VOLUMEN 48
**XXXI Verano De la Ciencia**
ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

# Modelado de Propiedades de Transporte para dispositivos Fotovoltaicos de Portadores Calientes

Modeling Transport Properties for Hot Carrier Photovoltaic Devices

J. J. Muñoz-Navarro[1], E. B. Gallardo-Vela[1], D. García-Ortega[1], J. E. Castellanos-Águila[1]
[1]División de Ingenierías, Campus Irapuato – Salamanca, Universidad de Guanajuato. Carr. Salamanca-Valle Km 3.5+1.8, Comunidad de Palo Blanco, 36700 Salamanca, Gto., México.
jj.munoznavarro@ugto.mx, eb.gallardovela@ugto.mx, d.garciaortega@ugto.mx, je.castellanos@ugto.mx

**Resumen**

En este trabajo se presenta un estudio sistemático de primeros principios sobre el impacto de la deformación interfacial en las propiedades estructurales y electrónicas de heteroestructuras formadas por permutas III-V/III-V, II-VI/II-VI y III-V/II-VI, con el objetivo de establecer criterios de diseño para contactos selectivos en dispositivos fotovoltaicos y termoeléctricos. Para ello se evaluaron 13 interfaces de diferentes espesores atómicos. Los cálculos se realizaron con el paquete Quantum Espresso, mediante la aproximación del gradiente generalizado. Se cuantifico la deformación generada por el desajuste de red, mediante el cambio volumétrico y la variación del bandgap. A partir de estos resultados se determinaron las propiedades de transporte mediante el software BoltzTrap2 bajo aproximación de banda rígida y tiempo de relajación constante. Los resultados muestran que la respuesta estructural a la interface, afecta las propiedades electrónicas y termoeléctricas, están altamente correlacionadas, dependiendo fuertemente de la composición catiónica y aniónica.

**Palabras clave**: Semiconductores; Bandgap; Factor de potencia termoeléctrica; Deformación

## Introducción

En las últimas décadas, la optimización de dispositivos para la conversión y gestión de energía limpia, tales como las celdas fotovoltaicas de tercera generación y los generadores termoeléctricos, ha dependido crucialmente del diseño de interfaces semiconductoras eficientes [1]. Un desafío persistente en ambas tecnologías es el desarrollo de contactos selectivos de portadores capaces de extraer selectivamente electrones o huecos, minimizando las pérdidas por recombinación no radiativa en la interfaz [2]. En aplicaciones fotovoltaicas, el alineamiento energético de las bandas entre el contacto selectivo y el material absorbente, cuyo bandgap dicta la longitud de onda de absorción, es un factor primario para maximizar el voltaje de circuito abierto ($V_{oc}$) [3]. Por su parte, en aplicaciones termoeléctricas, la manipulación de estas discontinuidades de bandas a escala nanométrica permite el fenómeno de filtrado energético de portadores, el cual es clave para incrementar el coeficiente Seebeck y, consecuentemente, optimizar el factor de potencia termoeléctrico $S^2\sigma$ [4].

Tradicionalmente, la selección de estos contactos selectivos se ha basado en óxidos de metales de transición, polímeros orgánicos, como el Spiro-OMeTAD, o capas metálicas delgadas [5]. Sin embargo, los fenómenos de transporte y el acoplamiento en la interfaz de estos sistemas suelen ser poco abordado, debido a las complejidades intrínsecas del crecimiento epitaxial y la generación de estados de defecto interfaciales [6]. Históricamente, la predicción y el diseño del alineamiento de bandas en estas uniones se han aproximado mediante modelos macroscópicos e ideales, destacando la regla de afinidad electrónica de Anderson [7]. No obstante, dicha aproximación ignora efectos microscópicos críticos como la formación de dipolos interfaciales, los efectos de la temperatura y, las deformaciones elásticas derivadas del desajuste de red [8]. Estas tensiones estructurales locales inducen cambios que pueden alterar el tipo de alineamiento de bandas, pudiendo ser del Tipo I, II o III, invalidando las predicciones basadas puramente en propiedades de los materiales en bulto.

Una manera de superar estas limitaciones es mediante la combinación y permuta de semiconductores pertenecientes a las familias III-V y II-VI [9]. Esto debido a que la composición entre estas familias ofrece una amplia flexibilidad de diseño, permitiendo ajustar/controlar el bandgap y modular las discontinuidades de las bandas de conducción y valencia [10]. A pesar de este potencial de composición, el desajuste de red inherente

entre estos materiales introduce estados de deformación que modifican la estructura de bandas y, por lo tanto, los tiempos de relajación de los portadores. Por lo tanto, para predecir con precisión el comportamiento de estas interfaces y su viabilidad como contactos selectivos, es indispensable un análisis sistemático desde una perspectiva composicional.

En este trabajo, presentamos un estudio sistemático mediante cálculos de primeros principios, basados en la Teoría de la Funcional de la Densidad, enfocándonos en evaluar el impacto del desajuste de red y la variación composicional sobre las propiedades electrónicas de heteroestructuras generadas por permutas entre las familias III-V y II-VI. Se analizó cómo la evolución del tamaño de la supercelda y los efectos de deformación debido a la interfaz, modifican el bandgap y desvían las discontinuidades de banda respecto a los modelos ideales. Finalmente, se correlacionaron estas modificaciones electrónicas con el impacto directo en los factores de potencia de transporte, discutiendo su acoplamiento óptimo como contactos selectivos en función del bandgap del material absorbente, abriendo así nuevas pautas de diseño para dispositivos fotovoltaicos y termoeléctricos de alta eficiencia.

## Metodología

El estudio se inició con la selección de pares de semiconductores pertenecientes a las familias III–V y II–VI que presentaran condiciones favorables para formar heteroestructuras coherentes. Posteriormente, se construyeron y optimizaron las superceldas, se cuantificó la deformación generada por la formación de la interfaz y se evaluaron sus efectos sobre el bandgap. Finalmente, para la heteroestructura AlBi/GaBi con cuatro capas atómicas por material, se calcularon las propiedades de transporte en función de la temperatura, el tipo de portador y la concentración de dopaje.

### Selección de los materiales

En primer lugar, se optimizaron los parámetros de red de los semiconductores individuales. A partir de estos valores se calculó el desajuste de red entre cada pareja de materiales mediante la expresión:

$$\delta = \frac{|a_1 - a_2|}{a_2} x100$$

donde $a_1$ es el parámetro de red del material tomado como referencia y $a_2$ corresponde al material que se coloca en contacto con él. El signo del desajuste indica si el segundo material debe expandirse o comprimirse para adoptar el parámetro de red del material de referencia.

Este criterio se utilizó inicialmente para identificar las combinaciones con mayor viabilidad para formar heteroestructuras. De acuerdo con Li y Lau, un desajuste de red inferior al 8 % entre los materiales constituyentes favorece el crecimiento de heteroestructuras [11]. Se seleccionaron preferentemente parejas con un desajuste de red menor o igual al 5 %. Mediante este procedimiento se seleccionaron 13 heteroestructuras pertenecientes a las familias III–V/III–V, II–VI/II–VI y III–V/II–VI.

### Construcción de las heteroestructuras

Para cada pareja seleccionada se definió inicialmente un parámetro de red común, obtenido a partir del promedio de los parámetros de red de ambos materiales. Este valor permitió representar el acoplamiento entre las dos regiones de la interface.

Las heteroestructuras se construyeron mediante superceldas periódicas apiladas en la dirección $z$. La supercelda se generó a partir de uno de los materiales y, posteriormente, las especies atómicas de una de sus regiones se sustituyeron por las correspondientes al segundo material. De esta forma se obtuvieron dos bloques semiconductores diferenciados dentro de una misma celda periódica.

Las terminaciones atómicas de la interfaz se seleccionaron considerando los criterios de electroneutralidad propuestos por Tasker, con la finalidad de evitar campos eléctricos internos artificiales [12].

Además, para determinar el número de capas necesario para representar cada material dentro de la heteroestructura, se estudió la dependencia con el espesor en los sistemas AlP/GaP y AlAs/GaAs. Para estos casos se construyeron superceldas con 4, 6, 8 y 12 capas atómicas por región. Este análisis permitió establecer si las propiedades estructurales y electrónicas convergían al aumentar el espesor de las capas.

**Cálculos de primeros principios**

Los cálculos de primeros principios se realizaron mediante el paquete computacional Quantum ESPRESSO, versión 7.4.1 [13-15]. La interacción entre los electrones de valencia y los núcleos iónicos se describió mediante pseudopotenciales de Vanderbilt optimizados y que conservan la norma, obtenidos de la biblioteca SG15 [16, 17].

La energía de corte para las funciones de onda se fijó en 70 Ry y se mantuvo constante para todos los sistemas, con el propósito de emplear parámetros numéricos equivalentes y permitir una comparación directa entre los materiales individuales y las heteroestructuras.

La integración sobre la primera zona de Brillouin se realizó mediante mallas de puntos $k$ de Monkhorst–Pack [18]. Para los materiales en volumen se utilizó una malla de $10 \times 10 \times 10$, mientras que para las heteroestructuras la densidad de puntos $k$ se redujo proporcionalmente al aumento de la longitud de la supercelda en la dirección $z$.

Las estructuras se relajaron empleando la aproximación del gradiente generalizado de Perdew, Burke y Ernzerhof, PBE [19, 20], debido a que proporciona una descripción adecuada de las propiedades estructurales de los semiconductores estudiados [21].

**Evaluación de la deformación estructural y electrónica**

Para cuantificar la deformación inducida por la formación de la interfaz, se calculó el cambio volumétrico de cada material con respecto a su estructura en volumen mediante:

La variación estructural de cada material al formar la heteroestructura se calculó mediante el cambio porcentual de volumen:

$$\Delta V(\%) = \frac{V_{\text{int}} - V_{\text{bulk}}}{V_{\text{bulk}}} \times 100$$

donde $V_{\text{int}}$ es el volumen que ocupa el material dentro de la heteroestructura y $V_{\text{bulk}}$ es su volumen optimizado en fase bulk, es decir, como material aislado. Un valor positivo de $\Delta V$ indica una expansión respecto a la estructura bulk, mientras que un valor negativo representa una compresión.

De forma similar, la modificación de las propiedades electrónicas asociada con la formación de la interfaz se evaluó mediante la variación del bandgap:

$$\Delta E_g = E_g^{\text{int}} - E_g^{\text{bulk}}$$

donde $E_g^{\text{int}}$ corresponde al bandgap del material dentro de la heteroestructura y $E_g^{\text{bulk}}$al bandgap del material optimizado en fase bulk. Un valor positivo de $\Delta E_g$indica un aumento del bandgap, mientras que un valor negativo señala una disminución. Estos parámetros, posteriormente agrupados y promediados según la familia química, el anión y el catión, permitieron identificar qué grupos presentan una mayor sensibilidad estructural y electrónica frente a la formación de la heteroestructura.

**Propiedades de transporte**

El estudio de las propiedades termoeléctricas se realizó mediante el programa BoltzTraP2 [22], resolviendo las ecuaciones semiclásicas de transporte de Boltzmann bajo las aproximaciones de banda rígida y tiempo de relajación constante. Este análisis se efectuó para la heteroestructura $\mathrm{AlBi/GaBi}$, constituida por cuatro capas atómicas de cada material. El criterio empleado para seleccionar esta heteroestructura se discute posteriormente en la sección de resultados.

Los coeficientes de transporte se calcularon a temperaturas comprendidas entre $200$y $400$ K, considerando portadores de carga tipo $n$ y tipo $p$. A partir de la estructura electrónica se determinaron el coeficiente de Seebeck $S$, la conductividad eléctrica normalizada $\sigma/\tau$, la conductividad térmica electrónica normalizada $\kappa_e/\tau$, y el factor de potencia normalizado $PF/\tau = S^2\sigma/\tau$, donde $\tau$ representa el tiempo de relajación de los portadores.

Para obtener los valores absolutos de la conductividad eléctrica, la conductividad térmica electrónica y el factor de potencia, se emplearon tiempos de relajación constantes de $139.5$ fs para los electrones y $55.07$ fs para los huecos [23-26]. Estos valores corresponden al promedio de los tiempos de relajación intrínsecos de los semiconductores considerados en este trabajo.

VOLUMEN 48
**XXXI Verano De la Ciencia**
ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

Para la heteroestructura $AlBi/GaBi$se estudiaron concentraciones de portadores comprendidas entre $1 \times 10^{17}$ y $1 \times 10^{19} \mathrm{cm}^{-3}$. Se utilizó la convención de asignar valores negativos a las concentraciones asociadas con el dopaje tipo $n$, correspondiente a electrones, y valores positivos al dopaje tipo $p$, correspondiente a huecos. Las concentraciones consideradas fueron

$$-1 \times 10^{17}, -5 \times 10^{17}, -1 \times 10^{18}, -5 \times 10^{18} \text{ y } -1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

para el dopaje tipo $n$, y

$$1 \times 10^{17}, 5 \times 10^{17}, 1 \times 10^{18}, 5 \times 10^{18} \text{ y } 1 \times 10^{19} \mathrm{cm}^{-3}$$

para el dopaje tipo $p$. Este intervalo se seleccionó con el propósito de comparar el comportamiento termoeléctrico de la heteroestructura en regímenes de dopaje moderado y elevado.

## Resultados

Dado lo que se pretende en este trabajo es evaluar los efectos en los materiales semiconductores debido a efectos estructurales, realizamos diferentes permutas de heteroestructuras entre los semiconductores del grupo III-V y II-VI y entre ellas. Para ello se consideró un factor de desajuste de red de máximo 5% entre los dos materiales. Esto nos permite limitar cambios de fase o defectos. Una vez definidas las permutas entre estas, se lograron generar 13 diferentes heteroestructuras.

Una vez optimizada la heteroestructura o la supercelda, se evaluó la deformación de los materiales una vez que se genera la interface. Para ello se empleó la siguiente expresión:

$$\%\Delta a = \left(\frac{a_1 - a_0}{a_0}\right) * 100$$

donde $a_1$ es el material que se comprime o expande con respecto al material en volumétrico, $a_0$. Si el valor es positivo es indicativo de una expansión, mientras que un valor negativo corresponde a una compresión. En la tabla 1 se presenta un resumen de los cambios de volumen de los materiales agrupados por familias. Esto debido a que un análisis global mostró que la interfaz genera una anisotropía estructural, donde la mayoría de los sistemas compensan la tensión que se genera en el plano con una relajación fuera del plano, lo cual es característico de un acoplamiento congruente.

Particularmente, podemos observar que en los sistemas II-VI también emerge una tendencia composicional bien definida. Los compuestos con Cd tienden a presentar un aumento del bandgap bajo las deformaciones observadas, mientras que los materiales con Zn muestran, en promedio, una disminución. De manera análoga, al agrupar por anión se observa que S y Se tienden a asociarse con respuestas ligeramente negativas o cercanas a neutras, mientras que Te exhibe un comportamiento más mixto. En la familia III-V, los fosfuros son los sistemas con respuesta más extrema. Esto sugiere que los compuestos basados en P presentan una sensibilidad particularmente alta al entorno de deformación interfacial. En cambio, los arseniuros muestran una respuesta más moderada, con variaciones de gap relativamente pequeñas alrededor de sus valores bulk, lo que sugiere una mayor rigidez electrónica frente a deformaciones moderadas. Los antimoniuros y bismuturos, por su parte, tienden a exhibir desplazamientos positivos del bandgap en varios casos, aunque con una dispersión importante, sobre todo en compuestos con Bi, donde la aproximación empleada para su cálculo es incorrecta o insuficiente.

Por otro lado, la variación del bandgap con respecto al material en volumen no sigue una tendencia universal, sino que está mediada por la composición química. Esto es debido a que los átomos son más grandes, los enlaces se vuelven más débiles debido al tamaño de los átomos, y la separación entre la banda de valencia y de conducción disminuye, reduciendo el bandgap. Por lo tanto, en la Tabla 1 presentamos la variación porcentual del bangap que se ve influenciada por el parámetro de red, ya que induce en los elementos esfuerzos grandes que lo modifican. En compuestos donde su material contacto posee un bandgap de bulk pequeño o que tiende a 0, podemos notar como la deformación dada por la heteroestructura puede incrementarlo o reducirlo. Esto se debe a que, en las interfaces, las deformaciones no son homogéneas y un

material suele imponerse al otro, permitiéndonos identificar que compuestos o familias son más sensibles al cambio de su bangap debido a la deformación. Para los semiconductores del grupo III-V se tiene porcentajes elevados de $\Delta E_g$. Particularmente, los compuestos basados en Bi presentan los mayores cambios electrónicos, esto se debe a su alta sensibilidad electrónico de los orbitales p, que en presencia de deformaciones suelen subir o bajar.

*Tabla 1. Cambios estructurales (ΔV) y electrónicos (ΔEg) promedios, agrupados por anión y catión, observados para los materiales semiconductores al conformar una heteroestructura.*

| | Anión | | | Catión | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Familias | Símbolo | ΔV (%) | $\Delta E_g$(eV) | Símbolo | ΔV (%) | $\Delta E_g$ (eV) |
| II-VI | S | -0.81 | -0.04 | Cd | -6.14 | 0.15 |
| II-VI | Se | -0.77 | -0.03 | Hg | -1.11 | 0.01 |
| II-VI | Te | -1.52 | 0.01 | Zn | 9.28 | -0.38 |
| III-V | As | 3.09 | -0.03 | Al | 15.51 | 0.01 |
| III-V | Bi | 53.98 | 0.15 | Ga | 9.92 | -0.09 |
| III-V | P | 2.02 | -0.05 | In | 13.92 | 0.29 |
| III-V | Sb | 2.55 | 0.08 | | | |

En la Figura 1 se presenta la distribución del cambio de bandgap agrupados por ion. Puede observarse en la Fig. 1a, la dispersión del fósforo y la asimetría del S, Se y Te, disminuyendo conforme incrementa el periodo, por el contrario, para la Fig. 1b, se muestra la tendencia de cambio opuesta entre el Zn (-) y el Cd(+), lo cual se vuelve relevante al momento de seleccionar el material con el cual trabajar.

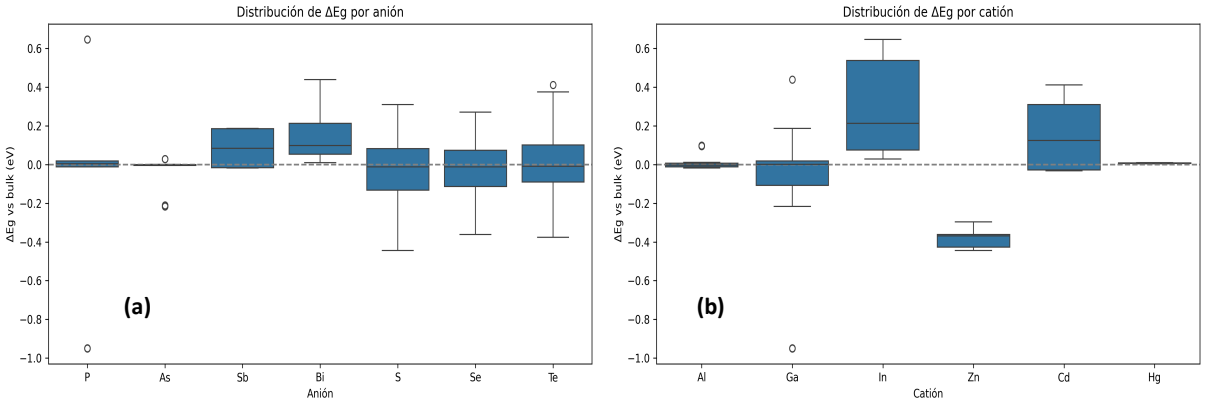



*Figura 1. Distribución de cambios del bandgap por anión (a) y catión (b) considerados en este estudio.*

Asimismo, un parámetro importante al momento de generar de manera controlada los efectos estructurales y electrónicos de los materiales que conforman estas interfaces, es el número de capas atómicas que conforma cada lado. Para ello consideramos a los sistemas de estudio AlP/GaP y AlAs/GaAs variando en su construcción el número de capas atómicas, siendo de 4, 6, 8 y 12, tal y como se muestran en la Tabla 2.

Notamos que conforme incrementa el espesor, el volumen deformado convergen rápidamente al del material en el volumen. Desde el punto de vista de las propiedades electrónicas, la estabilidad estructural observada en estas interfaces se traduce en una conservación del bandgap estando el rango de variación de 0.4-1.6 meV al aumentar de 4 a 12 capas. Esto define el uso de 8-12 capas atómicas como aproximación límite de capa gruesa para contactos de referencia.

*Tabla 2. Cambios Volumétricos y electrónicos (Eg) dependientes del número de capas atómicas para las heteroestructuras AlP/GaP y AlAs/GaAs.*

| Volumen (Å$^3$) | | | | |
|---|---|---|---|---|
| Capas | AlP | GaP | AlAs | GaAs |
| 4 | 98.84 | 99.15 | 99.61 | 100.04 |
| 6 | 98.83 | 99.14 | 99.67 | 100.09 |
| 8 | 98.84 | 99.16 | 99.54 | 99.97 |
| 12 | 98.86 | 99.17 | 99.57 | 99.99 |
| $E_g$ (eV) | | | | |
| 4 | 1.61 | 1.61 | 1.47 | 0.23 |
| 6 | 1.61 | 1.60 | 1.49 | 0.22 |
| 8 | 1.62 | 1.60 | 1.49 | 0.23 |
| 12 | 1.62 | 1.60 | 1.49 | 0.23 |

A partir de los resultados obtenidos en esta primera fase, se obtuvieron las propiedades de transporte al resolver las ecuaciones semiclásicas de transporte de Boltzmann en Boltztrap2 bajo la aproximación de banda rígida y tiempo de relajación constante. Bajo este formalismo, la conductividad eléctrica, $\sigma_\tau$, la conductividad térmica electrónica, $\kappa_e$, y $PF=S^2\sigma$ son dependientes de la estructura electrónica. Para realizar este análisis, seleccionamos el caso de AlBi/GaBi con 4 capas atómicas para cada lado del material. Esto debido a que es el sistema con mayor deformación presente en sus interfaces y mostrando una mayor dispersión de los resultados.

En la Fig. 2 se presenta el coeficiente de Seebeck obtenido para esta interfaz considerando un rango de temperatura de 200 a 400 K considerando concentraciones de portadores del tipo p y n en el rango de $1x10^{17}$ a $1x10^{19}$ $cm^{-3}$. Para el caso del dopado tipo p, a $1x10^{17}$ $cm^{-3}$ y 200 K, el potencial químico está muy cercano al borde de la banda de valencia, por lo tanto, S presenta sus máximos valores. Al aumentar T a 400K la activación intrínseca de electrones empieza a compensar huecos y S cae bruscamente, sobre todo para bajas

concentraciones. A concentraciones de 1x10$^{19}$ cm$^{-3}$ el potencial químico se interna sobre la banda de valencia, generando que S se reduzca, pero se vuelve mucho más estable con T.

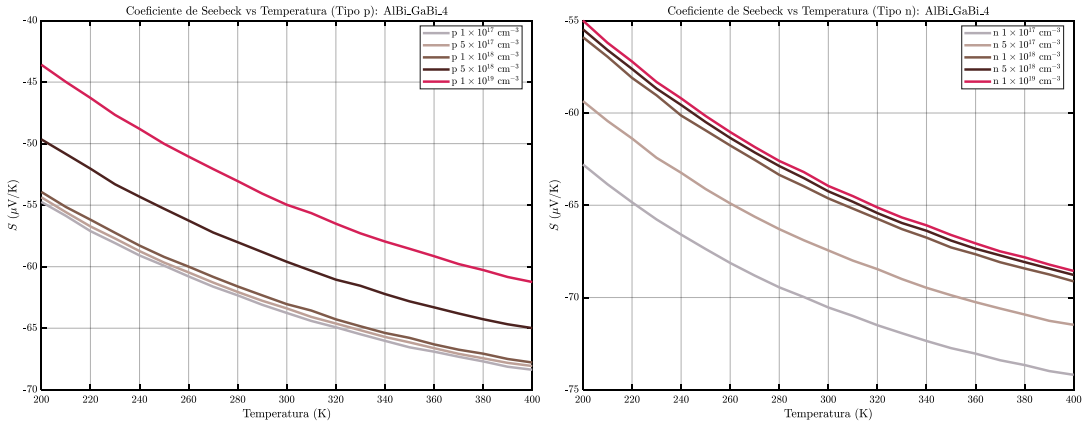



*Figura 2. Coeficiente de Seebeck (S) para dopajes tipo p y n con dependencia de la temperatura para la heteroestructura AlBi/GaBi 4.*

Para el caso del dopado tipo n, el coeficiente de Seebeck es menor que los obtenidos cuando se tiene un dopaje del tipo p. Esto es porque la banda de conducción suele ser más dispersiva que la de valencia, decayendo a alta T. Además, en ambos casos podemos observar una separación de curvas donde el coeficiente de Seebeck se conserva, siendo de S(1x10$^{17}$) > S(1x10$^{18}$) > S(1x10$^{19}$) en valor absoluto a toda T.

Para la representación de la conductividad térmica electrónica ($\kappa_e$) de la Figura 3, el AlBi/GaBi presenta una deformación volumétrica entre el 42-62%, lo cual genera que el bandgap se reduzca por haber un menor solapamiento de las bandas, lo que genera que las bandas se aplanen y, por lo tanto, tiende a bajar velocidad de grupo. Para el caso de la $\kappa_e$, observamos que aumenta monótonamente en el rango de temperatura de 200 a 400 K. Además, de que se observa que, en los mismos rangos de dopaje, la conductividad térmica para el tipo n es mayor que en p.

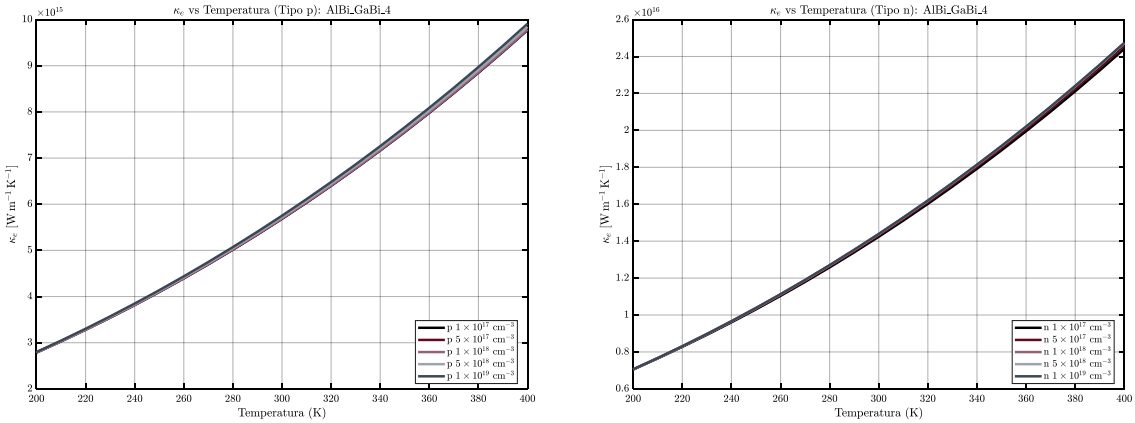



*Figura 3. Conductividad térmica electrónica ($\kappa_e$), para dopajes tipo p en función de la temperatura para la heteroestructura AlBi/GaBi 4.*

Para el caso de la conductividad eléctrica, $\sigma$, se observa un aumento monótono con la Temperatura y con dopajes que van de 1x10$^{17}$->1x10$^{19}$, donde la magnitud de la conductividad eléctrica presenta una ligera disminución de forma casi lineal conforme se incrementa la temperatura desde los 200 K hasta los 400 K. En ambos casos tanto en tipo n y tipo p, se observan valores positivos en todo el rango analizado. En cambio, para el dopaje tipo p, incrementar la concentración genera un aumento en la conductividad eléctrica. Por otra

parte, para el dopaje tipo n, al aumentar la concentración de portadores se observa que la magnitud de la conductividad se reduce de manera significativa.

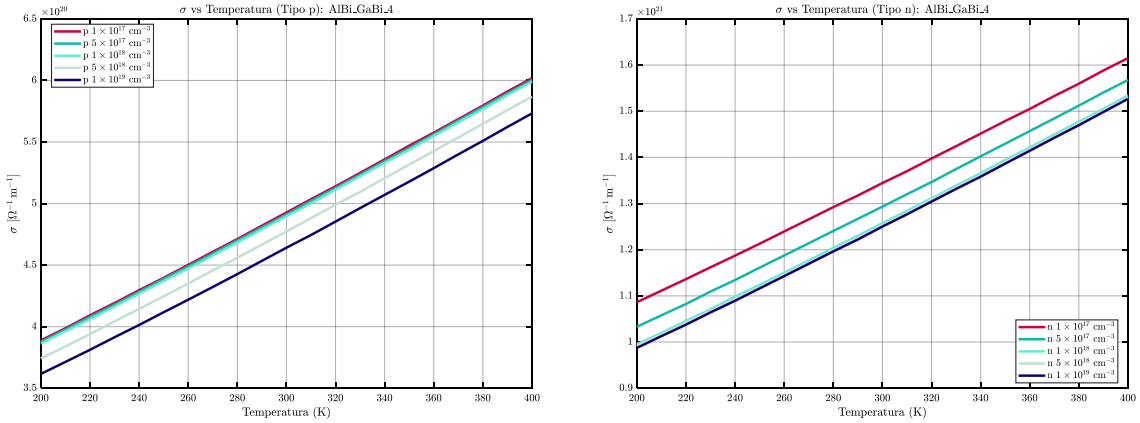



*Figura 4. Conductividad eléctrica, para dopajes tipo p y n como función de la temperatura y concentración para la heteroestructura AlBi/GaBi con 4 capas atómicas por material.*

Finalmente, a partir de los parámetros anteriormente discutidos, podemos determinar el Factor de potencia, $S^2\sigma$, que presentan estos sistemas semiconductores. Para el caso de dopaje del tipo p, se observan valores positivos en todo el rango analizado. Esto es el comportamiento físico esperado, ya que este factor es el resultado de multiplicar la conductividad eléctrica por el cuadrado del coeficiente de Seebeck. Además, la magnitud del factor de potencia crece de forma continua al aumentar la temperatura desde los 200 K hasta los 400 K. Este incremento es mucho más pronunciado en las concentraciones de dopaje más altas. Asimismo, al incrementar la concentración de los portadores se produce un aumento significativo en el factor de potencia. Cabe destacar un comportamiento particular, a bajas temperaturas, sobre los 200 K, la concentración de 5×1018 cm-3 y 5×1019 cm-3 presentan mejores valores iniciales que la siguiente concentración más alta, pero a medida que la temperatura aumenta, la concentración más alta, la 1×1020 cm-3 experimenta un crecimiento mayor que supera a todas las demás, alcanzando el rendimiento máximo a los 400 K.

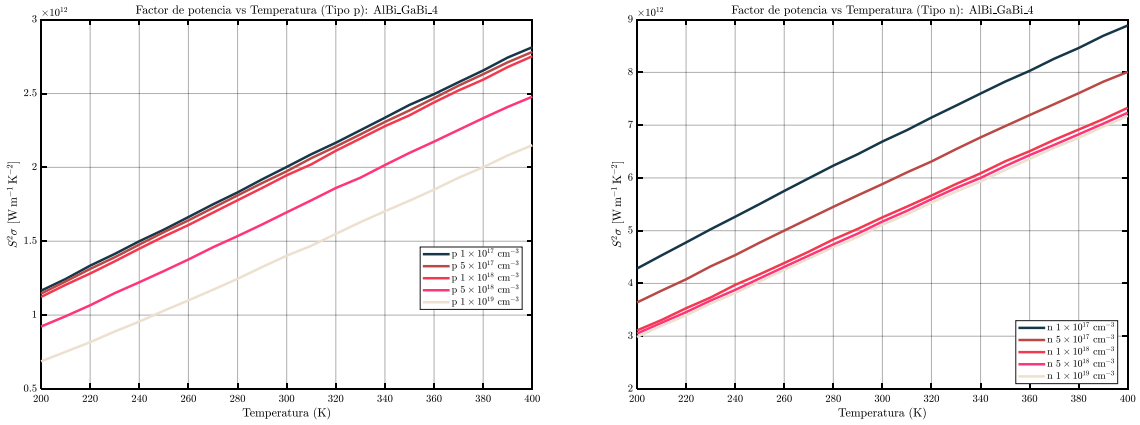



*Figura 5. Factor de potencia, para los dopajes tipo p y n como función de la temperatura para la heteroestructura de 4 capas atómicas para AlBi/GaBi.*

## Conclusiones.

En este trabajo se realizó un estudio sistemático de primeros principios para evaluar el efecto de la deformación interfacial en heteroestructuras formadas por permutas de materiales semiconductores de los grupos III-V/III-V, II-VI/II-VI y III-V/II-VI. Se evaluaron 13 interfaces en superredes de 4, 6, 8 y 12 capas atómicas. Se adoptó un criterio de desajuste de red ≤5% para viabilidad de crecimiento coherente. De el desajuste de red se observó que la deformación en el plano genera cambios volumétricos que están directamente relacionados con su comportamiento electrónico y su composición. Particularmente, se encontró que el Zn cierra el bandgap en promedio -0.38 eV mientras que el Cd lo abre +0.15 eV en la misma interfaz; asimismo, el P muestra la mayor dispersión, el As y Sb son moderados, y el Bi presenta desplazamientos positivos asociados a su alta expansión ΔV = 42-62%. En los sistemas de referencia AlP/GaP y AlAs/GaAs la convergencia con el espesor es rápida (<0.07% en ΔV y 0.4-1.6 meV en Eg entre 4 y 12 capas), validando 8-12 capas como límite de capa gruesa. Como caso límite de transporte, se analizó el sistema AlBi/GaBi de 4 capas atómicas. La conductividad eléctrica, σ/τ, conductividad térmica electrónica κe/τ y factor de potencia PF/τ = S2σ/τ, mostraron que hay un colapso de S a baja concentración y alta T, lo cual se interpreta que el material ya no es solo del tipo p. Finalmente, los resultados globales permiten correlacionar la deformación estructural con los cambios en el Eg, lo cual afecta directamente al Factor de Potencia, permitiéndonos seleccionar el contactos de referencia para la aplicación objetivo.

## Referencias

[1] Nelson, J. (2003). The Physics of Solar Cells. Imperial College Press. / Rowe, D. M. (2018). Thermocouples and Thermopiles. CRC Press.

[2] Würfel, P., & Würfel, U. (2016). Physics of Solar Cells: From Principles to New Concepts. John Wiley & Sons.

[3] Schulz, P., et al. (2019). Interface Engineering in Thin-Film Solar Cells. Advanced Materials, 31(26), 1801546.

[4] Minnich, A. J., et al. (2009). Bulk nanostructured thermoelectric materials. Energy & Environmental Science, 2(5), 466-479.

[5] Calado, P., et al. (2016). Evidence for ion migration in perovskite solar cells from forward bias capacitance. Applied Physics Letters, 109(4), 043903.

[6] Franciosi, A., & Van de Walle, C. G. (1996). Heterojunction band offsets: variation giving rise to control. Surface Science Reports, 25(1-4), 1-141. (Referencia clásica para alineamiento de bandas y fallas de reglas estáticas).

[7] Anderson, R. L. (1962). Experiments on Ge-GaAs heterojunctions. Solid-State Electronics, 5(5), 341-351. (La cita original de la regla de Anderson).

[8] Peressi, M., Binggeli, N., & Baldereschi, A. (1998). Band-engineering at interfaces: theory and numerical experiments. Journal of Physics D: Applied Physics, 31(11), 1273. (Cita ideal para justificar por qué se requiere DFT y primeros principios frente a la regla de Anderson debido a desajustes de red).

[9] Kroemer, H. (2001). Nobel Lecture: Quasielectric fields and band offsets: teaching electrons new tricks. Reviews of Modern Physics, 73(3), 783.

[10] Vurgaftman, I., Meyer, J. R., & Ram-Mohan, L. R. (2001). Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. Journal of Applied Physics, 89(11), 5815-5875.

[11] Li, Q., & Lau, K. M. (2017). Epitaxial growth of highly mismatched III-V materials on (001) silicon for electronics and optoelectronics. *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, *63*(4), 105–120. doi:10.1016/j.pcrysgrow.2017.10.001

[12] Tasker, P. W. (1979). The stability of ionic crystal surfaces. *Journal of Physics*, *12*(22), 4977–4984. doi:10.1088/0022-3719/12/22/036

[13] Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Buongiorno Nardelli, M., Calandra, M., … Baroni, S. (2017). Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of Physics. Condensed Matter: An Institute of Physics Journal*, *29*(46), 465901. doi:10.1088/1361-648X/aa8f79

[14] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., … Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics. Condensed Matter: An Institute of Physics Journal*, *21*(39), 395502. doi:10.1088/0953-8984/21/39/395502

[15] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., … Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics. Condensed Matter: An Institute of Physics Journal*, *21*(39), 395502. doi:10.1088/0953-8984/21/39/395502

[16] Hamann, D. R. (2013). Optimized norm-conserving Vanderbilt pseudopotentials. *Physical Review. B, Condensed Matter and Materials Physics*, *88*(8). doi:10.1103/physrevb.88.085117

[17] Schlipf, M., & Gygi, F. (2015). Optimization algorithm for the generation of ONCV pseudopotentials. *Computer Physics Communications*, *196*, 36–44. doi:10.1016/j.cpc.2015.05.011

[18] Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review*, *13*(12), 5188–5192. doi:10.1103/physrevb.13.5188

[19] Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, *77*(18), 3865–3868. doi:10.1103/PhysRevLett.77.3865

[20] Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1997). Generalized gradient approximation made simple [phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996)]. *Physical Review Letters*, *78*(7), 1396–1396. doi:10.1103/physrevlett.78.1396

[21] Park, J.-S. (2021). Comparison study of exchange-correlation functionals on prediction of ground states and structural properties. *Current Applied Physics: The Official Journal of the Korean Physical Society*, *22*, 61–64. doi:10.1016/j.cap.2020.12.005

[22] Madsen, G. K. H. (2018). *BoltzTraP2, a program for interpolating band structures and calculating semi-classical transport coefficients* [Data set]. doi:10.17632/BZB9BYX8G8.1

[23] Adachi, S. (2005). Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors. Wiley. doi.org/10.1002/0470090340

[24] Aydin, M., Yilmaz, S. N., Erol, A., Bork, J., Zide, J., & Donmez, O. (2024). Electron energy relaxation mechanism in n-type InxGa1-xAs1-yBiy alloys under electric and magnetic fields. Physica Scripta, 99(10), 105909. https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad7179

[25] Liu, Y. (s. f.). *Electronic transport database for 2D materials (eTran2D)*. The University of Texas at Austin. https://sites.utexas.edu/yuanyue-liu/etran2d/

[26] Yang, Q. L., Deng, H. X., Wei, S. H., Li, S. S., & Luo, J. W. (2020). Materials design principles towards high hole mobility learning from an abnormally low hole mobility of silicon (Version 1). arXiv. https://doi.org/10.48550/ARXIV.2011.02262