

Optimización de Celdas Solares usando Nano-estructuras Plasmónicas

Luis Emiro Linares García

Tesis entregada en cumplimiento parcial de los requisitos para el grado de
Maestría en Ingeniería Electrónica y de Computadores

Asesor

Alba Graciela Ávila Bernal, Ph.D.

Universidad de los Andes
Departamento de Ingeniería Eléctrica y Electrónica
Bogotá D.C.
Junio 2012

Dedicado a las comunidades,
tanto humanas como no-humanas
que han sido afectadas por la sobre-explotación de recursos.
Sea este humilde trabajo un grano de arena
para las bases de un nuevo mundo.

Prólogo

Este documento de tesis detalla un código computacional de simulación para la optimización de celdas solares inorgánicas por medio de los efectos plasmónicos de nano-estructuras metálicas implantadas en una celda solar. Esto es motivado por la potencial reducción de costos materiales, lo cual incrementaría de forma importante la porción de las fuentes fotovoltaicas en la generación de energía eléctrica a nivel mundial.

Índice general

Introducción	1
1. Modelo del Sistema Físico	4
1.1. Fenómeno Electromagnético	4
1.1.1. Modelo de Materiales para Celdas Solares	4
1.1.2. Condiciones de Frontera	6
1.2. Fenómeno de Transporte	7
2. Esquema Computacional	9
2.1. Sumario del Estado del Arte	9
2.1.1. Métodos Numéricos para Ecuaciones	9
2.1.2. Paquetes de Software existentes	10
2.1.3. Plataformas de Cómputo disponibles	10
2.2. Detalle del desarrollo final	10
2.2.1. Forma débil	10
2.2.2. Barrido en Frecuencia	12
2.2.3. Forma débil de Sistemas de Ecuaciones Parciales	13
3. Resultados	15
3.1. Especificación del programa	15
3.2. Discusión	16
Comentarios Finales	19
Bibliografía	22

Índice de figuras

1.	Mecanismos de mejora de celdas solares con plasmónica	2
2.	Separación de tecnologías por frecuencia de operación y dimensión característica de los dispositivos	2
2.1.	Diagramas de los elementos tetraedrales de Nedélec	12
3.1.	Geometría y enmallado construidos para el ejemplo.	16
3.2.	Visualización de los campos del ejemplo, para una onda plana de $\lambda = 514$ nm	17

Introducción

Este trabajo se organiza, a saber: En este capítulo de introducción se presenta una breve introducción a la aplicación de plasmónica para celdas solares, discutiendo el Estado del Arte e identificando oportunidades de exploración. A continuación el capítulo 1 describe el modelo matemático de la física a simular en la celda solar. Después, el capítulo 2 discute las opciones de cómputo que se evaluaron en este trabajo, detallando al final la solución adoptada. Le antecede el capítulo 3 donde se presentan resultados de validación del simulador construido. El capítulo 3.2 añade comentarios finales y discute direcciones para continuación de este trabajo.

Prospectos para Celdas Solares

El uso de fuentes renovables de energía es una tendencia mundial en crecimiento [1], motivado por la necesidad de encontrar sustitutos para el petróleo como fuente de energía que reduzcan o eliminen las emisiones de gases de efecto de invernadero a fin de evitar los peores efectos del calentamiento global [2]. Las alternativas disponibles incluyen energía solar térmica y fotovoltaica, geotérmica, eólica, de mareas, entre otras, de entre las cuales la energía solar fotovoltaica ha sido una de las más vigorosamente investigadas durante las últimas 4 décadas, aproximadamente. La producción fotovoltaica mundial en 2008 fue superior a los 5 GW, y se proyecta un incremento a los 20 GW para el 2015 [3]. Sin embargo, el costo efectivo de generación de energía solar fotovoltaica aún no es competitivo con el de los combustibles fósiles, y para hacerlo se requiere reducirlo en un factor en el rango de 2 - 5 [4]. Actualmente, las unidades comerciales de generación de energía fotovoltaica son celdas de obleas de Silicio mono-cristalino con espesores en el rango de 180 - 300 μm , y siendo un 50 % del costo de las celdas debido a los costos de las materias primas que producen el Silicio y su procesamiento [5]. Debido a esto, ha causado gran interés la tecnología de celdas solares de película delgada (*thin-film*), pues reducen el espesor de las celdas a menos de 2 μm , pudiendo depositar el Silicio sobre sustratos económicos tales como vidrio, plástico o acero inoxidable. Existe una amplia variedad de semiconductores que se emplean en estas películas delgadas, tales como Silicio (en sus formas amorfo, mono- y poli-cristalino), GaAs, CdTe, CuInSe₂ y también semiconductores orgánicos [3]. No obstante, existen dos problemas asociados a esta tecnología de películas delgadas, a saber:

1. Los elementos Indio (In) y Telurio (Te) son escasos en la corteza terrestre. El Indio en particular, tiene proyectada su reserva mundial a estar consumida en un 83.3 % para el año 2020 [3].
2. Es pequeña la absorbancia de luz cuya energía sea cercana a la brecha (*bandgap*) del semiconductor, debido al corto espesor del mismo. Este problema se acentúa en el caso del Silicio, que es un semiconductor de brecha indirecta.

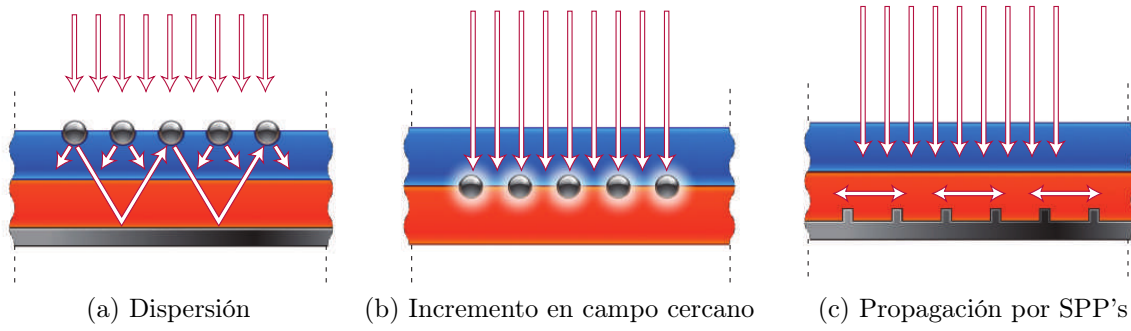


Figura 1: Mecanismos de mejora de celdas solares con plasmónica. Figuras tomadas de [3].

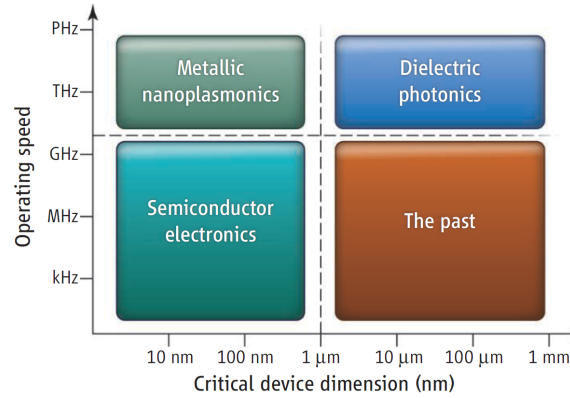


Figura 2: Separación de tecnologías por frecuencia de operación y dimensión característica de los dispositivos. La referencia *the past* indica tecnologías antiguas de semiconductores. (Tomado de [4]).

Plasmónica para Celdas Solares

Parte de la solución a estos problemas se ha buscado en el prometedor campo de la Plasmonica, que explota los efectos dispersivos de la excitación de geometrías metálicas cuya dimensión característica es mucho menor a la longitud de onda de la radiación incidente [6]. De forma resumida, se definen los *plasmones* como excitaciones colectivas del mar de electrones de conducción en los metales (o el mar de electrones de valencia en dieléctricos) [3], distinguiendo *plasmones volumétricos* (excitaciones electrónicas longitudinales en el interior del objeto metálico) de *polaritones plasmónicos superficiales* ó *SPP's* (Modos de excitación electrónica acoplada al campo electromagnético, que se propagan sobre una interfaz metal-dieléctrico) y *plasmones superficiales localizados* ó *LSP's* (versión *no-propagante* de los polaritones plasmónicos superficiales). De especial interés para la aplicación en cuestión son los dos últimos tipos, pues sus efectos de incremento local en la intensidad de campo eléctrico e incremento en la sección efectiva de dispersión son aquellos que se busca maximizar, con el fin de incrementar el camino óptico efectivo de la luz incidente dentro de la celda, y la tasa de generación de fotoportadores [6,7]. En la figura 1 se representan dichos mecanismos.

En la figura 2 se presentan tecnologías de manipulación de ondas electromagnéticas, categorizadas por frecuencia típica de operación y tamaño característico de los dispositivos fabricados en dicha tecnología. La ubicación de la Plasmonica en el espacio tamaño-frecuencia hace de ésta un método práctico para manipular el acoplamiento de la radiación incidente al

material semiconductor de una celda fotovoltaica de película delgada [8].

A manera de ejemplo, se han reportado en la literatura [3] factores de incremento hasta de 9 en la sección transversal efectiva de dispersión de luz hacia el interior del material, implantando esferas de plata de 100 nm de diámetro en una celda de película delgada de Silicio, lo cual indica de forma intuitiva que cubrir en un $\sim 10\%$ la superficie de la celda con estas nanoesferas de Plata lograría acoplar la mayor parte de la radiación incidente. Sin embargo, existe una serie de efectos secundarios que exigen un modelado detallado [9] y un proceso de diseño adecuado para poder lograr el nivel de acoplamiento de luz deseado (efectos tales como pérdidas ohmicas en las nanoesferas metálicas, interferencia entre nanoesferas vecinas, interferencia entre ondas incidente y dispersadas, etc.). Más aún, los procesos de fabricación actuales en general no garantizan uniformidad de largo rango en arreglos de nanopartículas [10], lo cual agrega un efecto adicional a considerar. Los efectos antes mencionados solo pueden capturarse, para geometrías arbitrarias y parametrizadas, por medio de la simulación electromagnética completa (*full-field*), la cual obtiene acuerdo satisfactorio con los resultados experimentales [11–13].

Materiales y Fabricación

La selección del material empleado para las nanoestructuras metálicas que se agregan a las celdas afecta la interacción de la celda con la luz incidente. Los más estudiados para la aplicación en celdas solares son el Oro y la Plata, que son los mejores materiales para usar como elementos de dispersión debido a que son los dos mejores conductores eléctricos en la Naturaleza. No obstante, los precios de estos elementos se encuentran en constante crecimiento, lo cual entra en conflicto con los objetivos de reducir el coste de producción de la energía fotovoltaica y el de poder escalar su producción. Se ha propuesto [3] utilizar elementos más abundantes, que sean más económicos, tales como el Cobre y el Aluminio. Se ha calculado teóricamente y observado experimentalmente [7] que ciertos parámetros de operación (tales como frecuencia de resonancia del modo plasmónico) se alteran al cambiar el material de los elementos de dispersión. Esto hace que sea necesario realizar modelado y simulación de celdas empleando dichos metales, pues los cambios en los parámetros de operación alterarán los parámetros geométricos de una nanoestructura concebida para optimizar la captura de luz en la celda, respecto a una nanoestructura equivalente construida con Oro o Plata.

En el aspecto de la fabricación, en [3] se discuten procesos de fabricación que procuran un control sobre la deposición de arreglos de nanoesferas en diversos sustratos. Existen métodos de fabricación tales como *substrate conformal imprint lithography* que permiten obtener tolerancias bajas (< 0.1 nm) en la ubicación de las nanoesferas, pero en el momento estos métodos no están disponibles a nivel industrial. Métodos menos recientes incluyen la creación de arreglos de nanopartículas aleatoriamente dispuestos a partir de capas muy delgadas de metal (10-20 nm de espesor). Este es un proceso disponible a nivel industrial, pero la generación de arreglos con disposición aleatoria impiden la utilización de arreglos periódicos de nanopartículas para el incremento de la captura de luz al interior de la celda.

Capítulo 1

Modelo del Sistema Físico

Existen dos fenómenos fundamentales que dictaminan la dinámica de una celda solar [9]:

1. Fenómeno electromagnético: La absorción y dispersión de luz incidente en la celda.
2. Fenómeno de transporte: El transporte de los fotoportadores generados dentro de la celda.

Este trabajo modela solamente el primer fenómeno. Por completez, se describen ambos fenómenos en las siguientes secciones.

1.1. Fenómeno Electromagnético

El primer fenómeno se modela por medio de las ecuaciones de Maxwell del Electromagnetismo. En razón al modo de operación de una celda solar, que puede ser descrito como un estado estacionario de respuesta a una irradiación solar constante (o más precisamente, con una lenta* variación en el tiempo), se opta por una descripción en el dominio de la frecuencia ω [15]:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_f \quad (1.1a) \quad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_f - i\omega\mathbf{D} \quad (1.1d)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mathbf{B} \quad (1.1b) \quad \mathbf{D} = \varepsilon_0\varepsilon_r(\omega)\mathbf{E} \quad (1.1e)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.1c) \quad \mathbf{B} = \mu_0\mu_r(\omega)\mathbf{H} \quad (1.1f)$$

Donde \mathbf{E} , \mathbf{H} son las intensidades de campo eléctrico y magnético, respectivamente; \mathbf{B} es la densidad de flujo magnético, \mathbf{D} es el campo de “desplazamiento eléctrico”, $\varepsilon_r(\omega)$, $\mu_r(\omega)$ la permitividad y permeabilidad relativas complejas y ρ_f , \mathbf{J}_f son densidades libres (impresas) de carga y corriente, respectivamente.

1.1.1. Modelo de Materiales para Celdas Solares

Los materiales que se emplean en celdas solares y en aplicaciones de plasmónica son típicamente no magnéticos en el rango de frecuencias de interés[16] (longitudes de onda cercanas al espectro visible). Esto significa específicamente que $\mu_r(\omega) \approx 1$ (la permeabilidad del vacío) en todos los materiales bajo estudio. Por su parte, en el caso típico los dieléctricos y

*Esta noción de “lentitud” surge de comparar la escala de tiempo de respuesta de la celda solar ante un frente de radiación (del orden de picosegundos) respecto a la escala de tiempo en la que varía la radiación incidente (del orden de decenas de minutos)[14].

semiconductores empleados en la fabricación de celdas solares son eléctricamente neutros, y en operación no se aplican corrientes externas a las celdas, hechos tales que fijan $\rho_f = 0$, $\mathbf{J}_f = \mathbf{0}$ [14]. Finalmente, la permitividad relativa compleja $\varepsilon_r(\omega)$ contiene toda la información sobre el comportamiento dispersivo y disipativo del material [15, 17]. Para verlo, considere por un instante la definición primaria del campo de desplazamiento eléctrico \mathbf{D} [15]:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (1.2)$$

\mathbf{P} representa el campo de polarización de las cargas fijas ρ al interior del material[†]. De forma cuantitativa, $\nabla \cdot \mathbf{P} = -\rho$, lo cual en vista de la ecuación de continuidad $\nabla \cdot \mathbf{J} = -\partial\rho/\partial t$ implica que

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \quad (1.3)$$

Si el material es homogéneo, dispersivo y cumple la Ley de Ohm [15], se pueden obtener el campo \mathbf{D} y la corriente total \mathbf{J} a partir de funciones generales ε_r , σ como [17]:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \int dt' \varepsilon_r(t-t') \mathbf{E}(t') = \varepsilon_0 (\varepsilon_r * \mathbf{E})(t) \quad (1.4a)$$

$$\mathbf{J} = \int dt' \sigma(t-t') \mathbf{E}(t') = (\sigma * \mathbf{E})(t) \quad (1.4b)$$

Aplicando (1.3) a (1.4b) e insertando en (1.2):

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \int dt (\sigma * \mathbf{E})(t)$$

Usando (1.4a) al lado izquierdo:

$$\varepsilon_0 (\varepsilon_r * \mathbf{E})(t) = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \int dt (\sigma * \mathbf{E})(t)$$

Aplicando la transformada de Fourier $\hat{\mathcal{F}}$ del dominio del tiempo t al dominio de la frecuencia angular ω se obtiene:

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 \hat{\varepsilon}_r(\omega) \hat{\mathbf{E}}(\omega) &= \varepsilon_0 \hat{\mathbf{E}}(\omega) + \frac{\hat{\sigma}(\omega) \hat{\mathbf{E}}(\omega)}{-i\omega} \\ \hat{\varepsilon}_r(\omega) \hat{\mathbf{E}}(\omega) &= \left(1 + i \frac{\hat{\sigma}(\omega)}{\omega \varepsilon_0} \right) \hat{\mathbf{E}}(\omega) \end{aligned}$$

Identificando los factores del campo eléctrico complejo $\hat{\mathbf{E}}(\omega)$:

$$\hat{\varepsilon}_r(\omega) = 1 + i \frac{\hat{\sigma}(\omega)}{\omega \varepsilon_0} \quad (1.5)$$

En adelante, se omitirán los circunflejos $\hat{}$ en los símbolos, pues se trabajará exclusivamente en el dominio de la frecuencia. El proceso anterior, concluyendo en la identidad (1.5), indica los siguientes hechos acerca de la permitividad relativa compleja $\varepsilon_r(\omega)$:

[†]Más precisamente, \mathbf{P} es el momento dipolar eléctrico por unidad de volumen, generado por la alineación de los dipolos microscópicos con el campo eléctrico. Para correctitud completa, \mathbf{P} debería incluir momentos de orden superior (p.ej. cuadrupolos), pero en la práctica, estos momentos son despreciables [15].

- Incluye la información contenida en la conductividad compleja $\sigma(\omega)$.
- Describe, dentro del rango de frecuencias de validez, todos los efectos de polarización que suceden en el material debido a la presencia de un campo eléctrico externo aplicado.

Por lo anterior, $\varepsilon_r(\omega)$ recibe el nombre de “Función dieléctrica” [15], y caracteriza completamente los materiales que en este trabajo se tratan.

Empleando los hechos anteriores en (1.1), se obtiene:

$$\nabla \cdot (\varepsilon_r(\omega)\mathbf{E}) = \nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (1.6a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu_0\mathbf{H} \quad (1.6b)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon_r(\omega)\mathbf{E} \quad (1.6c)$$

Para el modelado computacional conviene reducir el sistema de ecuaciones tanto como sea posible. En este caso, se resuelve el campo eléctrico \mathbf{E} , eliminando el campo magnético \mathbf{H} :

$$\nabla \cdot (\varepsilon_r(\omega)\mathbf{E}) = \nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (1.7a)$$

$$\mathbf{H} = \frac{-i}{\omega\mu_0} \nabla \times \mathbf{E} \quad (1.7b)$$

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2 \varepsilon_r(\omega)\mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (1.7c)$$

con $k_0^2 = \omega^2\mu_0\varepsilon_0$. (1.7c) es la ecuación vectorial de onda para el campo eléctrico, que describe todos los fenómenos de interacción luz-materia hasta una escala de pocos nanómetros [17], incluidos los efectos plasmónicos.

1.1.2. Condiciones de Frontera

Las ecuaciones (1.7) gobiernan la propagación de ondas electromagnéticas en un dominio. Para poder emplear este modelo en estructuras realistas, es necesario considerar las condiciones de frontera, tanto en las interfaces entre dos subdominios (fronteras interiores) como en la terminación del dominio computacional (fronteras exteriores). Para iniciar, se listan las condiciones de frontera generales[15] entre dos subdominios, etiquetados “1” y “2”:

$$\hat{n} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = 0 \quad (1.8a)$$

$$\hat{n} \cdot (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) = \sigma_s \quad (1.8b)$$

$$\hat{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{K}_s \quad (1.8c)$$

$$\hat{n} \cdot (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) = 0 \quad (1.8d)$$

con \hat{n} el vector normal a la frontera, σ_s una densidad superficial de carga y \mathbf{K}_s una densidad superficial de corriente. Como se expuso en la sección anterior, los materiales empleados en celdas solares no tienen densidades de carga o corriente aplicadas, lo cual en el caso presente hace $\sigma_s = 0$ y $\mathbf{K}_s = \mathbf{0}$. Las condiciones (1.8) aplican para toda frontera (interior o exterior). Sin embargo, existen una serie de casos particulares que se listan a continuación, con el fin de servir como referencia para la implementación de la simulación (ver [18] para una discusión detallada):

- **La frontera con un conductor perfecto (PEC):**

$$\hat{n} \times \mathbf{E} = 0 \quad (1.9)$$

Note que esta es una condición que opera directamente sobre el campo \mathbf{E} . Esta es por tanto una condición de frontera “esencial” o de Dirichlet.

- **La frontera con un conductor imperfecto:**

Si “2” es un conductor imperfecto:

$$\hat{n} \times \nabla \times \mathbf{E} = i \frac{\mu_{r1} k_0}{\eta} \hat{n} \times (\hat{n} \times \mathbf{E}) \quad (1.10)$$

con $\eta = \sqrt{\mu_{r2}/\varepsilon_{r2}}$ la impedancia intrínseca normalizada del conductor imperfecto y $k_0 = c_0 \omega$ el número de onda en el vacío, con c_0 la velocidad de la luz en el vacío. Al ser esta una condición que involucra tanto el campo \mathbf{E} como sus derivadas, es una condición mixta de frontera, que se impone como una condición “natural” o de Neumann[‡].

- **Excitación/Absorción de onda plana en una frontera exterior:**

Sea $\mathcal{E}_{inc}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}\{E_{inc}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}\}$ una onda plana incidente, siendo $\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ con polarización \mathbf{E}_0 y vector de onda \mathbf{k} . La condición que imprime dicha onda en la frontera y también absorbe con baja reflexión ondas dispersadas hacia fuera de la frontera es:

$$\hat{n} \times \nabla \times \mathbf{E} = ik_0 \hat{n} \times \{\hat{n} \times (\mathbf{E}_{inc} - \mathbf{E})\} + \hat{n} \times \nabla \times \mathbf{E}_{inc} \quad (1.11)$$

Al igual que el caso anterior, esta es una condición de frontera mixta.

- **Condiciones de periodicidad Floquet-Bloch:**

Para el estudio de arreglos periódicos de estructuras (“celdas unitarias”), se deben imponer condiciones de periodicidad que permitan a los campos sufrir desfase durante su propagación en el interior de la estructura. Sean Γ_1 y Γ_2 dos fronteras en el dominio que deben satisfacer una condición de periodicidad, con un vector de propagación \mathbf{k} dado. Entonces:

$$\mathbf{E}(\Gamma_1) = \mathbf{E}(\Gamma_2) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.12)$$

Esta es una condición de frontera esencial.

Note que para todos los casos, el campo \mathbf{E} a resolver, sobre el cual se aplican las condiciones de frontera, es el *campo total*, es decir, el campo que se observaría directamente en un experimento.

1.2. Fenómeno de Transporte

El segundo fenómeno se genera en la dinámica de los portadores de carga al interior de la celda solar, que se describe por medio de la ecuación general del transporte [9, 14]:

$$\nabla \left[-D_n \nabla n + n \mu_n \left(\nabla \Phi + \frac{\nabla \chi}{q} + \frac{k_B T}{q} \nabla \ln N_C \right) \right] = \alpha P_s - U \quad (1.13a)$$

$$\nabla \left[-D_p \nabla p + p \mu_p \left(\nabla \Phi + \frac{\nabla \chi}{q} + \frac{k_B T}{q} \nabla \ln N_V + \frac{\nabla E_g}{q} \right) \right] = \alpha P_s - U \quad (1.13b)$$

[‡]Formalmente, las condiciones de frontera de Neumann solo involucran derivadas de la función a resolver. Las condiciones mixtas de frontera son conocidas como condiciones de Robin.

$$\nabla^2\Phi = \frac{q}{\varepsilon}(n - p - (N_d - N_a)) \quad (1.13c)$$

con $\mu_{\{n,p\}}$ las movilidades de las especies portadoras n, p , respectivamente; $D_{\{n,p\}} = \mu_{\{n,p\}}k_B T/q$, $N_{\{C,V\}}$ las densidades de estados en las bandas de Conducción y Valencia; $N_{\{d,a\}}$ las concentraciones de impurezas donoras y aceptoras; E_g el *band gap* de la celda, α el coeficiente de absorción óptica, Φ el potencial electrostático generado, P_s el flujo de potencia de radiación incidente, q la carga elemental, $\varepsilon = \varepsilon_0\varepsilon_r$ la permitividad eléctrica de la celda y U la tasa de pérdida de portadores por recombinaciones Shockley-Read-Hall, radiativa y de Auger. Para una descripción detallada de todos los elementos de este fenómeno, ver [14]; valores numéricos para algunos de los parámetros anteriores se pueden encontrar en [9].

La simulación completa de la celda se construye al acoplar la simulación del fenómeno de transporte con el fenómeno electromagnético al aplicar la identidad:

$$P_s = \left\| \operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{E} \times \mathbf{H}^* \right\} \right\| \quad (1.14)$$

El vector al que se le está tomando la norma de su parte real es el vector de Poynting, que expresa la densidad de potencia radiante del campo electromagnético en el dominio [15]. Por tanto, esta cantidad es una función objetivo a maximizar en todo el volumen activo[§] de la celda.

[§]Se entiende aquí como volumen que es ocupado por los materiales semiconductores propios de la celda, que generan y/o transportan alguna de las dos especies de portadores de carga.

Capítulo 2

Esquema Computacional

La solución de (1.7) requiere para una geometría general un procedimiento de cómputo numérico, el cual exige definir un conjunto finito de variables a calcular, lo cual conduce a una discretización del espacio-tiempo. Esta discretización da lugar a una amplia variedad de opciones a considerar al construir una simulación. A continuación se clasifica dicha variedad como sigue:

2.1. Sumario del Estado del Arte

En las siguientes subsecciones se presentan los sondeos realizados sobre métodos numéricos, paquetes de software de simulación y plataformas de cómputo disponibles, con el fin de contextualizar del desarrollo de este trabajo.

2.1.1. Métodos Numéricos para Ecuaciones

- Por **dimensionalidad** de discretización espacial:
Existen dos opciones: Discretizar solamente las fronteras entre subdominios, o la totalidad de los subdominios. La primera opción tiene como ventaja producir sistemas de ecuaciones de poco tamaño, pero su formulación es difícil de aplicar a geometrías generales con funciones dieléctricas $\epsilon_r(\omega)$ arbitrarias, pues depende de la existencia de una función de Green para cada situación particular [18]. Un ejemplo de este tipo de métodos es el Método de los Momentos (MoM) [18]. Por su parte, la discretización del volumen es de aplicación directa y general, y en contraprestación requiere resolver una cantidad de variables proporcional al volumen de los subdominios. Ejemplos de Métodos son FEM (Elementos Finitos), FD (Diferencias Finitas)[19], RPIM (Interpolación con Bases Radiales)[20] y MRM (Método de Multi-Resolución) [21].
- Por **tipo** de discretización espacial:
También hay dos opciones generales: Puntos con conectividad (Mallas) o sin la misma (Libres de Malla). La generación de puntos sin conectividad es considerablemente más sencilla que con la misma [22]. Adicionalmente, es más sencillo implementar sin mallas simulaciones transitorias donde los puntos se mueven conforme la simulación avanza. Sin embargo, solo hasta años recientes se han desarrollado métodos para Electromagnetismo no basados en mallas, tales como RPIM [20].

2.1.2. Paquetes de Software existentes

Varios de los métodos antes presentados se encuentran implementados en paquetes de software, tanto como soluciones autocontenidas (que incluyen interfaces gráficas) como librerías para desarrollo propio. En la [tabla 2.1](#) se presentan los programas evaluados durante el desarrollo de este trabajo. Teniendo como objetivo hacer un desarrollo para compartir con el resto de la comunidad, se dedicó la gran mayoría del tiempo al estudio de las herramientas de software libre. De entre las listadas, se eligió FeniCS, pues ofreció la mejor relación entre esfuerzo de programación, desempeño, costo computacional y versatilidad. Sin embargo, se recomienda considerar detenidamente la librería deal.II, pues implementa características importantes que FeniCS en el presente no tiene, tales como el preconditionador Geometric Multigrid y mejor soporte para condiciones de frontera periódicas.

2.1.3. Plataformas de Cómputo disponibles

Para la ejecución de las simulaciones con los paquetes libres, la mejor elección para sistema operativo es GNU/Linux, debido a su alta confiabilidad y configurabilidad. En la actualidad se disponen de los siguientes recursos que satisfacen la elección anterior:

- Cluster del Departamento de Física: 8 máquinas de 4 núcleos cada una, con una memoria RAM total de 256 GB.
- Cluster *Reynolds* del Departamento de Ingeniería Mecánica: 8 máquinas de 6 núcleos cada una, con una memoria RAM total de 256 GB.
- Nube de cómputo Amazon Elastic Computing Cloud: Servicio de cómputo bajo demanda, provee varios tipos de máquina que se contratan por horas. Para este trabajo, se emplearon instancias de 32 núcleos con 60 GB de RAM, cada instancia a 2.40 USD/hora. Provee también posibilidad de usar máquinas con GPU de alta especificación (p.ej. Nvidia Tesla M2050), lo cual es una alternativa prometedora para acelerar las simulaciones a un costo significativamente reducido.

2.2. Detalle del desarrollo final

La elección de FeniCS como base del desarrollo implica expresar la solución de (1.7) en términos del Método de Elementos Finitos. Para iniciar, se eligen los elementos de Nedélec de primera clase, de primer a tercer orden de interpolación (esto es un parámetro libre, el cual compromete entre desempeño y calidad de la solución). Diagramas de los mismos se presentan en la [figura 2.1](#). Estos elementos satisfacen automáticamente las condiciones de divergencia (1.7a) de forma local, esto es, individualmente, al interior de cada elemento [18]. También satisfacen las condiciones de frontera (1.8a), (1.8c) de forma automática, pues dos elementos adyacentes comparten componentes que coinciden con las componentes tangenciales del campo \mathbf{E} .

2.2.1. Forma débil

En los paquetes de elementos finitos FeniCS o deal.II se programa la simulación empleando la forma débil del sistema de ecuaciones parciales (PDE) que se requiere resolver. La forma

Tabla 2.1: Programas de simulación evaluados.

Programa	Método	Características
COMSOL 4.2, RF	FEM	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Comercial. Licencia por nodo ▪ Acople con otras ecuaciones. ▪ Escalable, sujeto a licencias disponibles. ▪ <i>Scripting</i> en Java.
HFSS 12	FEM	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Comercial. Licencia por nodo ▪ Exclusivamente ecuaciones Maxwell ▪ <i>Scripting</i> en Visual Basic.
Python	RPIM	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Lenguaje de programación libre, multiplataforma. ▪ Orientado a prototipado rápido ▪ Junto con Numpy/Scipy [23], provee una alternativa a Matlab.
MEEP[24]	FDTD	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Software libre, multiplataforma. ▪ Desarrollado por lab. Ab-initio de MIT. ▪ Exclusivamente ecuaciones Maxwell ▪ Altamente escalable en clusters, grids. ▪ <i>Scripting</i> en Scheme y C++.
B-CALM[25]	FDTD	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Software libre, multiplataforma. ▪ Colaboración académica internacional desde 2008 ▪ Exclusivamente ecuaciones Maxwell ▪ Corre sobre procesadores gráficos (GPU) ▪ <i>Scripting</i> en Matlab.
FeniCS[26]	FEM	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Software libre, multiplataforma. ▪ Colaboración académica internacional desde 2003. ▪ Implementa cualquier ecuación expresable para FEM. ▪ Altamente escalable en clusters, grids. ▪ <i>Scripting</i> en Python y C++.
deal.II[27]	FEM	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Software libre, multiplataforma. ▪ Colaboración académica internacional desde 1999. ▪ Implementa cualquier ecuación expresable para FEM. ▪ Altamente escalable en clusters, grids. ▪ Implementa características como Geometric Multigrid, adaptabilidad <i>hp</i>. ▪ Programación en C++.

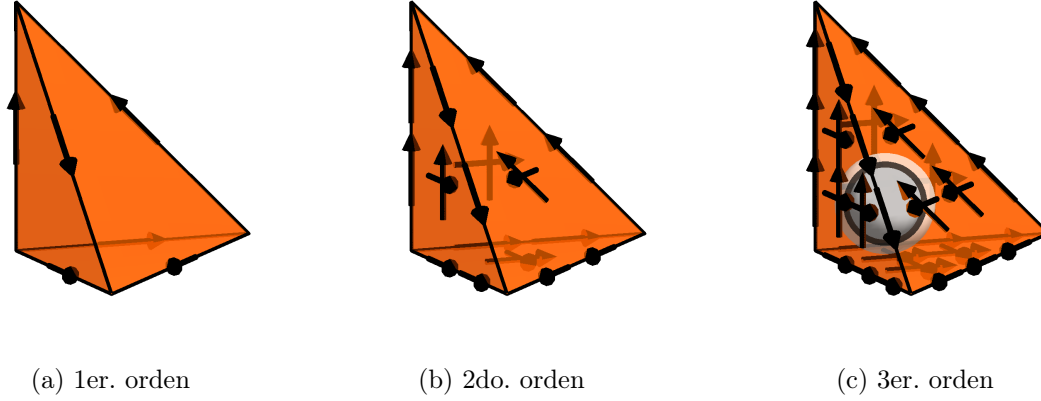


Figura 2.1: Diagramas de los elementos tetraedrales de Nedéléc. Los círculos representan grados de libertad en el interior del volumen del elemento. (Tomado de [26]).

débil asociada a (1.7c) se construye primero eligiendo $\mathbf{E}, \mathbf{v} \in H(\text{curl})$, con \mathbf{v} una función de *Test*. Efectuando la operación de *Test* sobre todo el dominio, se tiene que:

$$\int_{\Omega} \{ \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2 \epsilon_r(\omega) \mathbf{E} \} \cdot \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{0} \cdot \mathbf{v} d\Omega$$

con Ω el dominio de integración, Γ su frontera exterior. Integrando por partes y reorganizando operandos, se obtiene :

$$\int_{\Omega} \nabla \times \mathbf{E} \cdot \nabla \times \mathbf{v} d\Omega + k_0^2 \int_{\Omega} \epsilon_r(\omega, \mathbf{r}) \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \oint_{\Gamma} \hat{n} \times \nabla \times \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} d\Gamma = 0 \quad (2.1)$$

siendo \hat{n} el vector normal a la frontera Γ . Debido a la continuidad automática de las componentes tangenciales entre elementos adyacentes, un conjunto de subdominios $\{\Omega_i\}$ se puede simular de forma natural, simplemente los valores correspondientes de $\epsilon_r(\omega)$ en cada subdominio, haciendo de ésta una función *constante definida a trozos*. Lo anterior se puede expresar como:

$$\epsilon_r(\omega, \mathbf{r}) = \bigcup_i \epsilon_{r,i}(\omega) \mathbf{1}_i(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

con $\mathbf{1}_i(\mathbf{r})$ funciones de “etiquetado” de subdominio, tales que $\mathbf{1}_i(\mathbf{r}) = 1 \forall \mathbf{r} \in \Omega_i$ y $\mathbf{1}_i(\mathbf{r}) = 0 \forall \mathbf{r} \ni \Omega_i$. Los valores de $\epsilon_{r,i}(\omega)$ han sido proveídos por el profesor [Hernando García](#) de la Universidad del Sur de Illinois, en cuyo grupo han recopilado una base experimental de datos de funciones dieléctricas de metales, dieléctricos y semiconductores.

2.2.2. Barrido en Frecuencia

Al optar por un modelo en el dominio de la frecuencia, es necesario efectuar un barrido de valores que cubra el rango de interés, que en este caso, es el espectro visible y el infrarrojo cercano. Por tanto, para una misma estructura se varía el valor de ω durante el barrido, lo cual, al aplicar la discretización basada en los elementos finitos, genera un sistema lineal

dependiente de ω como se muestra a continuación:

$$\underbrace{\int_{\Omega} \nabla \times \mathbf{E} \cdot \nabla \times \mathbf{v} d\Omega + k_0^2 \int_{\Omega} \varepsilon_r(\omega) \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \oint_{\Gamma} f(\mathbf{E}) d\Gamma}_{\mathcal{A}(\omega)\mathbf{E}(\omega)} = \underbrace{\oint_{\Gamma} g(\mathbf{E}_{inc}) d\Gamma}_{\mathbf{b}(\omega)}$$

donde f y g son formas funcionales generadas por la aplicación de condiciones de frontera tales como (1.11). La anterior expresión sugiere que para cada valor de ω se requiere ensamblar la matriz $\mathcal{A}(\omega)$ y el vector $\mathbf{b}(\omega)$. Sin embargo, si se aplica (2.2):

$$\underbrace{\int_{\Omega} \nabla \times \mathbf{E} \cdot \nabla \times \mathbf{v} d\Omega}_{\mathcal{A}_{\text{curl}}\mathbf{E}(\omega)} + \sum_i \varepsilon_{r,i}(\omega) \underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{1}_i(\mathbf{x}) \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} d\Omega}_{\mathcal{A}_{d,i}\mathbf{E}(\omega)} + \underbrace{\oint_{\Gamma} f(\mathbf{E}) d\Gamma}_{\mathcal{A}_{\Gamma}\mathbf{E}(\omega)} = \underbrace{\oint_{\Gamma} g(\mathbf{E}_{inc}) d\Gamma}_{\mathbf{b}(\omega)} \quad (2.3a)$$

$$\underbrace{\left(\mathcal{A}_{\text{curl}} + \sum_i \varepsilon_{r,i}(\omega) \mathcal{A}_{d,i} + \mathcal{A}_{\Gamma} \right)}_{\mathcal{A}(\omega)} \mathbf{E}(\omega) = \mathbf{b}(\omega) \quad (2.3b)$$

La ecuación (2.3b) indica que ensamblar las matrices $\mathcal{A}_{\text{curl}}$, $\mathcal{A}_{d,i}$ y \mathcal{A}_{Γ} una sola vez es suficiente para construir $\mathcal{A}(\omega) \forall \omega$. El vector $\mathbf{b}(\omega)$ sí es necesario construirlo en cada paso, pero el costo de esta operación, comparado con el costo de ensamble de las matrices, es despreciable. El anterior procedimiento requiere que el enmallado sobre el cual se construyen las matrices debe cumplir que sus elementos tengan lados de longitud menor a $\sim \lambda_{\text{mín}}/(5n)$ con $\lambda_{\text{mín}}$ la mínima longitud de onda presente en el dominio y n el índice de refracción del mismo [18]. Por tanto, el enmallado debe ajustarse a la frecuencia máxima $\omega_{\text{máx}}$ que se vaya a computar.

2.2.3. Forma débil de Sistemas de Ecuaciones Parciales

Si bien en este trabajo no se acoplan sistemas de ecuaciones procedentes de distintos modelos físicos, el paquete FeniCS no soporta campos complejos de forma directa. En consecuencia, es necesario entender cómo tratar la descomposición del campo complejo $\mathbf{E}(\omega)$ en sus partes real e imaginaria $\mathbf{E}(\omega) = \mathbf{E}_R(\omega) + i\mathbf{E}_I(\omega)$. Lo anterior genera dos ecuaciones diferenciales parciales, que se combinan en una sola forma débil con un procedimiento que es general para el ensamble de cualquier sistema de ecuaciones diferenciales parciales, y se describe a continuación:

Sean $\mathcal{L}_{\{1,2\}}\mathbf{u}_{\{1,2\}} = \mathbf{b}_{\{1,2\}}$ dos sistemas de ecuaciones diferenciales parciales acopladas (etiquetadas “1” y “2”) en las variables desconocidas $\mathbf{u}_{\{1,2\}}$, con operadores diferenciales $\mathcal{L}_{\{1,2\}}$ y términos de fuente $\mathbf{b}_{\{1,2\}}$. Se construye la variable compuesta:

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

que reúne todas las incógnitas (o “grados de libertad”) del sistema completo. El sistema se puede expresar entonces como:

$$\begin{pmatrix} \mathcal{L}_{11} & \mathcal{L}_{12} \\ \mathcal{L}_{21} & \mathcal{L}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}$$

En el método de Elementos Finitos, la variable \mathbf{u} del sistema formalmente se interpola por medio de funciones de *trial*. Para el ensamble de la forma débil, se usan funciones de *test* representadas por una variable \mathbf{v} que debe ser de la misma dimensionalidad (número de componentes) que la variable \mathbf{u} . Por tanto, se define:

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Y se efectúa la operación de *test* sobre el dominio, tomando el producto interior $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \int \mathbf{v}^T \mathbf{u} d\Omega$:

$$\int_{\Omega} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \mathcal{L}_{11} & \mathcal{L}_{12} \\ \mathcal{L}_{21} & \mathcal{L}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \end{pmatrix} d\Omega = \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} d\Omega$$

$$\langle \mathcal{L}_{11}\mathbf{u}_1 + \mathcal{L}_{12}\mathbf{u}_2, \mathbf{v}_1 \rangle + \langle \mathcal{L}_{21}\mathbf{u}_1 + \mathcal{L}_{22}\mathbf{u}_2, \mathbf{v}_2 \rangle = \langle \mathbf{b}_1, \mathbf{v}_1 \rangle + \langle \mathbf{b}_2, \mathbf{v}_2 \rangle \quad (2.6)$$

Se presenta a continuación el resultado (2.6) aplicado a la descomposición del campo complejo $\mathbf{E}(\omega)$ en sus partes real e imaginaria $\mathbf{E}(\omega) = \mathbf{E}_R(\omega) + i\mathbf{E}_I(\omega)$. Partiendo de (1.7a):

$$\nabla \times \nabla \times (\mathbf{E}_R(\omega) + i\mathbf{E}_I(\omega)) - k_0^2 \varepsilon_r(\omega) (\mathbf{E}_R(\omega) + i\mathbf{E}_I(\omega)) = \mathbf{0}$$

La función dieléctrica $\varepsilon_r(\omega)$ es compleja, por lo que se descompone de forma similar: $\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_{r,R}(\omega) + i\varepsilon_{r,I}(\omega)$:

$$\nabla \times \nabla \times (\mathbf{E}_R(\omega) + i\mathbf{E}_I(\omega)) - k_0^2 (\varepsilon_{r,R}(\omega) + i\varepsilon_{r,I}(\omega)) (\mathbf{E}_R(\omega) + i\mathbf{E}_I(\omega)) = \mathbf{0}$$

Efectuando los productos y factorizando partes reales e imaginarias, se obtienen las siguientes dos ecuaciones:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_R(\omega) - k_0^2 (\varepsilon_{r,R}(\omega) \mathbf{E}_R(\omega) - \varepsilon_{r,I}(\omega) \mathbf{E}_I(\omega)) = \mathbf{0} \quad (2.7a)$$

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_I(\omega) - k_0^2 (\varepsilon_{r,I}(\omega) \mathbf{E}_R(\omega) + \varepsilon_{r,R}(\omega) \mathbf{E}_I(\omega)) = \mathbf{0} \quad (2.7b)$$

Aplicando (2.6) a (2.7):

$$\int_{\Omega} \left\{ \nabla \times \mathbf{E}_R \cdot \nabla \times \mathbf{v}_R - f_R \mathbf{E}_R \cdot \mathbf{v}_R + f_I \mathbf{E}_I \cdot \mathbf{v}_R \right\} d\Omega + \int_{\Gamma} \left\{ (\hat{n} \times \nabla \times \mathbf{E}_R) \cdot \mathbf{v}_R \right\} d\Gamma \quad (2.8)$$

con $f_{\{R,I\}} = k_0^2 \varepsilon_{r,\{R,I\}}$. Las condiciones de frontera deben tratarse del mismo modo que la ecuación (1.7a), separando las componentes $\mathbf{E}_R, \mathbf{E}_I$ del campo eléctrico. Por último, la descomposición de la forma débil en términos independientes de la frecuencia ω aplica de la misma forma para (2.8).

Capítulo 3

Resultados

Se presenta en este capítulo un ejemplo de uso del simulador construido, mostrando las funciones que tiene implementadas actualmente. El resultado del ejemplo se compara con un resultado publicado en la literatura.

3.1. Especificación del programa

El presente es uno de los casos más sencillos donde se evidencia el efecto de los plasmones superficiales en la interacción de una estructura con la radiación incidente. Se hace incidir una onda plana de luz polarizada linealmente a lo largo del eje X, propagándose a lo largo del eje Z, sobre una partícula esférica de Plata de 50 nm de radio. Para hacerlo considere el siguiente código:

```
from PlasmonicsSim import *

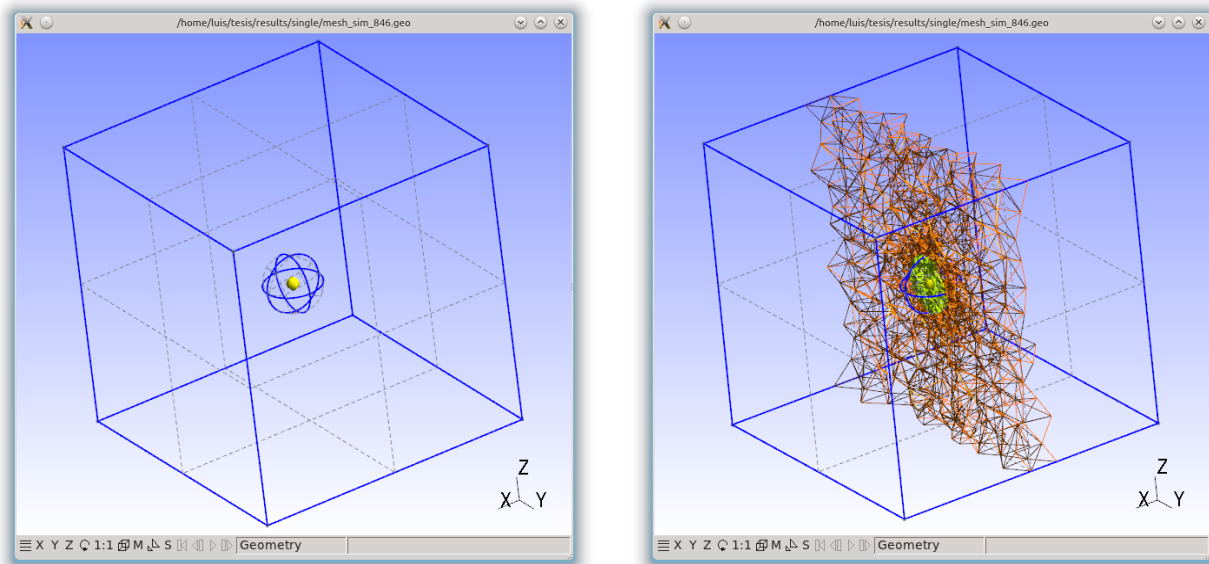
# Unit scale
u_l = 1e-6
world_dimensions = r_[0.5, 0.5, 0.5]
mesh_factor = 0.11

# Excitation wave settings
l_range = [0.4]           # Wavelength sweep range
k_dir = r_[0.0, 0.0, -1.0] # propagation vector
E0     = r_[1.0, 0.0, 0.0] # polarization vector

# Geometry construction
geom = MeshedGeometry(mesh_factor=mesh_factor)
objects = PhysicalDomainList()
objects.add( PhysicalDomain(geom, 'sphere', [0, 0, 0], 0.05, 'Ag') )
objects.add( PhysicalDomain(geom, 'box', -world_dim/2, world_dim, 'Air', main_domain=True) )
geom_data = geom.complete()

fileout = "single_sphere"
boundaries = ('planewave', 'all', E0, k_dir)
DoFrequencySweep(geom_data, boundaries, l_range, fileout)
```

El simulador construido en este trabajo está basado en Python. Este es un lenguaje de programación dinámico, para prototipado rápido de programas y algoritmos. En el código, se importa el módulo `PlasmonicsSim`, que contiene todas las rutinas construidas para la simulación de estructuras. A continuación, se definen un conjunto de variables escalares y vectoriales, que definen las dimensiones geométricas, las formas y materiales de los subdominios a incluir



(a) Geometría generada

(b) Corte transversal del enmallado generado

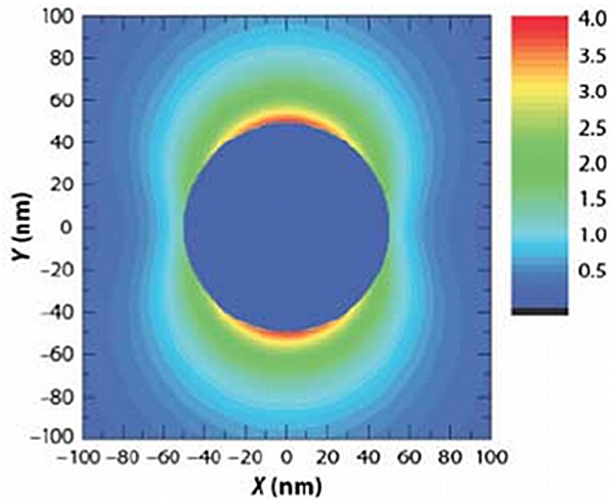
Figura 3.1: Geometría y enmallado construidos para el ejemplo. .

(los `PhysicalDomain`) y el tipo de condiciones de frontera. Finalmente, se especifica un prefijo para los archivos de salida y se invoca la ejecución del barrido en frecuencia. Como primer paso, el código construye el enmallado, cuya resolución es inversamente proporcional al valor de `mesh_factor`. El resultado de esa generación se presenta en la [figura 3.1](#). Estas operaciones se ejecutan en el programa Gmsh [28]. Después el programa procede a efectuar el ensamble de las matrices como aparecen en la ecuación (2.3a). A continuación, se soluciona el sistema lineal para cada valor de ω , que en este ejemplo es solo un valor. Más precisamente, el valor que se especifica es la longitud de onda λ de la radiación incidente, respecto al vacío.

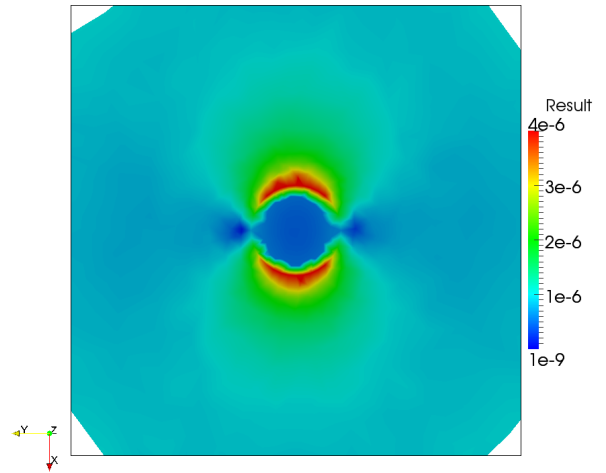
Con los valores mostrados en el código, el sistema resultante contiene 253456 grados de libertad (variables desconocidas). En una máquina de 8 núcleos 3.1 GHz, el ensamble de las matrices se tarda 32 segundos, y la solución, que procede por medio de un solucionador directo por factorización LU (MUMPS), tarda 99 segundos. Al efectuar el barrido en frecuencia, cada paso adicional del barrido solamente cuesta otros 99 segundos de ejecución. Durante la solución del sistema lineal (es decir, durante la “inversión” de la matriz) el programa ocupa hasta 2.5 GB en memoria RAM, los cuales libera al finalizar la solución. Finalmente, el tamaño del archivo de solución para cada uno de los pasos del barrido es de ~ 5.6 MB.

3.2. Discusión

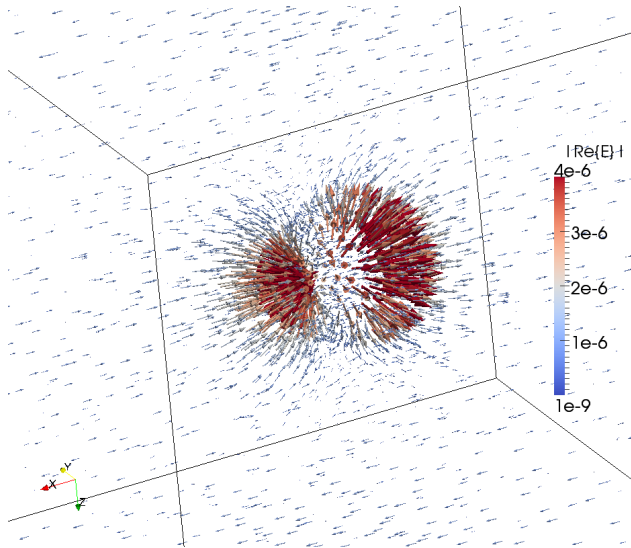
En la introducción se mencionaba que los plasmones superficiales son oscilaciones *longitudinales* acopladas al campo electromagnético. Por tanto, el campo dispersado en la dirección de incidencia de la luz debería tender a ser nulo. En la [figura 3.2a](#) se observa un corte transversal de la respuesta a una onda plana polarizada a lo largo del eje Y, como se expone en [29]. Siendo la polarización de la onda incidente y la magnitud de la respuesta las únicas discrepancias entre dicha referencia y esta simulación, se observa un comportamiento cuantitativamente correcto, donde se aprecian las siguientes características:



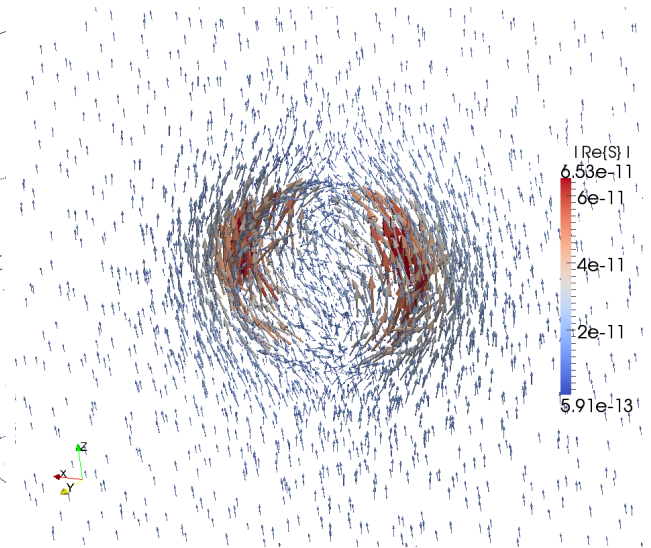
(a) Resultado $|\text{Re}\{\mathbf{E}\}|$ de [29]



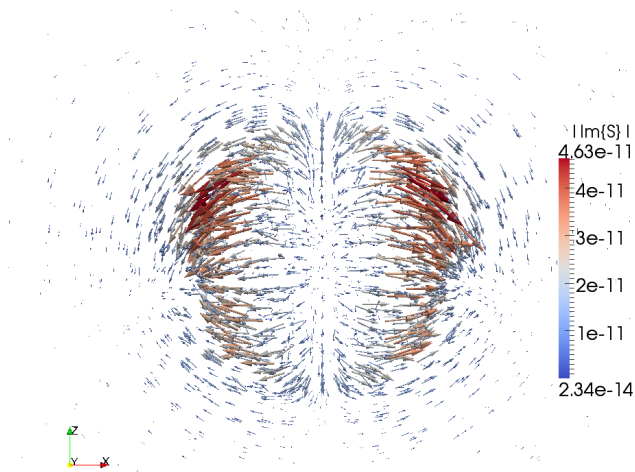
(b) Corte $|\text{Re}\{\mathbf{E}\}|$ en plano xy



(c) Vectores muestreados de $\text{Re}\{\mathbf{E}\}$



(d) Vectores muestreados de $\text{Re}\{\mathbf{S}\}$



(e) Vectores muestreados de $\text{Im}\{\mathbf{S}\}$

Figura 3.2: Visualización de los campos del ejemplo, para una onda plana de $\lambda = 514$ nm. (Las visualizaciones se generaron con *Paraview*)

- La magnitud del campo eléctrico se incrementa localmente hasta un factor de 4.
- La respuesta de la nanopartícula ante la radiación incidente de 514 nm es dipolar, como se ha observado experimentalmente [16, 17].
- Los antinodos (o *lobes* en inglés) de la respuesta dipolar se orientan longitudinalmente respecto a la polarización de la onda.

La discrepancia en los órdenes de magnitud entre la referencia y esta simulación se debe a que, con el fin de evitar problemas de condicionamiento numérico en la construcción de las matrices de la simulación, se emplean unidades normalizadas en micrómetros. Al fijar la magnitud del campo eléctrico incidente como 1 V/m, se obtiene el valor escalado para simulación de 10^{-6} [V/ μ m].

Como se mencionó en la sección del modelo de transporte, la variable de salida para la simulación de los portadores de carga es el flujo de potencia electromagnética P_s . Para ello, se necesita calcular, como un paso de preprocesamiento, el vector de Poynting \mathbf{S} . Las partes real e imaginaria del mismo se presentan en las figuras 3.2d y 3.2e, respectivamente. La parte real del vector de Poynting manifiesta los procesos de transporte y disipación de energía. Por su parte, la parte imaginaria da cuenta de los procesos reactivos, de almacenamiento persistente de energía [15]. Como puede verse en las figuras, en la vecindad de la nanoesfera se presenta una interacción de la misma con la radiación incidente, lo cual genera el campo dispersado por la misma. Al alejarse de la esfera, la radiación incidente se propaga sin perturbación, como se evidencia en la 3.2d, que los vectores, lejos de la esfera, siguen uniformemente la dirección de propagación de la onda plana incidente, mientras que en la figura 3.2e no hay evidencia de la onda incidente, sino de la oscilación del plasmon superficial en la esfera, lo cual es consistente con la descripción conceptual de las componentes del vector de Poynting.

Comentarios Finales

Se ha construido una herramienta libre de simulación electromagnética en 3D, con miras a introducir en la Universidad el diseño de nanoestructuras plasmónicas para celdas solares y otras aplicaciones. La herramienta es altamente escalable, no tiene restricciones de licencia o instalación de tipo alguno, e implementa de forma automática las operaciones requeridas para efectuar el cálculo de los campos electromagnéticos al interior de una estructura.

Como vías de desarrollo continuado, se prevee crear una distribución de esta herramienta para instalar en el futuro espejo local del sistema NanoHub, donado por la Universidad de Purdue. Esto permitiría a investigadores de todo el país acercarse al diseño en plasmónica sin afrontar los altos costos de licencias de paquetes de simulación comerciales. Sin embargo, al igual que con dichos paquetes comerciales, se requiere un nivel básico de familiaridad con el método de simulación, para poder entender los resultados que arroja y usarlos de la mejor manera. Lo anterior sugiere hacer un énfasis mayor en la educación de futuros ingenieros de diseño sobre métodos numéricos, en particular el método de Elementos Finitos, aquí empleado.

En el aspecto técnico de la herramienta, se pueden llevar a cabo las siguientes actividades para extender su utilidad:

- Implementar más primitivos geométricos en el código, tales como romboides, conos, cilindros.
- Explorar métodos para barrido óptimo en frecuencia de las estructuras simuladas, con el fin de evitar la redundancia en las operaciones de ensamble de matrices, y potencialmente, las operaciones de inversión de las mismas.
- Implementar métodos de refinamiento adaptativo, con el fin de obtener la mejor relación exactitud/desempeño en las simulaciones.

Bibliografía

- [1] REN21, *Renewables 2010 Global Status Report*, D. G. f. T. Z. G. G. , Ed. Paris: REN21 Secretariat., 2010. [Online]. Available: http://www.ren21.net/Portals/97/documents/GSR/REN21_GSR_2010_full_revisedSept2010.pdf
- [2] . Z. W. K. S. W. Bates, B. C. and E. J. P. Palutikof, *IPCC Technical Paper VI*. Geneva: IPCC Secretariat, 2008. [Online]. Available: http://www.ipcc.ch/publications_and_data/_climate_change_and_water.htm
- [3] H. a. Atwater and A. Polman, “Plasmonics for improved photovoltaic devices.” *Nature materials*, vol. 9, no. 3, pp. 205–13, mar 2010. [Online]. Available: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/20168344>
- [4] M. L. Brongersma and V. M. Shalaev, “The case for Plasmonics,” *Science*, vol. 328, no. 5977, p. 440, 2010. [Online]. Available: <http://www.sciencemag.org/content/328/5977/440.short>
- [5] V. E. Ferry, J. N. Munday, and H. a. Atwater, “Design considerations for plasmonic photovoltaics,” *Advanced materials (Deerfield Beach, Fla.)*, vol. 22, no. 43, pp. 4794–808, nov 2010. [Online]. Available: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/20814916>
- [6] V. E. Ferry, M. a. Verschuuren, H. B. T. Li, E. Verhagen, R. J. Walters, R. E. I. Schropp, H. a. Atwater, and A. Polman, “Light trapping in ultrathin plasmonic solar cells,” pp. –237, jun 2010. [Online]. Available: <http://www.opticsinfobase.org/abstract.cfm?URI=oe-18-S2-A237>
- [7] W. Warrick, R. Kappera, and M. Tayahi, “Enhanced optical absorption in thin film solar cells by surface plasmons,” in *Photonics (ICP), 2010 International Conference on*. IEEE, 2010, pp. 1–5. [Online]. Available: http://ieeexplore.ieee.org/xpls/abs_all.jsp?arnumber=5604417
- [8] I. Diukman and M. Orenstein, “How front side plasmonic nanostructures enhance solar cell efficiency,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 95, no. 9, pp. 2628–2631, jun 2011. [Online]. Available: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0927024811002765>
- [9] X. Li, N. P. Hylton, V. Giannini, K.-H. Lee, N. J. Ekins-Daukes, and S. A. Maier, “Bridging electromagnetic and carrier transport calculations for three-dimensional modelling of plasmonic solar cells,” *Opt. Express*, vol. 19, no. S4, p. 888, Jul 2011. [Online]. Available: <http://www.opticsexpress.org/abstract.cfm?URI=oe-19-104-A888>

- [10] S. De, P. J. King, P. E. Lyons, U. Khan, and J. N. Coleman, “Size effects and the problem with percolation in nanostructured transparent conductors,” *ACS Nano*, vol. 4, no. 12, pp. 7064–7072, 2010. [Online]. Available: <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/nn1025803>
- [11] R. M. Briggs, J. Grandidier, S. P. Burgos, E. Feigenbaum, and H. a. Atwater, “Efficient Coupling between Dielectric-Loaded Plasmonic and Silicon Photonic Waveguides.” *Nano letters*, pp. 4851–4857, oct 2010. [Online]. Available: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21028908>
- [12] J. N. Munday and H. a. Atwater, “Large integrated absorption enhancement in plasmonic solar cells by combining metallic gratings and antireflection coatings.” *Nano letters*, vol. 11, no. 6, pp. 2195–201, jun 2011. [Online]. Available: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/20945845>
- [13] I. M. Pryce, D. D. Koleske, A. J. Fischer, and H. a. Atwater, “Plasmonic nanoparticle enhanced photocurrent in GaN/InGaN/GaN quantum well solar cells,” *Applied Physics Letters*, vol. 96, no. 15, p. 153501, 2010. [Online]. Available: <http://link.aip.org/link/APPLAB/v96/i15/p153501/s1&Agg=doi>
- [14] J. Nelson, *The Physics of Solar Cells*, 1st ed. Imperial College Press, Sep. 2003.
- [15] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd. ed., Wiley, Ed. Wiley, 1999.
- [16] S. Pillai and M. Green, “Plasmonics for photovoltaic applications,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 94, no. 9, pp. 1481 – 1486, 2010, pVSEC 18. [Online]. Available: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927024810001005>
- [17] S. A. Maier, *Plasmonics: Fundamentals and Applications*, 1st ed. Springer, Mayo 2007. [Online]. Available: <http://www.amazon.com/exec/obidos/redirect?tag=citeulike07-20&path=ASIN/0387331506>
- [18] J. Jin, *The Finite Element Method in Electromagnetics*, 2nd ed. Wiley, 2002. [Online]. Available: <http://www.worldcat.org/isbn/9780471438182>
- [19] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, 2nd ed. Artech House Publishers, jun 2000.
- [20] T. Kaufmann, “The Meshless Radial Point Interpolation Method for Time-domain Electromagnetics,” Ph.D. dissertation, ETH Zurich, 2011.
- [21] N. A. Bushyager and M. M. Tentzeris, *MRTD (Multi Resolution Time Domain) Method in Electromagnetics*, 1st ed., M. . Claypool, Ed. Morgan & Claypool, 2005.
- [22] T. Joe F., *Handbook of Grid Generation*, 1st ed., T. Joe F., B. Soni, and N. Wheelerhill, Eds. CRC Press, 1999.
- [23] E. Jones, T. Oliphant, P. Peterson *et al.*, “SciPy: Open source scientific tools for Python,” 2001–. [Online]. Available: <http://www.scipy.org/>

- [24] A. F. Oskooi, D. Roundy, M. Ibanescu, P. Bermel, J. D. Joannopoulos, and S. G. Johnson, “MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method,” *Computer Physics Communications*, vol. 181, pp. 687–702, January 2010.
- [25] P. Wahl, D.-S. Ly-Gagnon, C. Debaes, D. A. B. Miller, and H. Thienpont, “B-CALM: An open-source GPU-based 3D-FDTD with multi-pole dispersion for plasmonics,” *Optical and Quantum Electronics*, pp. 1–6, Feb. 2012. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1007/s11082-012-9558-z>
- [26] A. Logg, K.-A. Mardal, G. N. Wells *et al.*, *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*. Springer, 2012.
- [27] W. Bangerth, R. Hartmann, and G. Kanschat, “deal.II — a general-purpose object-oriented finite element library,” *ACM Trans. Math. Softw.*, vol. 33, no. 4.
- [28] C. Geuzaine and J.-F. Remacle, *Gmsh Reference Manual*, 1st ed., Aug. 2003. [Online]. Available: <http://www.geuz.org/gmsh>
- [29] Y. Wang, E. W. Plummer, and K. Kempa, “Foundations of plasmonics,” *Advances in Physics*, vol. 60, no. 5, pp. 799–898, 2011. [Online]. Available: <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00018732.2011.621320>



NIT: 860.007.386-1

**SISTEMA DE BIBLIOTECAS
IDENTIFICACIÓN TRABAJO DE GRADO**

 FECHA DE ELABORACIÓN
 DD MM AAAA
 21 06 2012
1. IDENTIFICACIÓN AUTOR(ES) DEL TRABAJO DE GRADO

CÓDIGO	DOCUMENTO DE IDENTIDAD		APELLIDOS	NOMBRES	CORREO ELECTRÓNICO
	TIPO	NÚMERO			
200310778	CC <input type="checkbox"/>	1010169306	Linares García	Luis Emiro	l-linare@uniandes.edu.co
	CC <input type="checkbox"/>				
	CC <input type="checkbox"/>				
	CC <input type="checkbox"/>				
	CC <input type="checkbox"/>				
	CC <input type="checkbox"/>				

PROGRAMA **Maestría** FACULTAD **Facultad de Ingeniería** DEPARTAMENTO **Departamento de Ingeniería Eléctrica y Electrónica** **ENTREGÓ FORMATO:**

SB-10 "Entrega trabajo de grado y autorización de uso a favor de la Universidad de los Andes"

Documento con el cual, el autor permite que su trabajo sea utilizado por la Universidad, para fines de consulta y de mención en sus catálogos bibliográficos, tanto físicos como en línea.

1.1 IDENTIFICACIÓN DE TRABAJO DE GRADO PARA DOBLE TITULACIÓNPROGRAMA **No Aplica** FACULTAD **No Aplica** DEPARTAMENTO **No Aplica** **TESIS PARA DOBLE TITULACIÓN:**

Si el trabajo de grado presentado aplica para obtener dos (2) titulaciones, por favor marque esta casilla y diligencie la información de esta sección.

2. INFORMACIÓN GENERAL DEL TRABAJO DE GRADO**TÍTULO DEL TRABAJO DE GRADO:**

Optimización de Celdas Solares usando Nano-estructuras Plasmónicas

DESCRIPCIÓN FÍSICA

Número de páginas:

Ilustraciones:

MATERIAL ACOMPAÑANTE (Cantidad):

Casetes Audio: 0

Casetes Video: 0

Disquetes:

Discos compactos:

Diapositivas:

Otros: ¿Cuáles?

***RESUMEN DEL TRABAJO DE GRADO:**

Se presenta un simulador 3D para las ecuaciones de Maxwell de Electromagnetismo aplicado a la optimización de celdas solares. El simulador es un software libre y altamente escalable que permite exploración masiva en paralelo del espacio de parámetros de construcción y características, y presenta casos de aplicación del mismo.

OBJETIVOS DEL TRABAJO DE GRADO:

Construir una herramienta de optimización de celdas solares inorgánicas con nanoestructuras plasmónicas.
Establecer el Estado del Arte en Plasmónica para celdas solares inorgánicas.

METODOLOGÍA DEL TRABAJO DE GRADO:

Luego de hacer un sondeo en la literatura, se identificaron métodos de simulación a evaluar, del cual se eligió este, empleando software libre, se construyó el simulador, que se validó con casos de estudio reportados en la literatura.

CONCLUSIONES DEL TRABAJO DE GRADO:

El uso de Plasmónica para celdas solares inorgánicas promete ser un método efectivo para permitir un uso extendido delgada al reducir su costo. Una búsqueda amplia del espacio de parámetros de optimización permitirá obtener material más bajo, lo cual puede lograrse al extender la librería de geometrías disponibles en el simulador.

*PALABRAS CLAVES (TEMAS) DEL TRABAJO DE GRADO:

Celdas solares, Plasmónica, Método de Elementos Finitos, Ecuaciones de Maxwell, Electromagnetismo

ACUERDOS DE CONFIDENCIALIDAD: NO TIENE ACUERDO(S) TIENE ACUERDO(S)

Si selecciona tener acuerdo de confidencialidad, por favor diligencie el siguiente cuadro:

Persona natural o jurídica	Desde				Hasta	
	DD	MM	AAAA	DD	MM	AAAA

3. FIRMAS

AUTORES (Nombre completo)	*FIRMAS
Luis Emiro Linares García	<i>Luis Emiro Linares García</i>

DIRECTORES / ASESORES (Nombre completo)	*FIRMAS
ALBA SU(A)	<i>Alba Su(A)</i>

JURADO / LECTOR (Nombre completo)	*FIRMAS
Grigory Ibrahim Massy	<i>Grigory Ibrahim Massy</i>
Angela S. Camacho B.	<i>Angela S. Camacho B.</i>

Las firmas de Autor y Director/Asesor son obligatorias. Si tiene inconvenientes con el registro de la firma del Jurado/Lector, deberá tramitar ante la respectiva Facultad la autorización para registrar las firmas de pares o un sello que justifique la ausencia de la firma faltante.

SB-09

[Verificar Información](#) [Imprimir](#)