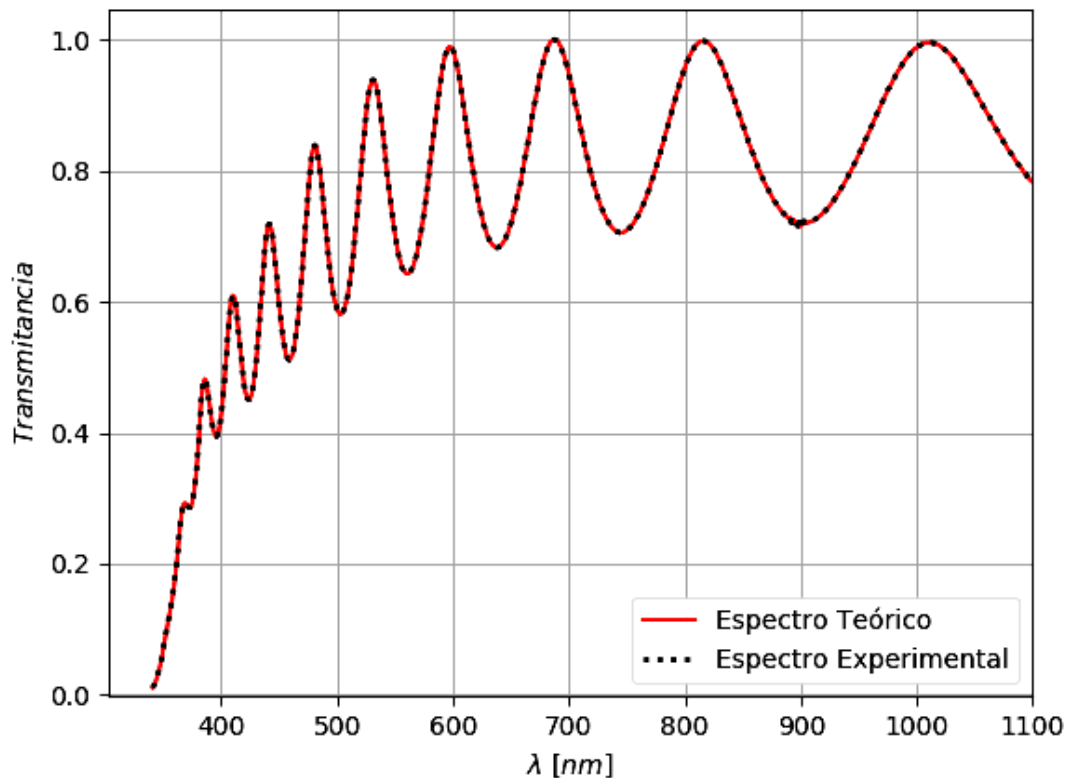
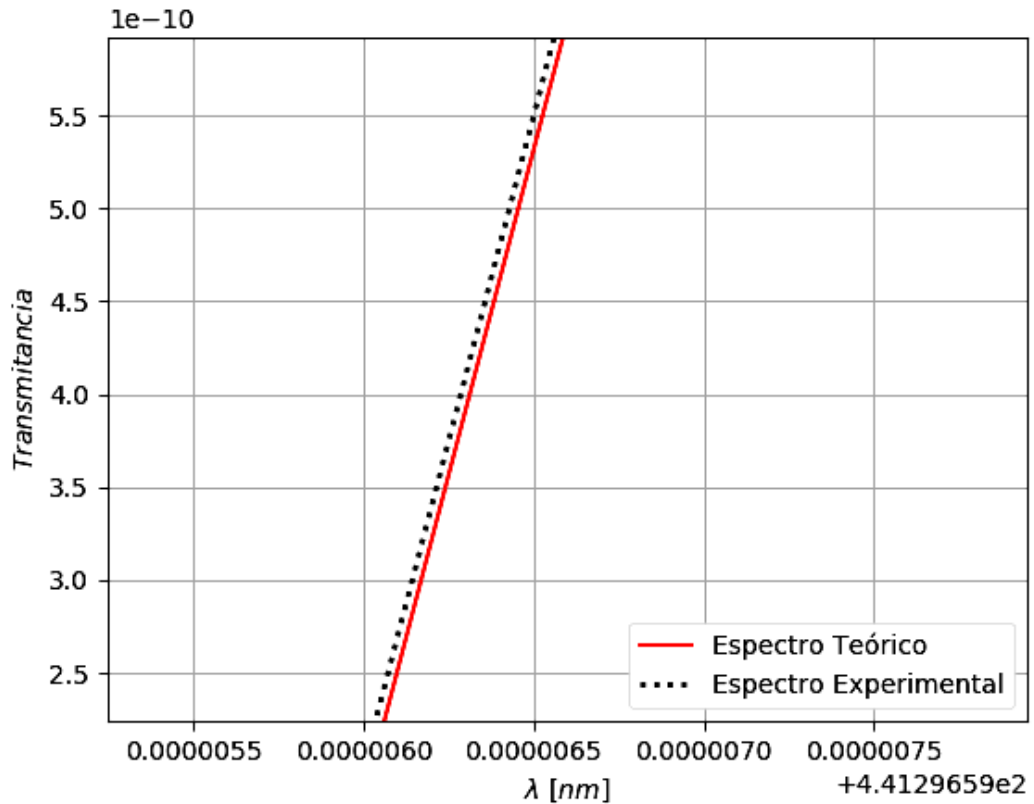


Figura 21. Acercamiento de la figura 20 para una mejor visualización.



Se calculó el error para T en cada longitud de onda con base en la ecuación (17). Para luego calcular el error promedio total.

$$\%_{ERROR} = \left| \frac{\text{Valor teórico} - \text{Valor experimental}}{\text{Valor teórico}} \right| * 100 \quad (17)$$

Para la película presentada se obtuvo un promedio de error de $9,18 \times 10^{-9} \%$, este es pequeño debido a la tolerancia (10^{-10}) manejada para reconstruir el espectro. Para las demás películas estudiadas se obtuvieron errores similares e incluso menores, las variaciones que se pueden presentar dependen de la calidad de película.

A partir de los espectros de transmitancia y empleando el procedimiento desarrollado por Swanepoel se determinaron las constantes ópticas (CO) en

películas delgadas semiconductoras homogéneas y no homogéneas, las cuales son usadas como capa absorbente en celdas solares.

6.1.1 Películas homogéneas. Los espectros de películas homogéneas y los archivos con información de las constantes ópticas fueron facilitados por la profesora Mónica Andrea Botero Londoño.

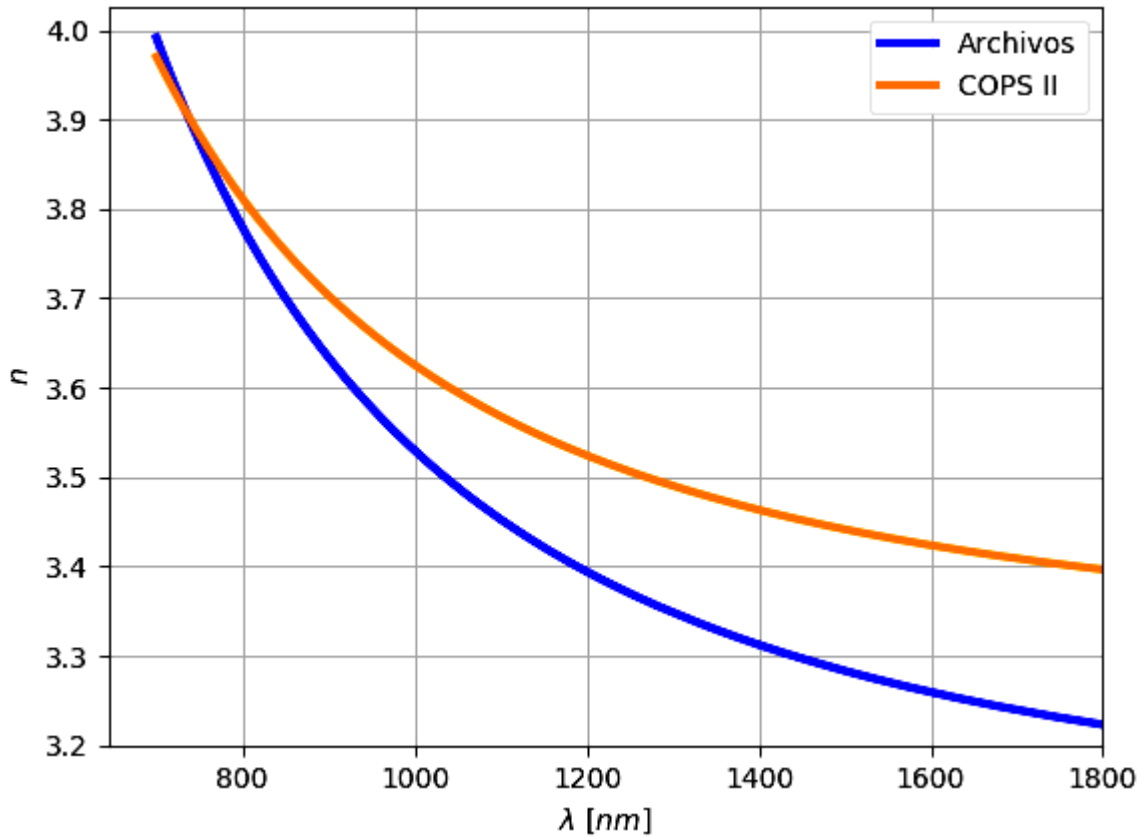
Al ingresar los espectros al software, se tomó el índice del sustrato (s) constante, con un valor de 1,51; el cual equivale al del vidrio soda lime usado en la fabricación de estas películas.

A continuación, se presentan los resultados obtenidos mediante la herramienta COPS II para una película típica de BiS mostrando las gráficas de índice de refracción, coeficiente de absorción y gap, así como el valor del espesor. Además, se realizó la comparación con los datos suministrados por la profesora, calculando el porcentaje de diferencia con base en la ecuación (18).

$$\%_{ERROR} = \left| \frac{Valor\ anterior - Valor\ nuevo}{Valor\ anterior} \right| * 100 \quad (18)$$

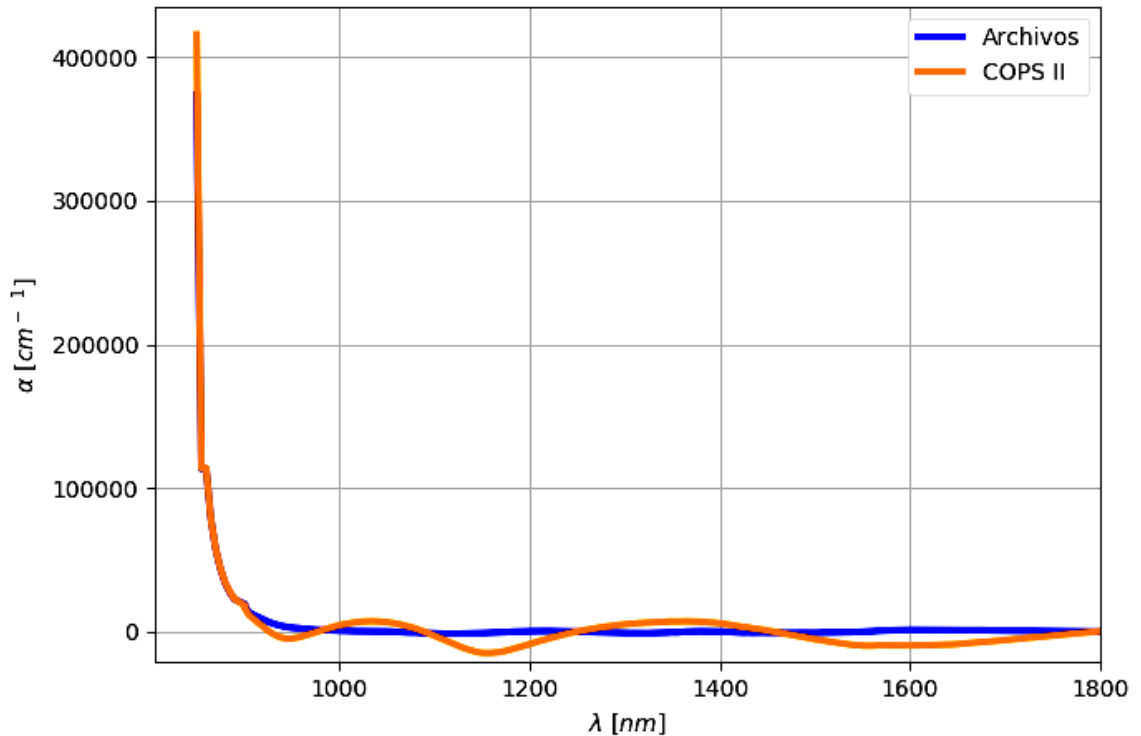
PELÍCULA BiS

Figura 22. Índice de Refracción.



La figura 22 muestra las gráficas del índice de refracción obtenidas de los archivos proporcionados y por medio del software COPS II, se representan en color azul y naranja respectivamente. Al compararlas, se encontró que el porcentaje de diferencia es del 3,56%. Estas gráficas no coinciden debido a la diferencia en el método usado en cada caso para realizar el cálculo de índice de refracción del sustrato, el cual influye directamente en el índice de refracción de la película. Adicionalmente, en este porcentaje de diferencia influyen los errores que se pueden presentar tanto en el cálculo de los puntos máximos y mínimos del espectro, como el presentado al implementar la ecuación de cauchy (ecuación (13)).

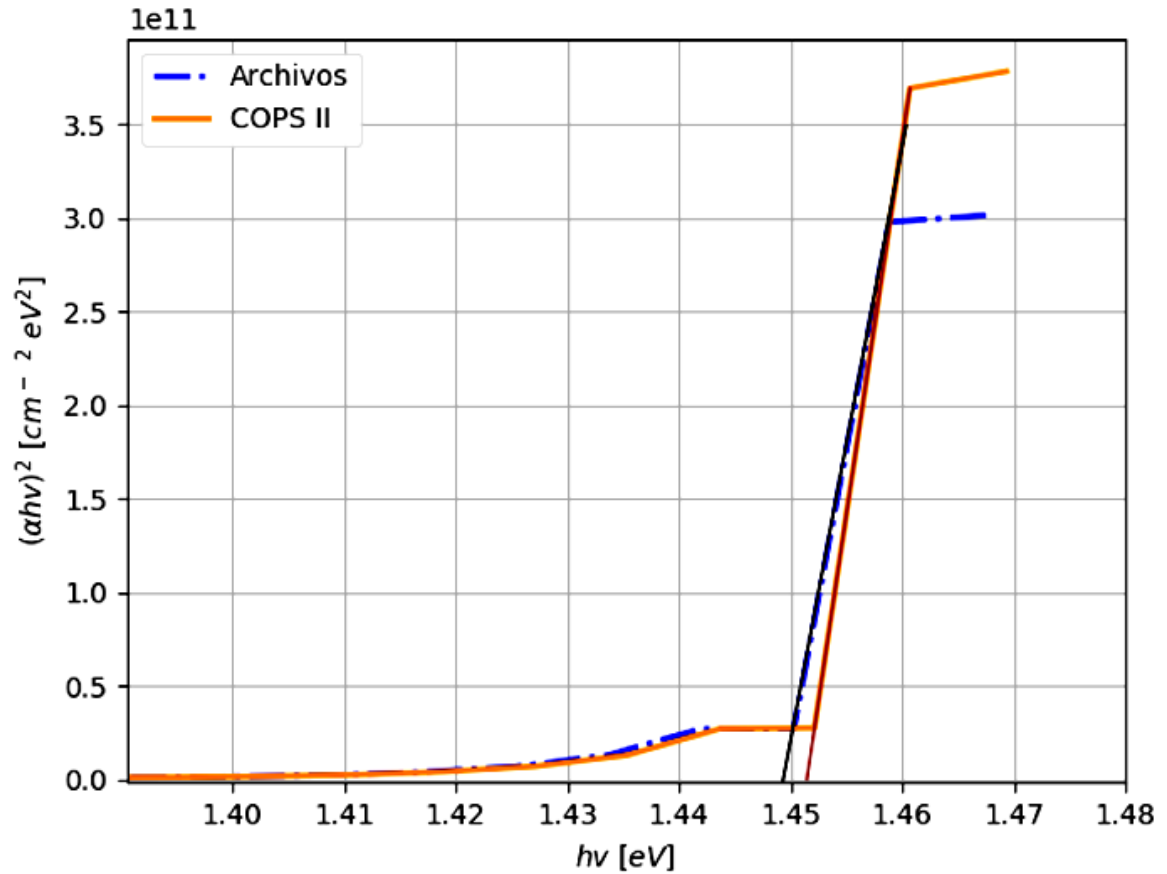
Figura 23. Coeficiente de Absorción.



Se analizó el coeficiente de absorción en la región de absorción fuerte ya que, es la de interés. En la figura 23 se muestran las gráficas obtenidas con los datos de los archivos (color azul) y por el software COPS II (color naranja). El porcentaje de diferencia encontrado fue del 5,15%. Este se debe a la diferencia en la tolerancia de error, ya que la trabajada en el software COPS II es de 10^{-10} mientras que, la utilizada por la profesora es de 10^{-7} .

De igual forma, se evidencia que el coeficiente de absorción presenta valores negativos, esto se debe al método numérico usado, el cual no es preciso en todas las longitudes de onda. Sin embargo, esto no afecta el análisis de las constantes ópticas ya que esos valores no se tienen en cuenta.

Figura 24. Gap directo.



En la figura 24 se observan las gráficas del gap, con línea sólida color naranja se representa la calculada por COPS II y con línea punteada color azul la obtenida de los archivos. Los valores encontrados para la brecha de energía prohibida (band gap) fueron 1,452 [eV] y 1,450 [eV] respectivamente, este resultado coincide con lo analizado por otros autores^{43 44}. El porcentaje de diferencia obtenido es de 0,14%, esto indica que los valores calculados por COPS II son confiables.

⁴³ AHIRE, R. R; SANKAPAL, B. R y LOKHANDE, C. D. Preparation and characterization of Bi₂S₃ thin films using modified chemical bath deposition method. En: Materials Research Bulletin. Department of Physics, Thin Film Physics Laboratory, Shivaji University, Kolhapur-416 004 India. 2001, vol. 36, Nro. 1-2. p. 199-210. PII: S0025-5408(01)00509-8

⁴⁴ BORSE, Sunil Ramdas y SONAWANE, P. S. Nanostructure studies on Bi₂S₃ thin film. En: Review of Research. Department of Physics: India. October 2017, vol. 7, Nro. 1. p. 1-6. ISSN: 2249-894X

Por otra parte, el espesor aproximado calculado por COPS II es de 550,76 [nm], mientras que, el registrado en los archivos fue de 554,18 [nm], presentado así un porcentaje de diferencia de 0,62%. Para evaluar el valor del espesor con datos experimentales se usó la película de ZnS:In, de la cual se tiene información. COPS II obtuvo un espesor de 234,47 [nm], mientras que, el encontrado experimentalmente mediante medidas de perfilometría fue de 202,5 [nm], presentándose así un porcentaje de error de 15,79%. Se observa que el software calcula un valor aproximado como lo menciona Swanepoel.

6.1.2 Películas no homogéneas. Se ingresaron algunos espectros de transmitancia encontrados en los archivos proporcionados, sin embargo, no se cuenta con la información de las constantes ópticas para comparar los resultados. Debido a esto, se optó por reconstruir los espectros de películas no homogéneas, usando la ecuación (19) propuesta por Swanepoel⁴⁵.

$$T_{\Delta d} = \frac{\lambda}{4\pi n \Delta d} \frac{a}{(1-b^2)^{\frac{1}{2}}} \left[\tan^{-1} \left(\frac{1+b}{(1-b^2)^{\frac{1}{2}}} \tan \frac{\varphi_2}{2} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{1+b}{(1-b^2)^{\frac{1}{2}}} \tan \frac{\varphi_1}{2} \right) \right] \quad (19)$$

Donde:

$$a = \frac{Ax}{B+Dx^2} \quad (19a)$$

$$b = \frac{Cx}{B+Dx^2} \quad (19b)$$

$$\tan \frac{\varphi_2}{2} = \tan \left(\frac{2\pi n \Delta d}{\lambda} \right) \quad (19c)$$

$$\tan \frac{\varphi_1}{2} = -\tan \left(\frac{2\pi n \Delta d}{\lambda} \right) \quad (19d)$$

⁴⁵ Swanepoel, R. Home Search and others. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films. Printed in Great Britain. Department of Physics, Rand Afrikaans University, Johannesburg, South Africa, J. Phys. E: Sci. Instrum. Vol. 17, 1984, p.896-903.

Las ecuaciones (19a) y (19b) dependen de las ecuaciones (9a-9d) y (11).

En consecuencia, se realizaron simulaciones en Python partiendo de valores de constantes ópticas previamente calculadas, las cuales, al ser remplazadas en la ecuación (19), permiten reconstruir el espectro. Se tomaron los datos de dos espectros, uno estudiado por Swanepoel⁴⁶ y el otro por Caricato⁴⁷.

Con el objetivo de simular espectros reales y no ideales, se añadió a los espectros un ruido gaussiano aleatorio con media cero y desviación estándar de 0,0008; ya que el ruido está presente en la mayoría de las muestras experimentales.

Aunque se realizaron varias simulaciones, solamente se presentan los resultados de la película de silicio amorfo hidrogenado presentada en el artículo guía de Swanepoel ya que se cuenta con la información necesaria para comparar los resultados.

PELÍCULA a-Si:H (Swanepoel).

En la figura 25 se muestra el espectro de transmitancia reconstruido de la película de silicio amorfo hidrogenado trabajada por Swanepoel. Al realizar la comparación con el espectro original (curva sólida figura 4), se observa la gran similitud que existe entre ellos. El error promedio encontrado al comparar los puntos extremos de los espectros es de 0,12 %, con base en los datos de la tabla 1. Solo se compararon estos puntos debido a que es la única información del espectro que proporciona el autor.

⁴⁶ Swanepoel, R. Home Search and others. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films. Printed in Great Britain. Department of Physics, Rand Afrikaans University, Johannesburg, South Africa, J. Phys. E: Sci. Instrum. Vol. 17, 1984, p.896-903.

⁴⁷ CARICATO, A. P; FAZZI, A y LEGGIERI, G. A computer program for determination of thin films thickness and optical constants. En: Applied Surface Science. Julio, 2005, vol. 248, Nro. 1-4. p. 440-445.

Figura 25. Espectro de Transmitancia (Simulación).

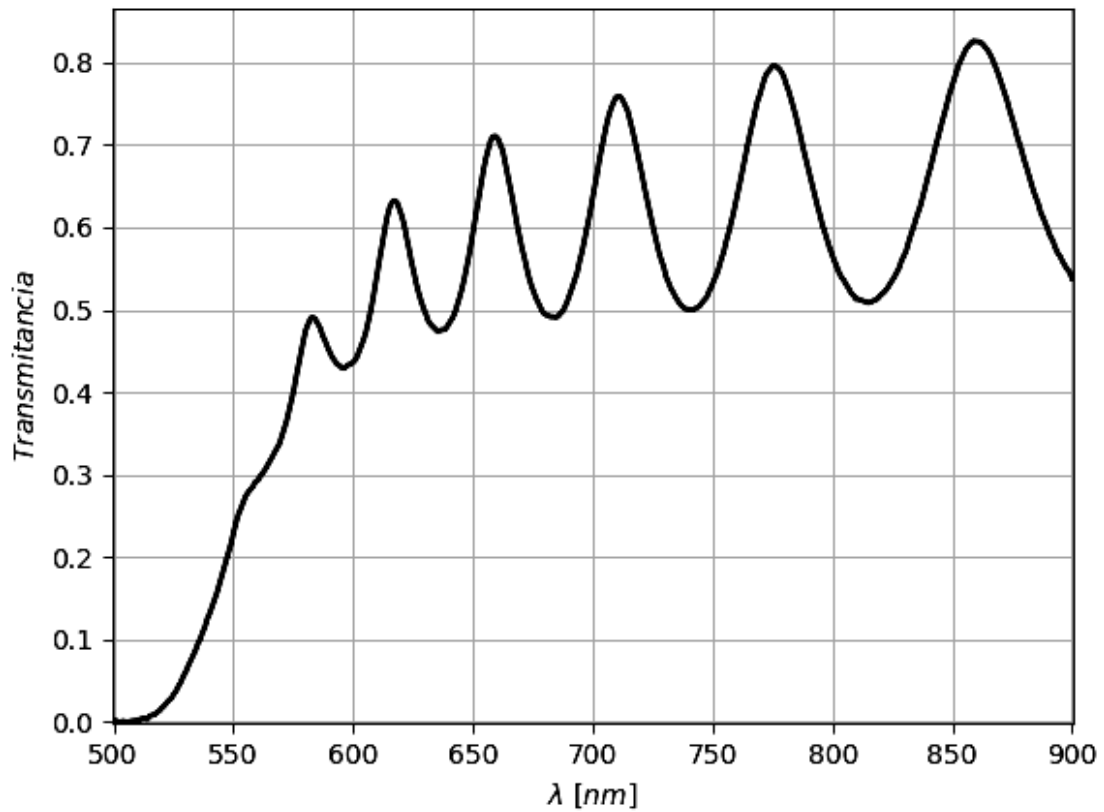
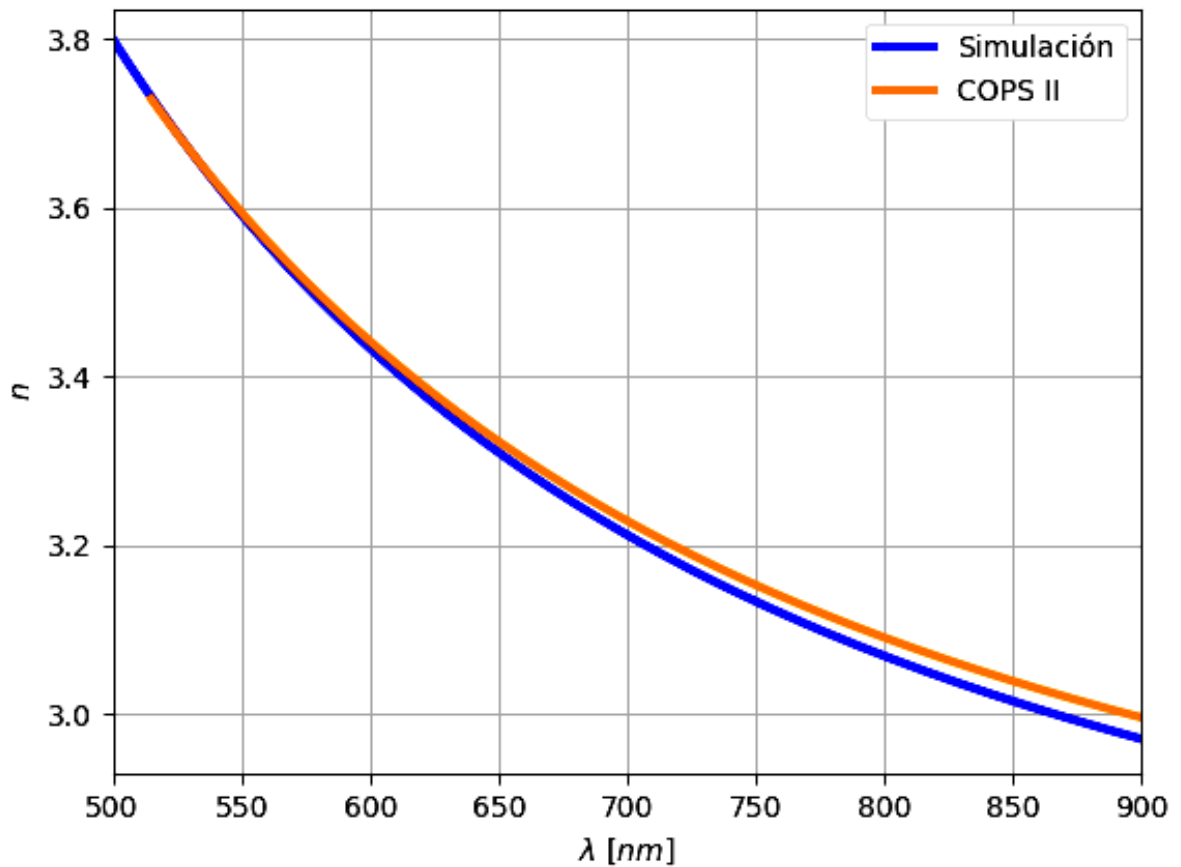


Tabla 1. Datos espectro experimental y simulado

lambda [nm]	T-Articulo	T-Simulado	Error [%]
859	0,826	0,827	0,144
814	0,509	0,509	0,056
775	0,796	0,797	0,195
740	0,5	0,499	0,125
710	0,759	0,759	0,044
683	0,491	0,490	0,190
658	0,71	0,708	0,201
636	0,474	0,473	0,087
616	0,631	0,631	0,045
598	0,432	0,432	0,076
581	0,484	0,484	0,048
566	0,32	0,319	0,239
			0,121

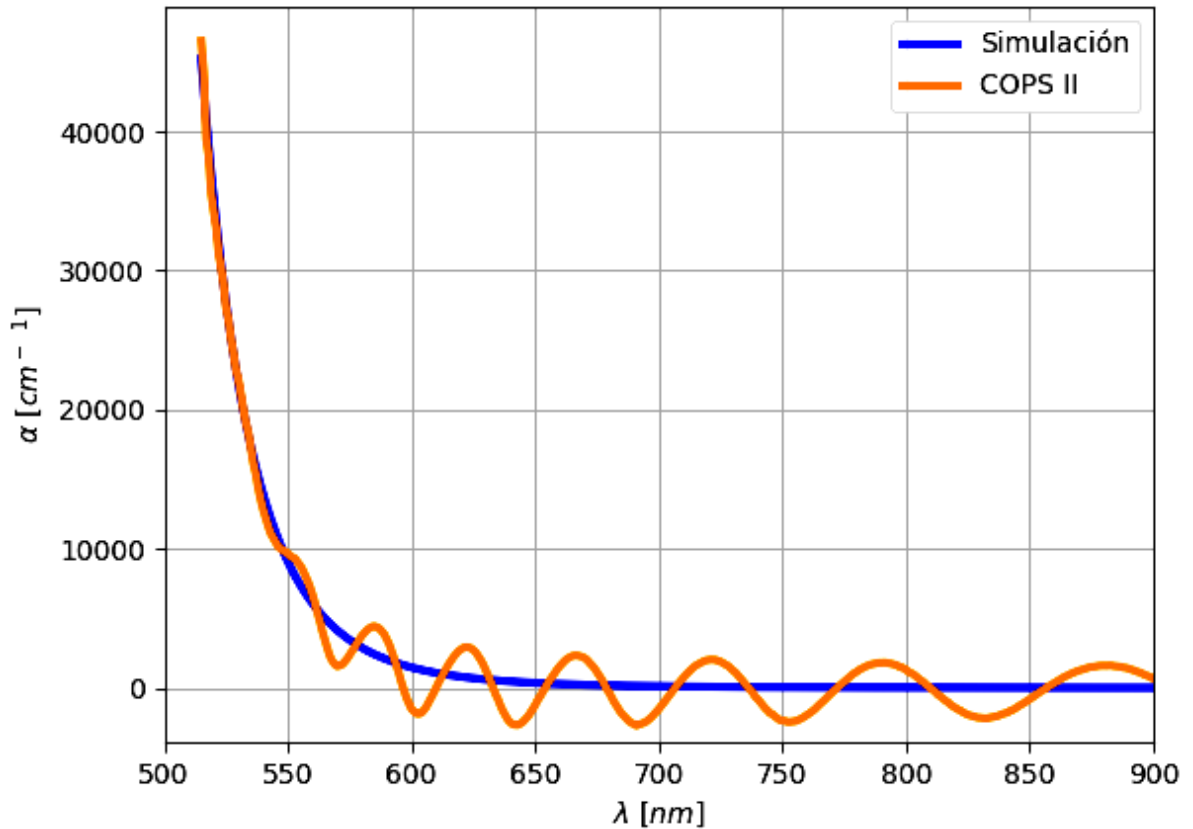
A continuación, se muestran las gráficas de las constantes ópticas simuladas a partir de ecuaciones y las obtenidas mediante la herramienta de software COPS II para la película de a-Si:H.

Figura 26. Índice de refracción.



En la figura 26, se representa la gráfica del índice de refracción obtenido mediante simulación con color azul y el calculado por COPS II con color naranja. Al comparar las gráficas se observa similitud entre ellas, el porcentaje de diferencia encontrado es de 0,4%. Esto indica que el software es eficiente en cuanto al cálculo de esta constante.

Figura 27. Coeficiente de Absorción.



En la figura 27, se observan las gráficas obtenidas por simulación y por la herramienta COPS II del coeficiente de absorción, se representan con color azul y naranja respectivamente. Se obtiene un porcentaje de diferencia del 4,5%, el cual se debe al método numérico usado. Este, se basa en la iteración de los valores de coeficiente de extinción (k), como se mencionó anteriormente no es preciso para ciertos rangos de longitudes de onda, por lo tanto, las estimaciones dadas por el software presentan un pequeño error en el cálculo de esta constante, sin embargo, este error no afecta el análisis del coeficiente de absorción de la película.

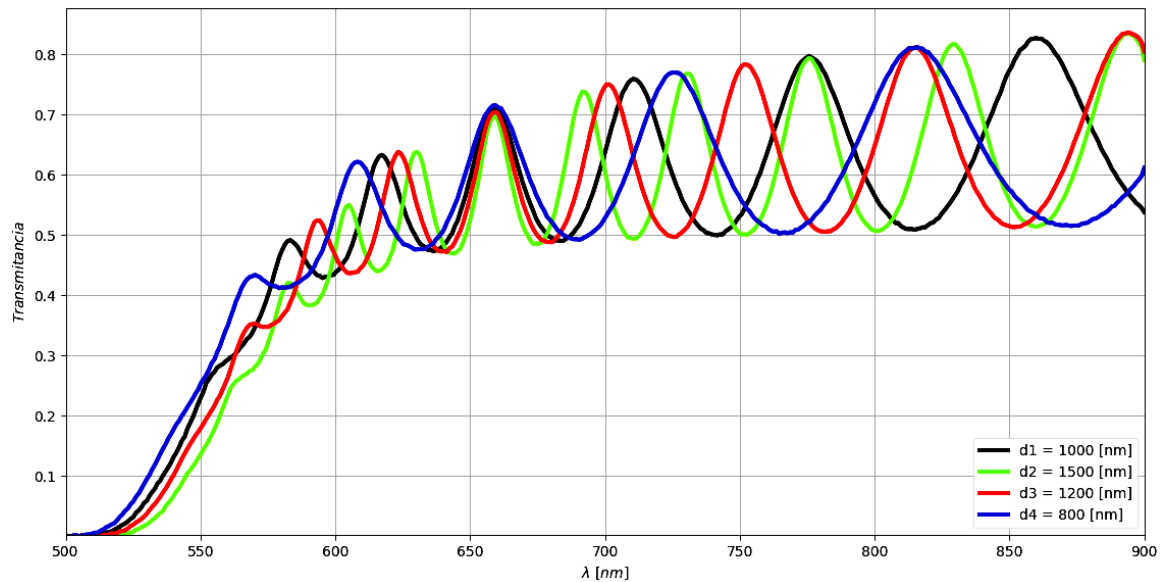
Por otra parte, el software COPS II calcula un espesor de 1005,1 [nm] el cual, al ser comparado con el valor real de la película (1000 [nm]) presenta un porcentaje de

diferencia del 0,51 %. Con base en esto, se infiere que el software COPS II calcula valores confiables para el espesor de películas no homogéneas.

Finalmente, para el Δd (variación en el espesor), el software arroja como resultado 32,31 [nm] que al ser comparado con el valor real de la película (30 nm) genera un porcentaje de error de 7,7%. Esta diferencia, se debe a los errores presentes en la determinación de los puntos T_M y T_m del espectro.

Una vez calculadas las constantes, se realizó un análisis del espectro para observar su comportamiento al presentar variaciones tanto en el espesor como en Δd .

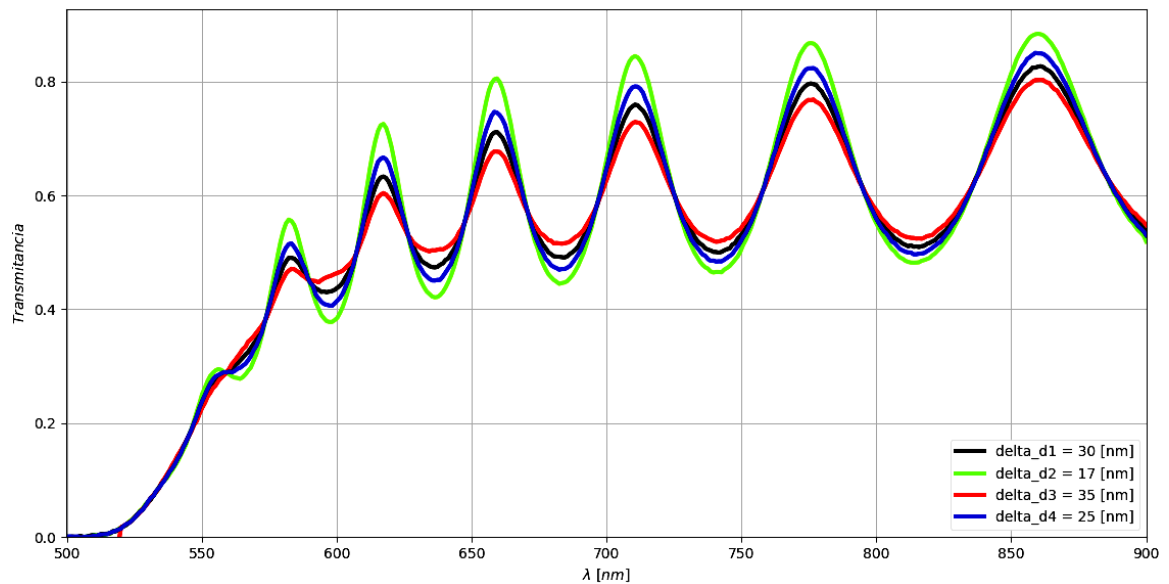
Figura 28. Espectro de película no homogéneo con variación de espesor.



En la figura 28, se muestra el espectro de transmitancia típico de una película delgada no homogénea de a-Si:H con variaciones en el espesor y $\Delta d = 30$ [nm]. En color negro se observa el espectro original con espesor de 1000 [nm], al disminuirlo hasta 800 [nm] (línea azul) el número de franjas disminuye y al aumentarlo hasta 1500 [nm] (línea verde claro) el número de franjas aumenta. Se observa que, están directamente relacionados ya que al variar el espesor de la película el número de

franjas de interferencia que conforman al espectro de transmitancia también varía. Esto ocasiona que el espectro tenga más o menos puntos máximos y mínimos. Además, al variar el espesor cambia el band gap del semiconductor, esto se debe al tamaño de grano sobre la superficie de la película, el cual aumenta a medida que el espesor crece y esto hace que se produzca la disminución del gap de energía⁴⁸.

Figura 29. Espectro de película no homogénea con variación en Δd .



En la figura 29 se observa el mismo espectro de transmitancia de la figura 28, pero con variaciones en el Δd y $d = 1000$ [nm]. En color negro se observa el espectro original cuyo $\Delta d = 30$ [nm], al aumentarlo hasta 35 [nm] (línea roja) se observa que la amplitud de las franjas de interferencia disminuye y al disminuirlo hasta 17 [nm] (línea verde claro) la amplitud de las franjas aumenta. El Δd indica que existen inhomogeneidades en la película, se observa que este es el responsable en el aumento o disminución de la amplitud de las franjas de interferencia del espectro de transmitancia.

⁴⁸ ALY, S. A y AKL, Alaa. A. Influence of film thickness on optical absorption and energy gap of thermally evaporated CdS_{0.1}Se_{0.9} thin films. En: Chalcogenide Letters. October 2015, vol. 12, Nro. 10. p. 489-496.

7. CONCLUSIONES

Se estudió el método propuesto por R Swanepoel, para calcular el índice de refracción, coeficiente de absorción, espesor y band gap en películas delgadas semiconductoras tanto homogéneas como no homogéneas. Además, se investigaron otros trabajos con el fin de complementar algunas de las ecuaciones que facilitan el cálculo de las constantes ópticas.

Se desarrolló la herramienta de software COPS II, con una interfaz de usuario sencilla y de fácil manejo. Adicionalmente, se realizó una guía de usuario que permite entender los pasos que se deben seguir para ingresar el espectro de transmitancia de la película y de esta forma proceder con el cálculo de las constantes ópticas de manera adecuada.

Se hicieron pruebas ingresando diferentes espectros típicos de transmitancia de películas homogéneas y no homogéneas. Se encontró que la herramienta presenta aproximaciones de las constantes ópticas con buena precisión con base en los porcentajes de diferencia calculados.

8. RECOMENDACIONES

Para un trabajo futuro, se recomienda complementar el software para que el ingreso de los datos del espectro sea posible en otro tipo de archivos, tales como csv o spc generados por el espectrofotómetro.

Para que el cálculo del coeficiente de absorción sea más exacto en todas las regiones del espectro, se recomienda implementar otro método numérico.

Se aconseja estudiar otro procedimiento que permita calcular las constantes ópticas y el espesor con mayor precisión. Adicionalmente, que pueda ser implementado para todo tipo de espectros de transmitancia sin importar el número de franjas de interferencia.

Para que sea posible trabajar con todo tipo de materiales semiconductores, se recomienda agregar la opción para el cálculo del gap indirecto.

BIBLIOGRAFÍA

ALVAREZ, Miguel Ángel. Qué es Python [En línea]. DESARROLLOWEB.com. (19 de Noviembre de 2003). [Consultado: 28 de junio de 2019]. Disponible en Internet: <https://desarrolloweb.com/articulos/1325.php>

AHIRE, R. R; SANKAPAL, B. R y LOKHANDE, C. D. Preparation and characterization of Bi₂S₃ thin films using modified chemical bath deposition method. En: Materials Research Bulletin. Department of Physics, Thin Film Physics Laboratory, Shivaji University, Kolhapur-416 004 India. 2001, vol. 36, Nro. 1-2. p. 199-210. PII: S0025-5408(01)00509-8

ALY, S. A y AKL, Alaa. A. Influence of film thickness on optical absorption and energy gap of thermally evaporated CdS_{0.1}Se_{0.9} thin films. En: Chalcogenide Letters. October 2015, vol. 12, Nro. 10. p. 489-496.

BORSE, Sunil Ramdas y SONAWANE, P. S. Nanostructure studies on Bi₂S₃ thin film. En: Review of Research. Department of Physics: India. October 2017, vol. 7, Nro. 1. p. 1-6. ISSN: 2249-894X

BRESSERT, Eli. Scipy and Numpy. First edition. Printed in the United States of America: O'Reilly, 2012. 57p. ISBN: 978-1-449-30546-8

COLOMBIA. CONGRESO DE LA REPÚBLICA. Ley 1715 (13, mayo, 2014). Por medio de la cual se regula la integración de las energías renovables no convencionales al Sistema Energético Nacional. Diario Oficial. Bogotá, D.C., 2014, no. 49150. p. 1-25.

CARICATO, A. P; FAZZI, A y LEGGIERI, G. A computer program for determination of thin films thickness and optical constants. En: Applied Surface Science. Julio, 2005, vol. 248, Nro. 1-4. p. 440-445.

CASTRO LORA, Humberto Gabriel. Estudio de las propiedades ópticas y estructurales en películas delgadas de ZnSe. Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de: Magíster en Ciencias Físicas. Bogotá D. C: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ciencias Básicas, Departamento de Física, 2013, 107p.

CARTAGENA SOTO, Luis Alberto; FLORES GAONA, Carlos Eduardo; GÁLVEZ SÁNCHEZ, Cosme Xavier y ROMERO, Bryan Armando. Propiedades ópticas de los semiconductores. [En línea]. Universidad Nacional de Loja, Loja, Ecuador. (Recuperado en 24 Marzo 2019). Disponible en internet: [https://www.academia.edu/36553642/PROPIEDADES_ÓPTICAS_DE_LOS_SEMI CONDUCTORES](https://www.academia.edu/36553642/PROPIEDADES_ÓPTICAS_DE_LOS_SEMI_CONDUCTORES)

CARRILLO E, Julio C. Aplicaciones de las derivadas: a extremos de funciones [En línea]. 12p. [Consultado: 3 de Julio de 2019]. Disponible en Internet: <http://matematicas.uis.edu.co/jccarril/Cursos/C1/slides-ln-c1/C1-LN-Cap4-S2.pdf>

CHAUVE, Adrien; ESPAZE, Andre; GOUILLART, Emmanuelle; VAROQUAUX, Gael y GOMMERS, Ralf. 1.5. Scipy: computación científica de alto nivel [En línea]. CLAUDIOVZ.GITHUB.io. [Consultado: 29 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: <https://claudiovz.github.io/scipy-lecture-notes-ES/intro/scipy.html>

ESPINÓS MANZORRO, Juan Pedro. Aplicaciones tecnológicas de películas delgadas. [En línea]. 2010, p. 25-28. (Recuperado en 13 mayo 2019). Disponible en internet: <https://core.ac.uk/download/pdf/36050748.pdf>

FARFÁN ARDILA, Paola Rocío. Determinación teórica de la banda prohibida band gap del Bi(OH)CrO_4 en su estructura mínima, celda unitaria y sistema periódico. Bogotá: Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales. Facultad de Ciencias, Programa de Química, 2015, 30p.

FRAAS, Lewis y PARTAIN, Larry. Solar cells and their applications. Second edition. New Jersey: WILEY, 2010. 627p. (Wiley series in microwave and optical engineering). ISBN 978-0-470-44633-1

GONZÁLES GARZA, Jorge Oswaldo. Desarrollo de estructuras fotovoltaicas tipo $\text{CdS/AgSb(SxSe}_{1-x})_2$ por medio de técnicas de baja toxicidad y costo. Como requisito parcial para obtener el Grado de Doctor en Ingeniería de Materiales. San Nicolás de los Garza: Universidad Autónoma de Nuevo León. Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, 2013, 220p.

GONZÁLES GARZA, Jorge Oswaldo. Películas delgadas de seleniuro de plata y antimonio por medio de la combinación de baño químico y evaporación térmica para aplicaciones fotovoltaicas. Tesis con opción a grado de maestro en Ciencias de la Ingeniería Mecánica con Especialidad en Materiales. San Nicolás de los Garza: Universidad Autónoma de Nuevo León. Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, 2010, 137p.

GANJOO, A y GOLOVCHAK, R. Computer program PARAV for calculating optical constants of thin films and bulk materials: Case study of amorphous semiconductors. En: Journal of Optoelectronics and Advanced Materials. Junio, 2008, vol. 10, Nro. 6. p. 1328-1332.

HURTADO MORALES, Mikel Fernando. Estado actual de las celdas solares en capas absorbentes de bajo costo $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$, perspectivas y nuevos aportes realizados. En: Revista Elementos. Junio, 2012, vol. 2, Nro. 1. p. 117-131. ISBN: 22485252

HURTADO MORALES, Mikel Fernando. Síntesis y caracterización de películas delgadas del semiconductor $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ y su uso como capa absorbente en celdas solares. Tesis de Doctorado en Ciencias – Química. Bogotá D.C: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ciencias – Departamento de Química, 2014. 103p.

JARAMILLO ISAZA, Franklin y MEJÍA ESCOBAR, Mario Alejandro. Celdas solares y nanotecnología. [En línea]. Universidad de Antioquia. p. 1-11. (Recuperado en 28 Abril 2019). Disponible en internet: <http://www.propiedadpublica.com.co/celdas-solares-y-nanotecnologia/>

MESA RODRIGUEZ, Fredy Giovanni. Síntesis y estudio de propiedades de nuevos materiales fotovoltaicos usados como capa buffer y capa absorbente en celdas solares. Trabajo de grado presentado para optar el título de Doctor en Ciencias-Física. Bogotá D. C: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ciencias, Departamento de Física, 2010, 90p.

MORENO MONTROYA, Luis y ARANGO, Pedro José. Caracterización estructural y morfológica de películas de ZnO crecidas sobre sustratos de vidrio. En: Dyna. Medellín: Universidad Nacional de Colombia-Manizales. Marzo, 2007, vol. 74, Nro. 151. p. 37-45. ISSN 0012-7353

OTÁLORA BASTIDAS, Camilo Andrés. Desarrollo de materiales usados en la fabricación de celdas solares orgánicas. Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de: Maestría en Ciencias-Química. Bogotá: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ciencias – Departamento de Química, 2013, 62p.

POELMAN, Dirk y PHILIPPE, Frederic Smet. Methods for the determination of the optical constants of thin films from single transmission measurements: a critical

review. En: Journal of Physics D: Applied Physics. Department of Solid State Sciences: Ghent University. Julio, 2003, vol. 36, Nro. 15. p. 1850-1857. PII: S0022-3727(03)58303-6

PONCE ALCÁNTARA, Salvador. Células solares de silicio: Fundamentos y aplicaciones. [En línea]. Málaga, España. 2008, 75 p. (Recuperado en 13 Octubre 2019). Disponible en internet: https://www.academia.edu/6347838/CÉLULAS_SOLARES_DE_SILICIO_FUNDAMENTOS_Y_APLICACIONES

Python Tkinter Introducción (Interfaz gráfica).pdf: Python Tkinter Introducción (Interfaz gráfica) [En línea]. PEREMANELV.com. [Consultado: 29 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: http://www.peremanelv.com/Pagina_Web_de_Pere_Manel/Tutoriales_files/Python%20Tkinter%20Introducci%C2%A2n%20%28Interface%20grafica%29.pdf

PADILLA A, Jhon Jairo. Gráficas con la librería Matplotlib para Python [En línea]. JPADILLA.DOCENTES.UPBBGA.edu.co. [Consultado: 29 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: http://jpadilla.docentes.upbbga.edu.co/Logica_y_Algoritmia/Graficas%20con%20la%20libreria%20Matplotlib%20para%20Python.pdf

REN21. Renewables 2018 global status report. [En línea]. Technical report, REN 21, 2018. (Recuperado en 20 Abril 2019). Disponible en internet: <http://www.ren21.net>

Swanepoel, R. Home Search and others. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon. Printed in Great Britain. Department of Physics, Rand Afrikaans University, Johannesburg, South Africa, J. Phys. E: Sci. Instrum. Vol. 16, 1983, p. 1214-1222.

Swanepoel, R. Home Search and others. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films. Printed in Great Britain. Department of Physics, Rand Afrikaans University, Johannesburg, South Africa, J. Phys. E: Sci. Instrum. Vol. 17, 1984, p. 896-903.

SUÁREZ LAMADRID, Alejandro y SUÁREZ JIMÉNEZ, Antonio. Tablas con estilo con Tabulate [En línea]. Python 3 para impacientes. Andalucía: España. 12 de Enero de 2017. [Consultado: 1 de Julio de 2019]. Disponible en Internet: <https://python-para-impacientes.blogspot.com/2017/01/tablas-con-estilo-con-tabulate.html>

TIOBE Index | TIOBE – The Software Quality Company: Índice TIOBE para septiembre de 2019 [En línea]. TIOBE.com. [Consultado: 27 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: <https://www.tiobe.com/tiobe-index/>

TRAVIZANO, Matías; ROMANO, Sebastián y KAMIENKOWSKI, Juan. Determinación de la banda prohibida (band gap) en Si. [En línea]. Laboratorio 5, Departamento de física, UBA. 2002. (Recuperado en 25 Marzo 2019). Disponible en internet: http://users.df.uba.ar/sgil/labo5_uba/inform/info/pautadas/band_gap_sil_2k2a.pdf

VARGAS PEREA, Heiner Alexander y ROCHA GONZÁLES, Robinson. Diseño de una herramienta de software para determinar constantes ópticas en películas delgadas semiconductoras empleadas en celdas solares. Trabajo de grado para optar al título de Ingenieros Electrónicos. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Físico-Mecánicas, 2016, 192p.

VALLEJO LOZADA, William Andrés. Desarrollo de materiales fotovoltaicos usados como ventana óptica en celdas solares. Tesis de investigación presentada como requisito parcial para optar el título de: Doctor en Ciencias – Química. Bogotá D. C:

Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ciencias, Departamento de Química, 2011, 75p.

VALLEJO LOZADA, William Andrés. Síntesis de capas buffer para celdas solares de película delgada. En: Revista Elementos. Junio, 2012, vol. 2, Nro. 1. p. 83-91.

Welcome to Python: Python [En línea]. PYTHON.org. [Consultado: 28 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: <https://www.python.org/>

YU, Peter and CARDONA, Manuel. Fundamentals of Semiconductors, Physics and Materials Properties. Fourth Edition. Boston University: Springer, 2010. 775p. ISBN 978-3-642-00709-5

7 razones para programar en Python – Bejob: 7 razones para programar en Python [En línea]. BeJob. 18 de Septiembre 2016. [Consultado: 1 de Julio de 2019]. Disponible en Internet: <https://www.bejob.com/7-razones-para-programar-en-python/>

8.1. Módulos Python – Materiales del entrenamiento de programación en Python – Nivel básico: 8.1. Módulos Python [En línea]. ENTRENAMIENTO-PYTHON-BASICO.READTHEDOCS.io. [Consultado: 28 de Junio de 2019]. Disponible en Internet: <https://entrenamiento-python-basico.readthedocs.io/es/latest/leccion8/modulos.html>