



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS



Facultad de Ciencias
Químicas e Ingeniería

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS E INGENIERÍA**

**ESTUDIO DFT DE LA PEROVSKITA BASNO_3 PARA
APLICACIONES OPTO-ELÉCTRICAS Y CELDAS SOLARES**

**TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRÍA EN INGENIERÍA ELÉCTRICA ELECTRÓNICA**

**PRESENTA Y DEFIENDE
FRANCISCO JAVIER MARTINEZ FABIAN**

**DIRECTOR
DR. ZAKARYAA ZARHRI**

**CO-DIRECTOR
DR. MARIO ACOSTA FLORES**

FECHA:01-05-2026

Contenido

I Resumen.....	6
II Agradecimientos.....	7
III Dedicatoria.....	8
IV Índice de Figuras.....	9
V Índice de tablas.....	11
VI Abreviaciones.	12
Capítulo 1: Protocolo.	13
1.1 Antecedentes.	14
Figura_11 Diagrama esquemático de una celda solar bicapa.....	15
1.2 Planteamiento del problema	16
Hipotesis.....	16
1.3 Objetivo general	17
1.3.2 Objetivos específicos.....	17
Justificación.....	18
Alcance y limitaciones.	18
Metología	19
Capítulo 2: Marco teórico.....	21
Celdas fotovoltaicas	22
Figura 2.1 conexión básica del panel solar.....	23
Comparativa de paneles solares.	23
Paneles solares monocristalinos.	23
Figura 2.2 Panel solar monocristalino.	24
Células solares de película delgada.	24

Figura_2.3 Células solares de película fina	25
Celdas de Hetero unión con una película delgada intrínseca (HIT).....	25
Figura_2.4 Diagrama esquemático celda tipo HIT	25
Celdas de seleniuro de cobre, indio, galio (CIGS).....	26
Figura_2.5 Diagrama esquemático de una celda CIGS.....	26
Celda de silicio amorfo.....	26
Figura_2.6 Estructura esquemática de una celda de silicio amorfo	27
Celdas de telurio de cadmio	27
Figura_2.7 Estructura de la celda de CdTe	28
Ondas electromagnéticas.....	29
Figura_2.8 Representación de una onda electromagnética.....	29
Figura_2.9 Espectro electromagnético completo.....	30
Tabla_2.1 Longitudes de onda correspondientes a los colores del arco iris.....	30
El efecto foto eléctrico y el efecto del fotón.....	31
Espectro de líneas, niveles de energía y emisión de fotones.....	31
Figura_2.10 Espectro de luz continuo y espectro de líneas emitido por un gas.....	31
2.3.5 Absorción de la luz.....	32
Figura_2.11 Proceso de absorción del fotón cuando excita un electrón.....	32
2.3.6 Refracción.....	33
Figura_2.12 Refracción.....	33
2.3.7 Reflexión.....	34
Figura_2.13 Reflexión.....	34
2.3.8 Transmisión.....	35
2.3.9 Brecha de banda – óptica (bandgap) T_{auc}	35
Figura_2.15 Banda prohibida.....	35

TCO.....	36
Capítulo 3: Metodología.....	38
Física computacional	39
Simulación Ab - initio	39
Teoría funcional de la densidad (DFT)	40
Wien2k.....	41
Figura_3.1 Logotipo Wien2K.....	41
Figura_3.2 Generar un archivo en Wien2k.....	43
Visualización con con XCrysDen.....	44
Volumen de celda unitaria.....	61
Dopaje del material.	49
Capítulo 4: Resultados y Análisis.....	50
4.1 Óxido de Bario y Estaño.....	51
4.2 Estructura cristalina de BaSnO ₃	51
4.3 Estructura de banda.....	52
4.4 Densidad electrónica.....	53
4.5 Densidad de estados totales (DOS).....	55
4.6 Coeficiente de absorción	57
4.7 Refracción	59
4.8 Reflexión	61
4.9 Transmitancia	63
4.10 Banda prohibida (Tauc).....	65
4.11 Super celda 4x2x2 BaSnO ₃ dopada con flúor (F).....	68
Conclusión.....	70
Referencias.....	72

Resumen:

En los próximos años, la crisis energética mundial se intensificará de manera acelerada. La contaminación ambiental, el uso desmedido de combustibles fósiles y la sobreexplotación de los recursos petroleros tendrán consecuencias graves si no se adoptan medidas urgentes para revertir esta situación. Frente a este panorama, la industria fotovoltaica ha mostrado avances notables durante la última década, logrando mejoras significativas en el desempeño de las celdas solares, con eficiencias cercanas al 50 % bajo condiciones de laboratorio. Asimismo, la comercialización y disponibilidad de estas tecnologías se ha incrementado, lo que ha permitido un mayor acceso y su integración progresiva en la vida cotidiana de la sociedad.

El avance de las celdas solares está estrechamente vinculado al progreso en la ciencia de los materiales. La investigación y el desarrollo de materiales con propiedades físicas específicas han permitido la creación de sistemas innovadores y cada vez más eficientes para la captación de energía solar. No obstante, resulta esencial lograr un equilibrio entre el desempeño de estos materiales, su abundancia en la naturaleza y la facilidad de su síntesis y caracterización, con el fin de garantizar una adopción tecnológica amplia, viable y sostenible a largo plazo.

Los óxidos conductores transparentes (TCOs) constituyen componentes fundamentales en prácticamente todas las tecnologías solares, siendo el óxido de indio-estaño (ITO) el material más ampliamente empleado. Sin embargo, su toxicidad y la limitada disponibilidad del indio han motivado la búsqueda y el desarrollo de alternativas más sostenibles, eficientes y abundantes, tanto para aplicaciones en tecnologías solares como en dispositivos optoelectrónicos en general.

Antes de incorporar un nuevo compuesto en una celda solar, es indispensable llevar a cabo estudios exhaustivos que permitan evaluar de manera rigurosa sus propiedades y su viabilidad tecnológica. En este sentido, los análisis basados en cálculos de primeros principios, implementados mediante software especializado, se han consolidado como herramientas altamente precisas para la predicción de las propiedades electrónicas, estructurales y ópticas de los materiales, contribuyendo a una comprensión más profunda de los fenómenos atómicos que gobiernan su comportamiento.

Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimiento a mi comité de jurado, por introducirme en este fascinante mundo de la física cuántica, por confiar en mis capacidades incluso más de lo que yo mismo lo hacía, y por ofrecerme su apoyo siempre que lo necesité, por compartir conocimientos que fueron fundamentales para el desarrollo de este trabajo. gracias por inspirarme y por guiarme al apasionante mundo de la investigación científica.

Agradezco a la Maestría en Ingeniería Eléctrica y Electrónica su paso es importante en mi formación profesional y representa un privilegio que valoro profundamente. Agradezco la confianza depositada en mí y el apoyo constante para llevar a cabo esta nueva etapa de aprendizaje y crecimiento.

Deseo expresar mi más profundo agradecimiento a mis padres Saúl Martínez y Ma del Rocío Fabian por brindarme apoyo incondicional, a lo largo de mis estudios de posgrado en Ingeniería Eléctrica y Electrónica. Su sacrificio, comprensión y motivación constante, aunque en un principio no estaban de acuerdo, han sido pieza fundamental para que pueda alcanzar esta importante meta en mi formación profesional. Agradezco a mi hermana Marlen Martínez que fue parte del proceso también para que esto fuera posible.

A mi novia Janet De la Rosa a ella le agradezco el amor, la paciencia y la comprensión en cada paso de esta investigación, así como el aliento constante que me ha dado para no darme por vencido en los momentos difíciles. Gracias por creer en mí, por ser fuente de inspiración y por recordarme que el esfuerzo tiene sentido cuando se comparte con alguien tan importante en la vida.

Dedicatoria

Esta tesis va dedicada, en primer lugar, a mis padres, Saúl Martínez y María del Rocío Fabián, quienes han sido el pilar más importante en mi formación personal y profesional. A ellos les agradezco el amor incondicional, el apoyo constante y el sacrificio que han realizado para que yo pueda alcanzar esta meta tan importante en mi vida. Gracias por creer en mí, por alentarme en cada paso y por ser el ejemplo de esfuerzo, honradez y dedicación que me inspira a dar lo mejor de mí en todo lo que emprenda. Esta investigación es el fruto de sus sueños, de sus desvelos y de sus oraciones, y sin ellos nada habría sido posible. Deseo que esta maestría sea el inicio de nuevos éxitos, en honor a ustedes, que son la razón más grande de todos mis sueños. **¡Mil gracias, papá Saúl Martínez y mamá Rocío Fabian, por ser la luz en el camino hacia el futuro!**

Índice de Figuras

Figura 1.1 Diagrama esquemático de una celda solar bicapa	15
Figura 2.1 Conexión básica del panel solar	23
Figura 2.2 Paneles solar monocristalino	24
Figura 2.3 Células solares de película fina	25
Figura 2.4 Diagrama esquemático celda tipo HIT	25
Figura 2.5 Diagrama esquemático de una celda CIGS	26
Figura 2.6 Estructura esquemática de una celda de silicio amorfo	27
Figura 2.7 Estructura de la celda de CdTe	28
Figura 2.8 Representación de una onda electromagnética	28
Figura 2.9 Espectro electromagnético completo	30
Figura 2.10 Espectro de luz continuo y espectro de líneas emitido por un gas	31
Figura 2.11 Proceso de absorción de un fotón cuando excita un electrón	32
Figura 2.12 Refracción	33
Figura 2.13 Reflexión	34
Figura 2.14 Transmisión	35
Figura 2.15 Banda prohibida	36
Figura 3.1 Logotipo Wien2k	41
Figura 3.2 Generar un archivo en WIEN2k	43
Figura 3.3 Estructura $BaSnO_3$ dopada con flúor	44
Figura 3.4 Simetría de la celda	45
Figura 3.5 Densidad inicial	46
Figura 3.6 Carpetas de extracción de datos	46
Figura 3.7 Datos de resultado de dopaje del 4% de flúor	47
Figura 3.8 Interfaz de software OriginPro2024	48
Figura 4.1 Estructura cristalina (celda unitaria) de $BaSnO_3$	51
Figura 4.2 Estructura de banda	52
Figura 4.3 Densidad electrónica del (a) $BaSnO_3$ puro y (b) dopado con %12 de F (c) La estructura en diferente ángulo	53
Figura 4.4 Densidad de estados totales	55
Figura 4.5 Coeficiente de absorción	57
Figura 4.6 Refracción	59
Figura 4.7 Reflexión	61
Figura 4.8 Transmitancia	63
Figura 4.9 Banda prohibida	65
Figura 4.10 Super celda	68

Índice de tablas

Tabla 2.1 Longitudes de onda correspondientes a los colores del arcoíris-----	30
Tabla 3.1 Ubicación específica de cada átomo -----	49
Tabla 4.1 Comparativa de Transmitancia Máxima según el Nivel de Dopaje con Flúor -----	64
Tabla 4.2 Banda prohibida (band gap) -----	66

Índice de abreviaciones

TCO: Transparent Conductive Oxide

TCO: Óxido Conductor Transparente.

ITO: Indium Tin Oxide.

ITO: Óxido de Indio y Estaño.

DOS: Density of States.

DOS: Densidad de los Estados.

DFT: Density Functional Theory

DFT: Teoría del Funcional de la Densidad.

HIT:Heterojunction with Intrinsic Thin layer.

HIT: Celdas de hetero unión con una película delgada intrínseca.

CIGS: Copper Indium Gallium Selenide.

CIGS: Celdas de Seleniuro de Cobre, indio, Galio.

FTO:Fluorine-doped Tin Oxide.

FTO: Óxido de Estaño y Flúor.

AZO:Aluminum-doped Zinc Oxide

AZO: Óxido de Zinc y Aluminio.

DSSCs:Dye-Sensitized Solar Cells

DSSCs: Celdas sensibilizadas con colorantes.

Capítulo 1: Protocolo

Antecedentes

El estudio de la perovskita se remonta al siglo XIX, cuando este mineral fue identificado por el geólogo ruso Lev Perovski, de quien deriva su nombre [1]. Sin embargo, fue a partir de la década de 1950 cuando se iniciaron investigaciones sistemáticas sobre las propiedades físicas y las posibles aplicaciones de los materiales con estructura tipo perovskita, especialmente en el campo de la ciencia de los materiales y la física del estado sólido. Con el paso del tiempo, el interés por estos compuestos ha crecido de manera considerable debido a sus notables propiedades ópticas y eléctricas. En particular, su aplicación en celdas solares generó un renovado impulso a partir de 2009, cuando se demostró experimentalmente el alto potencial fotovoltaico de las perovskitas híbridas. Desde entonces, estos materiales han adquirido una relevancia central en la investigación científica, dando lugar a numerosos estudios orientados a la optimización de su desempeño mediante la modificación de su composición química y estructura cristalina [2].

En la actualidad, el aprovechamiento de las energías renovables ha cobrado una relevancia estratégica, destacando especialmente la energía fotovoltaica como una de las tecnologías más prometedoras para la generación de electricidad limpia. Los sistemas fotovoltaicos se basan en paneles solares compuestos por múltiples capas funcionales, cada una con un papel específico en la conversión de la radiación solar en energía eléctrica. En este contexto, el presente trabajo se enfoca en la capa frontal del panel solar, conocida como óxido conductor transparente (TCO). Los óxidos conductores transparentes se distinguen por combinar una alta transmitancia en el rango de la luz visible con una elevada conductividad eléctrica, características que los posicionan como materiales esenciales en aplicaciones fotovoltaicas y optoelectrónicas [3].

Existe una creciente necesidad a nivel mundial de generar energía a partir de fuentes renovables, en particular mediante el aprovechamiento de la energía solar. La investigación científica, de manera general, se ha enfocado en el desarrollo de energías limpias, entre las cuales destacan las celdas fotovoltaicas. En su representación más básica, estas celdas están constituidas por diferentes capas funcionales.

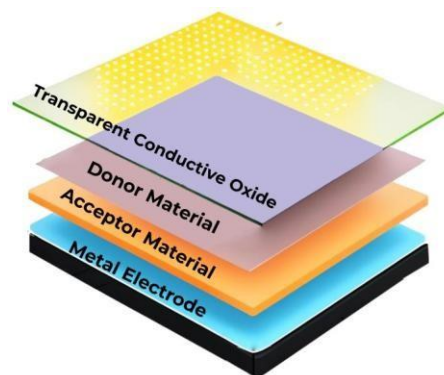
Una de las capas más importantes es la capa frontal, la cual se encuentra en contacto directo con la radiación solar y cumple la función de permitir la transmisión de la luz y la conducción de la electricidad. Esta capa se conoce como óxido conductor transparente (TCO, por sus siglas en inglés).

Los TCO comúnmente utilizados están basados en materiales que contienen indio y estaño, siendo el óxido de indio y estaño (ITO) uno de los más empleados [4]. Sin embargo, estos materiales presentan desventajas significativas, como su toxicidad, la escasez del indio en la corteza terrestre y su elevado costo. Por ello, en este trabajo se busca un material alternativo que pueda sustituir al ITO. Para que un nuevo material sea considerado un TCO, debe cumplir con determinadas propiedades ópticas y eléctricas.

Un panel solar generalmente incorpora una capa de óxido conductor transparente (TCO),

cuya función principal es permitir una alta transmisión de la radiación electromagnética proveniente del Sol hacia el interior del dispositivo, al mismo tiempo que facilita la conducción eléctrica. Esta radiación incide sobre la región de la unión P–N del panel, donde la energía de los fotones es absorbida y da lugar a la generación de pares electrón-hueco. Como resultado, el movimiento de estos portadores de carga bajo la acción del campo eléctrico interno produce una corriente eléctrica continua [5].

El incremento en la demanda energética global, junto con la urgencia de reducir el impacto del cambio climático, ha impulsado el desarrollo de tecnologías fotovoltaicas cada vez más avanzadas y eficientes. Entre las principales tecnologías actualmente empleadas se encuentran los paneles tradicionales de silicio, las celdas sensibilizadas con colorantes (celdas Grätzel), las celdas fotovoltaicas basadas en polímeros, las celdas de telurio de cadmio y las celdas de heterounión, entre otras [6]. La evolución y diversificación de estas tecnologías han generado la necesidad de identificar y desarrollar óxidos conductores transparentes (TCO) con propiedades específicas, como alta transparencia óptica en el rango visible, elevada conductividad eléctrica y adecuada estabilidad química, que permitan su aplicación como barreras de difusión, interfaces con materiales orgánicos y estructuras para el atrapamiento eficiente de la luz.



Figura_1.1 Diagrama esquemático de una celda solar bicapa.

El crecimiento constante en la demanda de electrodos transparentes, junto con el aumento en sus costos y la necesidad de desarrollar materiales con propiedades físicas mejoradas, ha impulsado numerosos esfuerzos de investigación orientados a la identificación de nuevos óxidos conductores transparentes (TCO) [7]. En este contexto, diversos estudios han reportado la viabilidad de materiales alternativos como el óxido de zinc dopado (ZnO:Al , ZnO:Ga), el óxido de estaño ($\text{SnO}_2:\text{F}$), el óxido de titanio dopado y óxidos tipo perovskita como el BaSnO_3 dopado, los cuales han mostrado propiedades ópticas y eléctricas prometedoras para aplicaciones fotovoltaicas. Estos antecedentes, ampliamente documentados en la literatura científica, sustentan el interés actual en el desarrollo y optimización de nuevos materiales TCO [8].

Definición del problema

Para que un TCO resulte atractivo para aplicaciones fotovoltaicas, debe presentar una alta transmitancia a lo largo de todo el espectro solar. Los TCO constituyen un componente crucial en los paneles de pantallas planas, ya que estas requieren un electrodo transparente, generalmente en forma de una película delgada de TCO [9].

El TCO más empleado para estos usos es el In_2O_3 dopado con Sn (ITO), famoso por su alrededor de 90% de transparencia y su reducida resistividad eléctrica de aproximadamente $10\text{--}4\Omega$ cm. Lamentablemente, el In es un material escasamente prevalente en la corteza terrestre, lo que ha provocado un incremento en sus costos de producción y ha reactivado el interés de los investigadores en crear un nuevo TCO más abundante y rentable. y con menos toxicidad [9].

Diversos óxidos binarios han sido ampliamente investigados como posibles materiales sustitutos del óxido de indio y estaño (ITO) en aplicaciones optoelectrónicas. Entre ellos, el óxido de zinc (ZnO) destaca por su abundancia y bajo costo, y ha sido dopado con distintos elementos, siendo el ZnO dopado con aluminio (ZnO:Al) uno de los sistemas más estudiados. De manera similar, el óxido de estaño dopado con flúor ($\text{SnO}_2\text{:F}$) es otro óxido binario de uso extendido, empleado principalmente en recubrimientos para ventanas de alta eficiencia energética y como electrodo transparente en celdas solares. Sin embargo, a pesar de sus ventajas, estos materiales presentan limitaciones en términos de movilidad electrónica, estabilidad química o desempeño óptico bajo determinadas condiciones de operación, lo que restringe su aplicación como reemplazos definitivos del ITO.

Ante estas limitaciones, los óxidos ternarios con estructura perovskita han adquirido un interés considerable. En particular, los estannatos alcalinotérreos de fórmula ASnO_3 ($A = \text{Ca}, \text{Sr}$ y Ba) han mostrado propiedades electrónicas y ópticas prometedoras, destacando su alta movilidad de portadores y estabilidad estructural. Estas características, junto con la posibilidad de optimizar sus propiedades mediante distintos mecanismos de dopaje y control estructural, los posicionan como candidatos atractivos para el desarrollo de nuevos óxidos conductores transparentes.

Hipotesis

Con base en los análisis experimentales reportados para el BaSnO_3 dopado con flúor, así como en cálculos ab initio realizados para BaSnO_3 puro y dopado con distintos elementos, se ha demostrado que el uso de modelos computacionales permite optimizar los parámetros estructurales y electrónicos del material, contribuyendo a la mejora de sus propiedades optoelectrónicas [10]. Los cálculos de primeros principios indican que el flúor introduce estados donadores poco profundos cerca del mínimo de la banda de conducción. Conforme estos estados se ocupan con portadores de carga, el nivel de Fermi se desplaza hacia el interior de la banda de conducción, dando lugar a un comportamiento degenerado característico de semiconductores tipo n [10].

Además, se espera que el dopaje con flúor en la estructura cristalina del (BaSnO_3) incremente la concentración de portadores tipo n y, en consecuencia, mejore la conductividad eléctrica del material, manteniendo propiedades ópticas favorables.

Objetivo general:

- Evaluar, mediante cálculos ab initio basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) implementados en el código WIEN2k, las propiedades estructurales, electrónicas, ópticas y eléctricas del BaSnO_3 dopado con flúor, con el fin de determinar su viabilidad como óxido conductor transparente (TCO) sustituto del ITO en celdas solares y dispositivos optoelectrónicos.

Objetivos Específicos:

- Optimizar estructuralmente el material perovskita BaSnO_3 puro y dopado con flúor mediante cálculos ab initio para determinar parámetros de red, estabilidad estructural y energía de formación.
- Analizar la estructura electrónica (estructura de bandas y densidad de estados) para identificar modificaciones inducidas por el dopaje con flúor y su impacto en la concentración de portadores y el ancho de banda prohibida.
- Evaluar las propiedades ópticas (coeficiente de absorción, reflectividad e índice de refracción) y determinar la transparencia en el rango visible.
- Comparar las propiedades obtenidas con los requisitos de un TCO comercial y con las características reportadas para el óxido de indio y estaño (ITO), estableciendo criterios de desempeño para aplicaciones en celdas solares y dispositivos optoelectrónicos.
- Determinar la concentración óptima de dopaje con flúor que permita maximizar simultáneamente la transparencia óptica y la conductividad eléctrica.

Justificación

La estandarización de las energías renovables es de vital importancia para el planeta ,para alcanzar un alto desarrollo sustentable y sostenible [11]. La importancia de los TCOs para aplicaciones fotovoltaicas ha crecido en los últimos años donde se usan como elementos de electrodo, plantillas estructurales y barreras de difusión [12].

El avance tecnológico crece de manera acelerada con el incremento de la población, lo que hace necesario mejorar la calidad de vida mediante el uso de la tecnología. En este contexto, resulta fundamental el empleo de dispositivos electrónicos como teléfonos celulares, pantallas inteligentes y computadoras.

Los óxidos conductores transparentes (TCOs) se utilizan ampliamente en estas aplicaciones, ya que funcionan como electrodos transparentes esenciales para el correcto desempeño de estos dispositivos. El aumento en la demanda de TCOs impulsa la búsqueda y el desarrollo de nuevos materiales que presenten mejores propiedades ópticas y eléctricas, que sean abundantes en la corteza terrestre y que tengan un bajo costo de producción, con el objetivo de sustituir a los materiales actualmente empleados.

El BaSnO_3 dopado con flúor ha sido identificado en estudios experimentales como un material prometedor para las aplicaciones previamente mencionadas[13]. No obstante, hasta el momento no se han reportado investigaciones que analicen sus propiedades estructurales, ópticas y eléctricas mediante cálculos **ab initio**, lo que constituye el propósito de este proyecto [14].

Los programas que emplean cálculos **ab initio** se basan en diversos métodos de la química cuántica para resolver la ecuación de Schrödinger mediante distintas aproximaciones [15] Su propósito principal es complementar las conclusiones derivadas de resultados experimentales y, en algunos casos, permiten predecir con alta precisión fenómenos que no han sido observados previamente.

Dado que se emplean aproximaciones basadas en la mecánica cuántica, el resultado no es único, sino que implica una serie de operaciones que requieren múltiples iteraciones, acercándose al infinito para lograr la mayor precisión posible. Este procedimiento puede extenderse durante semanas, por lo que contar con un equipo de alto rendimiento en procesamiento es fundamental [16].

Alcance y Limitaciones

Este proyecto se desarrolla de septiembre de 2023 a julio de 2025. Este periodo es suficiente para su ejecución completa, ya que corresponde a la duración del posgrado en Ingeniería Eléctrica y Electrónica de la Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos, donde se lleva a cabo la investigación.

Los participantes en esta tesis son el asesor, el Dr. Zakaryaa Zarhri, y el tesista, Ing. Francisco Javier Martínez Fabián.

Este proyecto contribuye al entendimiento microscópico de los mecanismos de conducción

en óxidos semiconductores transparentes y amplía el conocimiento científico sobre materiales tipo perovskita. En particular, aporta información novedosa sobre el dopaje del BaSnO_3 con flúor.

El impacto tecnológico de esta investigación se refleja en la mejora del desempeño de dispositivos optoelectrónicos, mediante el desarrollo de TCO con mayor transparencia óptica y mejor conductividad eléctrica. Asimismo, la investigación tiene un impacto científico relevante, ya que sus resultados estarán disponibles para la comunidad académica de licenciatura, maestría y doctorado, así como para cualquier investigador interesado en materiales TCO dopados con flúor y en la optimización de sus propiedades ópticas y eléctricas.

La presente investigación se centra en el estudio teórico de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del BaSnO_3 dopado con flúor mediante cálculos ab initio. Si bien los resultados aportan información relevante para la comprensión de los mecanismos de conducción en óxidos semiconductores transparentes, el estudio presenta algunas limitaciones que deben considerarse.

En primer lugar, la investigación se basa exclusivamente en simulaciones computacionales utilizando la teoría del funcional de la densidad (DFT), por lo que no se cuenta con validación experimental directa de los resultados obtenidos. En consecuencia, los valores calculados pueden diferir de los reportados experimentalmente debido a aproximaciones inherentes al método teórico empleado.

Asimismo, los resultados dependen del funcional de intercambio-correlación seleccionado, lo que puede introducir errores sistemáticos en la predicción de la brecha de banda y otras propiedades electrónicas. Además, no se consideran efectos de temperatura, presión ni interacciones fonón-electrón, los cuales pueden influir en el comportamiento real del material.

A pesar de estas limitaciones, los resultados obtenidos proporcionan una base teórica sólida para futuros estudios experimentales y computacionales más avanzados.

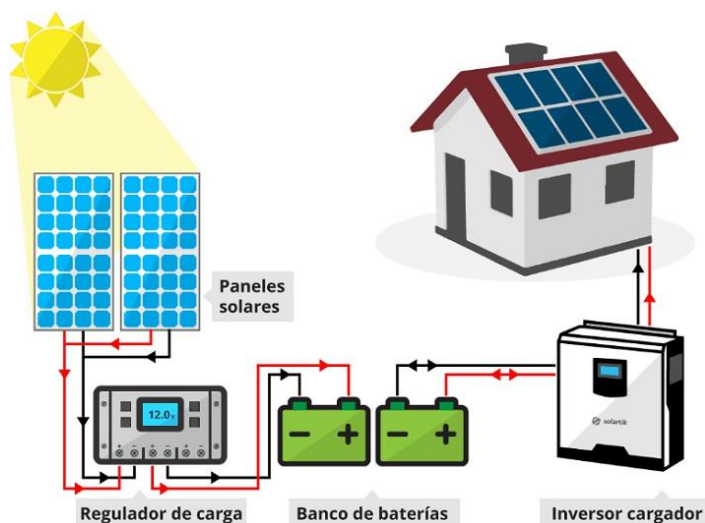
Capítulo 2: Marco teórico

Celdas Fotovoltaicas

El principio fotovoltaico es la base del funcionamiento de los sistemas solares actuales. Este proceso implica la creación de una diferencia de potencial eléctrico cuando la luz incide sobre dos electrodos conectados a través de un medio sólido o líquido. Dicho fenómeno fue identificado por primera vez en un laboratorio en 1839 por Henry Becquerel.

Para comprender mejor el funcionamiento básico de un panel solar es el siguiente:

- La energía solar viaja a través del espacio hasta llegar a la Tierra, donde incide sobre los paneles solares.
- Al impactar con el panel solar, los fotones estimulan el material del panel, lo que da lugar a la generación de una corriente eléctrica.
- La electricidad producida se transporta mediante un cable conductor.
- Este cable dirige la electricidad hacia un dispositivo llamado inversor, cuya función es convertir la corriente directa en corriente alterna.
- A continuación, otro cable se encarga de trasladar la corriente alterna desde el inversor hasta el panel eléctrico de la propiedad, encargado de distribuir la energía a toda la instalación.
- La electricidad que no se utiliza en el momento de su generación fluye a través de un medidor bidireccional proporcionado por la CFE, permitiendo gestionar el excedente de energía [17].



Figura_2.1 Conexión básica del panel solar.

Para aprovechar la energía solar, se suele emplear un material semiconductor con una banda prohibida adecuada para absorber la radiación electromagnética del sol. Cuando los fotones transfieren su energía al sistema, se generan pares electrón-hueco. Para minimizar su recombinación, se utiliza una capa delgada que facilita la separación de estas cargas, permitiendo que los electrones y huecos sean conducidos a las capas correspondientes de la unión P-N. Allí, un campo eléctrico se encarga de extraer la corriente del sistema. Este conjunto de capas recibe el nombre de celdas fotovoltaicas [18].

La mayoría de las tecnologías previamente mencionadas cuentan con una capa de TCO que proporciona transparencia y capacidad de conducción eléctrica al dispositivo solar. En la actualidad, las exigencias que debe cumplir un TCO de calidad varían según la tecnología de la celda y otros aspectos, como la abundancia del material en la corteza terrestre, su resistencia al calor, longevidad, compatibilidad con otros compuestos, impacto ambiental, entre otros. Ya no es suficiente con que sea únicamente conductor y translúcido al mismo tiempo.

Comparativa entre paneles solares Por mucho tiempo, el mercado de las celdas solares estuvo dominado por dos tipos principales: las monocristalinas y las policristalinas. No obstante, los recientes avances tecnológicos han dado paso a innovaciones que están revolucionando la forma en que percibimos los paneles solares, convirtiéndose en alternativas que vale la pena considerar.

Paneles solares monocristalinos: están compuestos por células de silicio cristalino puro, ya que cada una de ellas se fabrica a partir de un único fragmento de silicio. En términos de eficiencia, estos paneles superan ligeramente a los de polietileno. Una de sus principales ventajas es su capacidad para operar sin inconvenientes en condiciones de altas temperaturas o baja iluminación, lo que incluso favorece su desempeño, permitiéndoles generar una cantidad de energía cercana a su capacidad nominal.

Sin embargo, una desventaja significativa es su elevado costo de fabricación, lo que se refleja en un precio más alto en el mercado. A pesar de ello, destacan por su buen nivel de eficiencia, ya que convierten la luz solar en electricidad a una velocidad óptima. Por lo general, estas celdas se ensamblan en módulos de mayor tamaño, adecuados para su instalación en techos de edificaciones residenciales y comerciales [19].



Figura_2.2 Paneles solar monocristalino.

Células solares de película delgada: se fabrican mediante la deposición de una fina capa de material semiconductor o conductor, como el telururo de cadmio o el diseleniuro de galio, indio y cobre, sobre una base de vidrio o plástico. Estas capas tienen un grosor de apenas unos micrómetros.

Este tipo de tecnología no es de uso común en sistemas residenciales debido a su menor eficiencia en comparación con los paneles monocristalinos y policristalinos. No obstante, su producción es más económica, lo que la convierte en una alternativa viable para aplicaciones a gran escala.

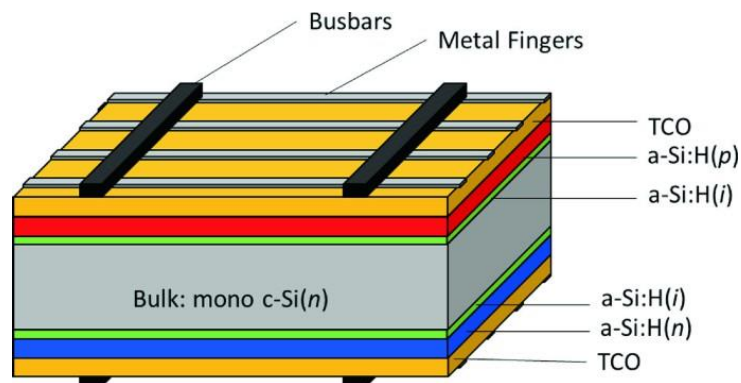
Además, las células solares de película delgada destacan por su flexibilidad y ligereza, lo que permite su integración en una amplia variedad de productos, como cargadores portátiles, mochilas e incluso ventanas capaces de generar electricidad con la luz solar [20].



Figura _2.3 Células solares de película fina.

Celdas de hetero unión con una película delgada intrínseca (HIT)

La abreviatura de esta tecnología proviene de su nombre en inglés (Heterojunction with Intrinsic Thin Layer). Fue presentada por primera vez por Sanyo y se basa en la combinación de una oblea de silicio cristalino dopado (c-Si), que proporciona propiedades de semiconductor tipo n en la parte superior, una delgada capa intermedia de silicio amorfo intrínseco (a-Si) y otra capa delgada de silicio amorfo dopado con características tipo p en la parte inferior. Esta última está seguida por una película de aluminio que actúa como electrodo posterior. Además, en la parte superior se emplea una capa de óxido conductor transparente, cuya función es atrapar la luz [21].

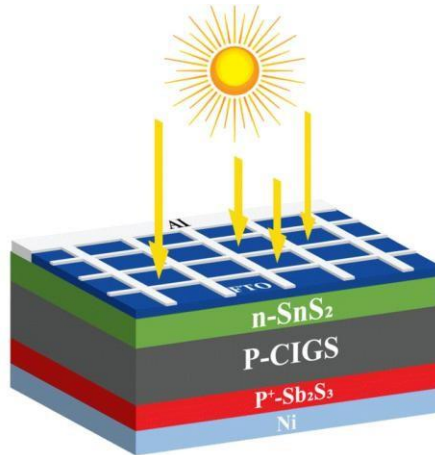


Figura_2.4 Diagrama esquemático celda tipo HIT.

+

Celdas de Seleniuro de Cobre, indio, Galio (CIGS)

Las celdas CIGS pertenecen a la segunda generación de tecnología fotovoltaica, junto con las de silicio amorfo/cristalino y las de telurio de cadmio. Se propusieron como una alternativa atractiva y de bajo costo, logrando eficiencias superiores al 20% en laboratorio gracias a la brecha de banda de la capa absorbente, que oscila entre 1 y 1.12 eV. Su estructura típica incluye un sustrato de vidrio de soda-lima, un electrodo trasero de molibdeno, una capa absorbente formada por una delgada película de cobre, indio, galio y seleniuro, una capa amortiguadora de CdS, un TCO de ZnO, una capa antirreflejante y un contacto superior de aluminio [22].

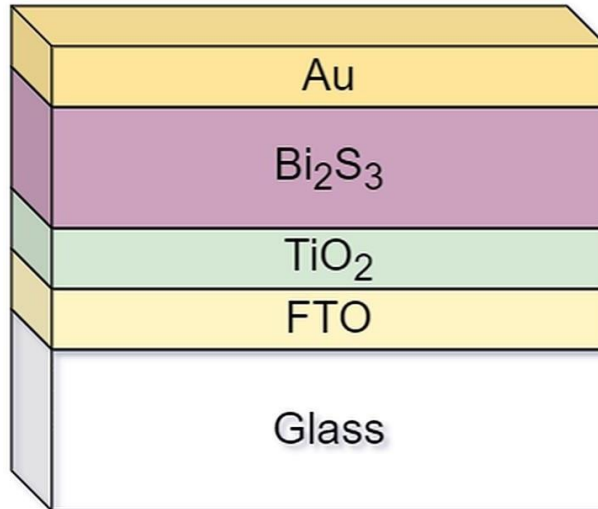


Figura_2.5 Diagrama esquemático de una celda CIGS.

Se ha comprobado experimentalmente que su eficiencia es casi comparable a la de las celdas de silicio cristalino [23]. A diferencia de las celdas de CdTe, no son tóxicas y su fabricación resulta económica debido a su capacidad de absorción en capas delgadas (2.0–2.5 μm). Además, pueden integrarse en sustratos tanto flexibles como rígidos [24].

Celda de silicio amorfo:

Las celdas solares basadas en silicio constituyen la tecnología predominante en la industria fotovoltaica comercial y se espera que continúen dominando el mercado en el futuro cercano y a largo plazo [25]

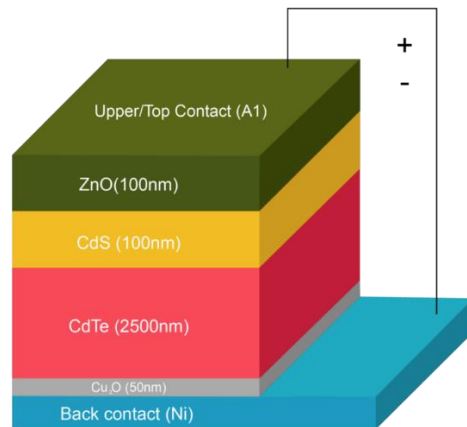


Figura_2.6 Estructura esquemática de una celda de silicio amorfo.

La estructura de las celdas de silicio amorfo (a-Si) se basa en uniones simples de tipo p-i-n o n-i-p. Sin embargo, su homogeneidad es relativamente baja, ya que los átomos forman una red continua y aleatoria en lugar de una red periódica, como ocurre en el silicio cristalino (c-Si). Debido a su alta capacidad de absorción, generalmente se emplean capas delgadas de a-Si con un grosor de entre 0.2 y 0.5 μm , permitiendo la absorción de energía en un rango de 1.1 a 1.7 eV [26].

Celdas de Teluro de Cadmio

Al igual que las celdas de a-Si y CIGS, las de Teluro de Cadmio (CdTe) son ideales para aplicaciones fotovoltaicas debido a su brecha de banda indirecta de 1.5 eV, lo que les permite absorber cerca del 90% del espectro solar. En condiciones de laboratorio, han alcanzado eficiencias de hasta el 25%, y se considera que este valor podría incrementarse aún más en teoría. Su estructura es similar a la de las celdas CIGS, con una capa emisora tipo n de CdS y una capa absorbente tipo p de CdTe. Además, cuentan con contactos posteriores de cobre y oro, mientras que el SnO₂ actúa como TCO gracias a su estabilidad química y su brecha de banda de 4.5 eV, todo esto sobre un sustrato de cristal soda-lima [27].

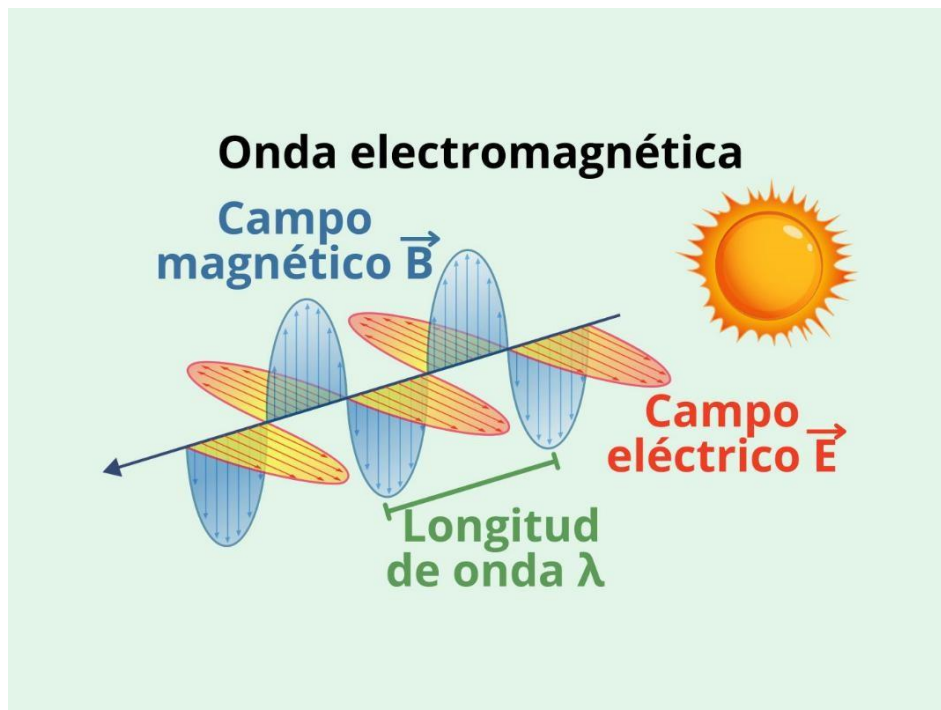


Figura_2.7 Estructura de la celda de CdTe.

El óxido conductor transparente (TCO) debe presentar una afinidad electrónica inferior a 4.5 eV, ya que es necesario formar un contacto óhmico con la capa de CdS. Asimismo, uno de los requisitos tecnológicos del TCO es su alta resistencia a la difusión, debido a las elevadas temperaturas involucradas en el proceso de deposición del CdTe. En la literatura se han reportado estudios empleando diversos TCO, como SnO₂:F (FTO), ZnO:Al (AZO) e ITO. En el caso de semiconductores como ITO y AZO, usualmente se incorpora una capa intrínseca delgada entre el TCO y el CdS con el fin de mejorar la interfaz. No obstante, el SnO₂:F ha sido el TCO con el que se han alcanzado las mayores eficiencias en dispositivos CdTe. [28].

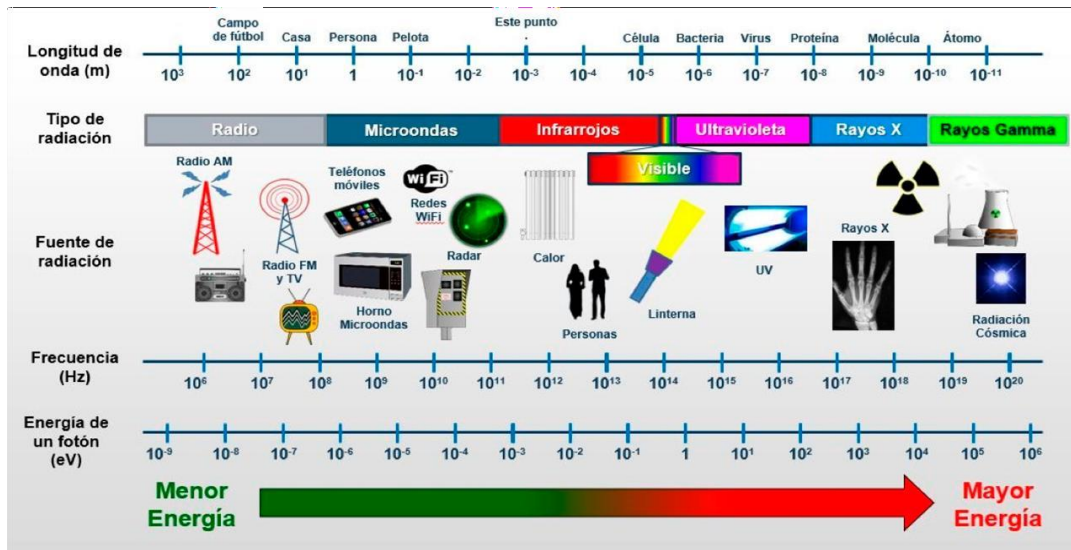
2.3 Ondas electromagnéticas

Las ondas electromagnéticas son de tipo ondulatorias y están compuesta por componentes eléctricos y magnéticos perpendiculares entre sí y a la dirección de propagación. Las transmisiones por televisión, las ondas de radio, el calor, los rayos x, la luz, etc. Son tipos de ondas electromagnéticas que varían únicamente en la frecuencia [29].



Figura_2.8 Representación de una onda electromagnética.

Las ondas electromagnéticas abarcan un rango extremadamente amplio de longitudes de onda y frecuencias. Actualmente, se han identificado ondas electromagnéticas con frecuencias que varían desde 1 hasta 10^{24} Hz. Este espectro incluye desde los rayos gamma, emitidos por materiales radiactivos, con longitudes de onda de 10^{-12} metros, seguidos por los rayos X, la luz ultravioleta, la luz visible, el espectro infrarrojo y, en el extremo opuesto, ondas con longitudes de hasta 1 metro [30].



Figura_2.9 Espectro electromagnético completo.

La luz visible constituye solo una pequeña fracción del espectro electromagnético y comprende longitudes de onda aproximadamente entre 380 y 750 nm (3.8×10^{-7} m y 7.5×10^{-7} m). Cada color del arcoíris está asociado a una longitud de onda específica dentro de este intervalo, mientras que la luz blanca resulta de la superposición de todas las longitudes de onda del espectro visible.

Color	Longitud de onda
Violeta	400 a 440 nm
Azul	440 a 480 nm
Verde	480 a 560 nm
Amarillo	560 a 590 nm
Naranja	590 a 630 nm
Rojo	630 a 700nm

Tabla_2.1 Longitudes de onda correspondientes a los colores del arcoíris.

El efecto fotoeléctrico y el descubrimiento del fotón

El efecto fotoeléctrico fue descubierto por Heinrich Hertz en 1887, cuando observó que, al iluminar dos esferas cargadas eléctricamente, las descargas entre ellas se producían con mayor facilidad [31]. Este hecho sugería que la radiación luminosa favorecía la emisión de electrones desde la superficie del material. Posteriormente, Wilhelm Hallwachs y Philipp Lenard estudiaron este fenómeno con mayor detalle y demostraron que aumentar la intensidad de la luz incidente no incrementaba la energía cinética de los electrones emitidos. En cambio, la emisión electrónica dependía de la existencia de una frecuencia umbral f_0 es decir, los electrones solo eran liberados cuando la frecuencia de la luz incidente superaba dicho valor crítico.

Las ecuaciones de la física clásica no lograban explicar este comportamiento. En 1905, Albert Einstein propuso una explicación basada en la hipótesis cuántica formulada previamente por Max Planck. Einstein postuló que la luz está compuesta por unidades discretas de energía, denominadas *fotones* (o cuantos de energía), y estableció que la energía asociada a cada fotón es proporcional a la frecuencia de la radiación incidente, de acuerdo con la siguiente relación [32]:

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda}$$

Espectros de líneas, niveles de energía y emisión de fotones

Isaac Newton demostró que, al hacer pasar un haz de luz a través de un prisma, este se descompone en diferentes longitudes de onda, originando un espectro de radiación. La naturaleza del espectro depende del tipo de fuente luminosa. Cuando la luz proviene de un cuerpo sólido incandescente, como el filamento de una lámpara, se obtiene un espectro continuo [33]. En cambio, cuando la radiación es emitida por un gas excitado mediante una descarga eléctrica, como en las lámparas de neón, el espectro es discontinuo y está constituido por líneas brillantes correspondientes a longitudes de onda específicas, conocido como espectro de líneas.



Figura 2.10 Espectro de luz continuo y espectro de líneas emitido por un gas.

Para explicar la aparición de los espectros de líneas, Niels Bohr propuso a comienzos del siglo XX un modelo atómico basado en la cuantización de los niveles de energía electrónicos. Bohr postuló que los electrones en un átomo solo pueden ocupar ciertos niveles de energía discretos. Los espectros de líneas se originan cuando un electrón transita entre estos niveles, emitiendo o absorbiendo un fotón cuya energía es igual a la diferencia entre los niveles involucrados. De este modo, la variación en la energía interna del átomo es equivalente a la energía del fotón emitido o absorbido, en concordancia con el principio de conservación de la energía [34].

Absorción de la luz

Así como los átomos pueden emitir fotones cuando sus electrones transitan de un estado de mayor energía a uno de menor energía, también pueden absorber fotones cuya energía coincida con la necesaria para promover un electrón hacia un nivel energético superior.

Para que un material absorba un fotón, la energía del fotón debe ser igual o mayor que la energía de su brecha de banda (band gap). Si la energía del fotón es menor que esta brecha, la radiación no puede excitar electrones desde la banda de valencia hacia la banda de conducción y, por lo tanto, atraviesa el material sin ser absorbida.

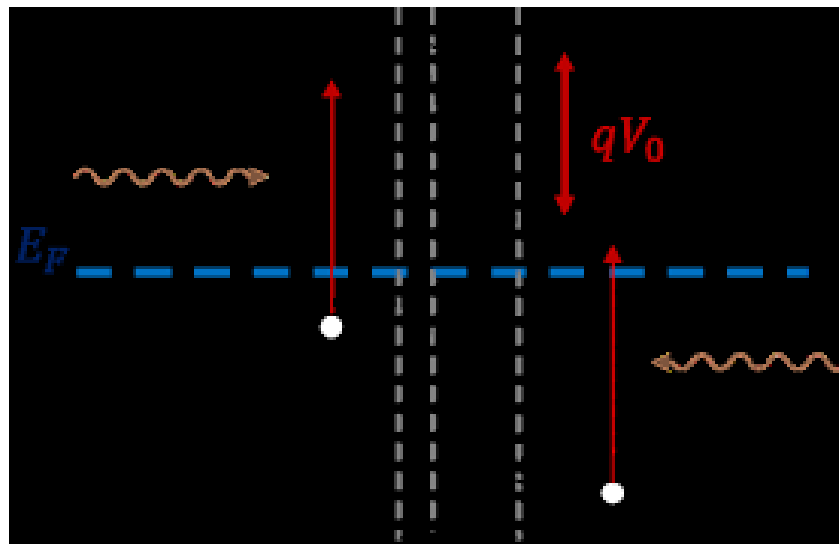
En consecuencia, los materiales con una brecha de banda amplia (superior a aproximadamente 3 eV) presentan alta transparencia en el rango visible del espectro electromagnético, ya que los fotones de la luz visible no poseen energía suficiente para inducir transiciones electrónicas a través de la brecha. Esta propiedad es fundamental en materiales dieléctricos transparentes y en ciertos semiconductores utilizados en aplicaciones optoelectrónicas [35].

El coeficiente de absorción, que cuantifica la atenuación de la radiación luminosa al propagarse a través de un material, está directamente relacionado con la energía de la brecha de banda óptica (E_g) mediante la siguiente expresión:

$$\alpha = A(h\nu - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

Donde A es una constante asociada a la probabilidad de transición electrónica directa y $h\nu$ representa la energía del fotón incidente. Esta energía fotónica es la responsable de promover a los electrones desde la banda de valencia hacia la banda de conducción, siempre que sea suficiente para superar la energía de la brecha prohibida (band gap) del material.

En el caso de transiciones directas, el electrón no requiere un cambio en el momento cristalino (k), lo que incrementa la probabilidad del proceso en determinados materiales semiconductores y explica la alta eficiencia óptica observada en estos sistemas.



Figura_2.11 Proceso de absorción de un fotón cuando excita un electrón.

Refracción

El índice de refracción no solo describe la desviación y propagación de la luz al atravesar un material, sino que también está estrechamente relacionado con sus propiedades eléctricas y magnéticas. A partir de este parámetro es posible obtener información sobre la interacción del material con los campos electromagnéticos, ya que depende de la permitividad eléctrica (ϵ) y la permeabilidad magnética (μ) del medio. Estas propiedades determinan la velocidad de propagación de la luz en el material y el comportamiento de la onda electromagnética, lo que convierte al índice de refracción en un parámetro fundamental en óptica y en el diseño de dispositivos electrónicos, fotónicos y sensores avanzados[36].

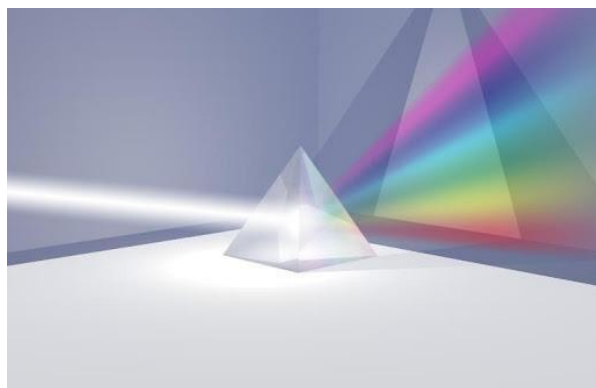


Figura 2.12 Refracción.

Un arcoíris se forma como resultado de la refracción, reflexión interna y dispersión de la luz solar al interactuar con diminutas gotas de agua suspendidas en la atmósfera. Cuando la luz solar ingresa en una gota de agua, se refracta y se descompone en sus diferentes longitudes de onda, ya que cada color se desvía con un ángulo distinto [37]. Posteriormente, la luz experimenta una reflexión interna dentro de la gota y, al salir nuevamente al aire, se refracta por segunda vez, lo que incrementa la separación angular entre los colores y permite la formación del arco multicolor observable.

Este fenómeno produce la secuencia característica de colores, que se extiende desde el rojo hasta el violeta, siguiendo un orden bien definido determinado por la dependencia de la refracción con la longitud de onda [38].

Reflexión

La espectrometría es una técnica fundamental y altamente precisa para determinar la energía de la brecha de banda en diversos materiales. No obstante, para obtener resultados verdaderamente fiables, es necesario considerar todas las interacciones posibles entre la radiación electromagnética y el material en estudio [40]. Un aspecto que con frecuencia se omite en la caracterización óptica experimental es la reflexión de la luz en la superficie de la muestra.

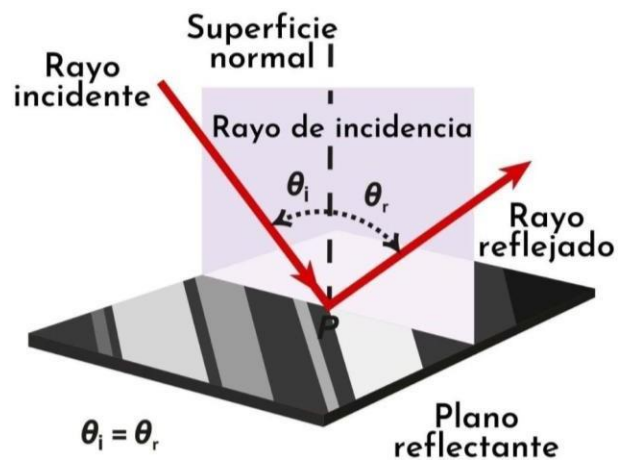
Cuando un haz de luz incide sobre una superficie lisa que separa dos medios con diferentes índices de refracción, una fracción de la radiación no se transmite al segundo medio, sino que es reflejada. Este fenómeno, en el cual la luz se refleja en una dirección bien definida, se denomina reflexión especular. En contraste, cuando la superficie del material es rugosa o presenta irregularidades, la luz se dispersa en múltiples direcciones, originando la denominada reflexión difusa [41].

Este fenómeno de dispersión es responsable de la percepción de los colores de los objetos en la vida cotidiana: los colores visibles corresponden a las longitudes de onda del espectro electromagnético que son reflejadas de manera difusa por los materiales. Por ello, en el análisis óptico de un material es fundamental considerar no solo la radiación absorbida y transmitida, sino también la cantidad y el tipo de luz reflejada, ya que esta puede influir de manera significativa en la precisión e interpretación de los datos espectrales obtenidos.

La reflexión se puede definir como:

$$R = \frac{I_R}{I_T}$$

Donde I_R es la intensidad reflejada, en donde I_T es la intensidad incidente total.

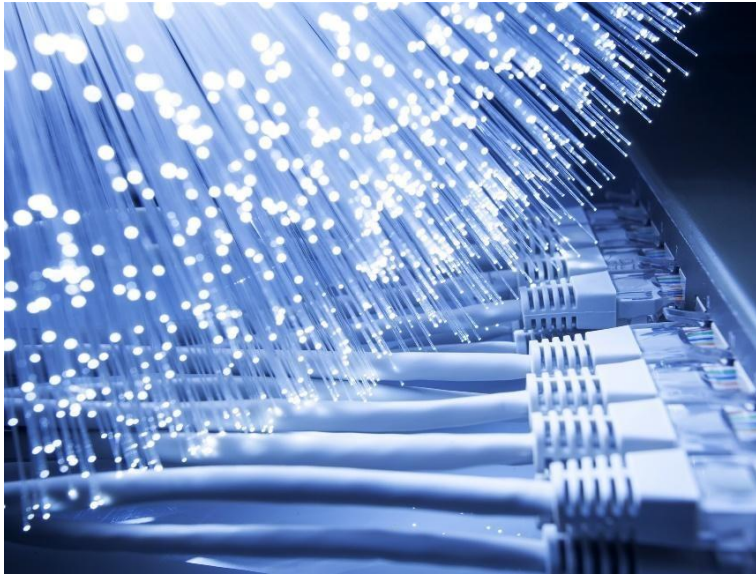


Figura_2.13 Reflexión.

Transmisión

La transmisión de la luz a través de un material depende fuertemente de la longitud de onda de la radiación incidente. En general, cuanto menores sean la absorción y la reflectancia del material para una longitud de onda determinada, mayor será su capacidad de transmitir dicha radiación. En consecuencia, la transparencia de un material está determinada tanto por sus propiedades electrónicas como por su estructura física y química [42].

Adicionalmente, factores como la pureza del material, la presencia de impurezas o defectos estructurales y el espesor de la muestra influyen significativamente en el nivel de transmisión de la luz.



Figura_2.14 Transmisión.

Un material se considera transparente para aquellas longitudes de onda cuya energía es inferior a la energía de su brecha de banda. En este caso, la radiación incidente no posee la energía suficiente para promover electrones desde la banda de valencia hacia la banda de conducción, por lo que no es absorbida y puede propagarse a través del material.

Esta es la razón por la cual materiales como el vidrio son transparentes en el rango visible del espectro electromagnético: permiten el paso de las longitudes de onda correspondientes a la luz visible, ya que no presentan una absorción significativa en dicha región espectral.

La transmisión se puede definir como:

$$T = \frac{I_t}{I_0}$$

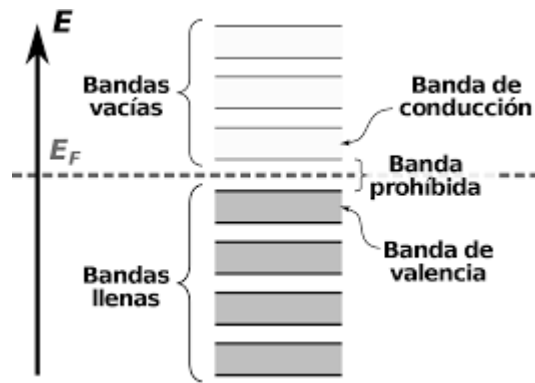
Donde T es la transmitancia o transmisión (valor entre 0 y 1, o a veces expresada como porcentaje).

It es la intensidad de luz transmitida (la que pasa a través del material). I0 es la intensidad de luz incidente (la que llega al material).

Brecha de banda óptica (bandgap) Tauc

La relación de Tauc es un método ampliamente utilizado en la caracterización óptica de materiales, en particular en semiconductores y sólidos amorfos, que permite estimar la energía de la brecha de banda óptica (band gap). Este procedimiento se basa en el análisis del coeficiente de absorción en función de la energía del fotón incidente.

La brecha de banda representa la mínima energía necesaria para que un electrón transite desde la banda de valencia hacia la banda de conducción, posibilitando la conducción eléctrica. Este parámetro es fundamental para clasificar los materiales como conductores, semiconductores o aislantes, y además determina de manera directa la interacción del material con la radiación electromagnética, especialmente en las regiones visible y ultravioleta del espectro [43].



Figura_2.15 Banda prohibida.

TCO

Los óxidos conductores transparentes (Transparent Conductive Oxides, TCOs) constituyen una clase de materiales semiconductores degenerados que combinan simultáneamente una alta transparencia óptica en el rango visible y una elevada conductividad eléctrica. Estas propiedades los hacen indispensables en aplicaciones optoelectrónicas modernas, tales como celdas solares, pantallas planas, dispositivos optoelectrónicos, sensores y electrodos transparentes[44].

Entre los TCOs más ampliamente estudiados se encuentran el óxido de indio dopado con estaño (ITO), el óxido de zinc dopado con aluminio (AZO) y el óxido de estaño dopado con flúor (FTO). No obstante, el uso de estos materiales presenta limitaciones significativas. En particular, el ITO enfrenta problemas asociados al alto costo y la escasez del indio, mientras que el AZO presenta deficiencias en su estabilidad térmica y química bajo condiciones ambientales severas [45]. Estas limitaciones han motivado la búsqueda de materiales alternativos basados en elementos abundantes y con propiedades mejoradas de estabilidad y desempeño.

En este contexto, el BaSnO_3 es un óxido con estructura perovskita cúbica que ha emergido como un candidato prometedor dentro de la familia de los TCOs. Este material presenta un amplio ancho de banda prohibida ($\sim 3.0\text{--}3.5$ eV), lo que garantiza una elevada transparencia óptica, además de una notable movilidad electrónica cuando es dopado adecuadamente. Estudios teóricos y experimentales han demostrado su potencial como electrodo transparente y como material funcional en dispositivos optoelectrónicos avanzados [46].

En su forma pura, el BaSnO_3 presenta un comportamiento semiconductor intrínseco, con una conductividad eléctrica limitada. Sin embargo, la incorporación de dopantes donadores permite desplazar el nivel de Fermi hacia la banda de conducción, induciendo un régimen de semiconductor degenerado, condición necesaria para su aplicación como óxido conductor transparente (TCO).

El BaSnO_3 ha sido identificado en diversos estudios teóricos y experimentales como un TCO prometedor, debido a su estructura perovskita cúbica, su amplio ancho de banda prohibida ($\approx 3.0\text{--}3.5$ eV) y su elevada movilidad electrónica cuando es dopado adecuadamente [47]. Desde el punto de vista teórico, cálculos *ab initio* basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) han demostrado que la banda de conducción del BaSnO_3 está dominada por

los orbitales Sn 5s, altamente dispersivos, lo que da lugar a bajas masas efectivas y, en consecuencia, a un transporte electrónico eficiente.

En particular, el dopaje con flúor (F), sustituyendo al oxígeno en la red cristalina, ha sido respaldado por cálculos de estructura electrónica que evidencian la formación de niveles donadores poco profundos, los cuales contribuyen de manera eficiente a la conductividad tipo n. Asimismo, estos estudios indican que el dopaje con F no altera de forma significativa la estructura cristalina ni reduce el ancho de banda prohibida, preservando de este modo la transparencia óptica del material [48].

Capítulo 3 Metodología

Metodología

La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT, por sus siglas en inglés) se emplea en este trabajo como método principal para el estudio de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del material BaSnO_3 dopado con flúor. La DFT permite modelar sistemas atómicos y moleculares de distinta dimensionalidad con un costo computacional relativamente bajo en comparación con otros métodos cuánticos más avanzados, manteniendo una buena relación entre precisión y eficiencia computacional.

La descripción teórica del método DFT se presenta en el Capítulo X (o en la sección correspondiente del marco teórico), donde se detallan sus fundamentos y aproximaciones. Este método ha demostrado una alta confiabilidad en la predicción de propiedades electrónicas de materiales, aunque presenta limitaciones inherentes, como la subestimación de la brecha de banda, dependiendo del funcional de intercambio-correlación utilizado.

Mediante las simulaciones realizadas, se analizará el efecto del dopaje con flúor en la estructura electrónica del BaSnO_3 puro, así como las modificaciones en sus propiedades ópticas y eléctricas. Se generarán representaciones gráficas de la estructura de bandas, densidad de estados (DOS) y coeficientes de absorción óptica, con el fin de evaluar la transparencia y la conductividad del material en su forma pura y dopada a diferentes concentraciones.

Para la visualización y análisis de los resultados, se emplearán herramientas gráficas que permiten interpretar las características físicas del material de manera clara y cuantitativa.

El software WIEN2k es un paquete computacional para cálculos de estructura electrónica basado en la Teoría del Funcional de la Densidad, ampliamente utilizado en la física del estado sólido y la ciencia de materiales. WIEN2k implementa el método APW+lo (Augmented Plane Waves plus local orbitals), lo que permite obtener resultados altamente precisos para metales, semiconductores y materiales complejos. Entre sus capacidades se incluyen el cálculo de la estructura de bandas, densidad de estados, propiedades magnéticas y ópticas. Además, proporciona herramientas para la visualización y análisis de los resultados, lo que facilita la interpretación física de las propiedades del material. Debido a su precisión y estabilidad numérica, WIEN2k es una herramienta fundamental en estudios teóricos de materiales.

Física computacional

El desarrollo del conocimiento científico ha proporcionado a la humanidad herramientas para comprender y describir el mundo natural, lo que permite aprovechar sus recursos y mejorar las condiciones de vida. En este contexto, las matemáticas funcionan como un lenguaje formal que se actualiza constantemente con nuevos descubrimientos y que permite describir de manera precisa los fenómenos físicos.

Por ejemplo, al lanzar una piedra con cierta fuerza, ya sea siguiendo una trayectoria parabólica o vertical, es posible registrar la distancia recorrida hasta que toca el suelo mediante sensores e instrumentos de medición, lo cual constituye una medición experimental. Este tipo de medición implica el uso de dispositivos físicos para observar cómo responde el sistema ante una fuerza externa.

Por otro lado, si se conocen las condiciones iniciales del sistema, como la velocidad inicial, la aceleración de la gravedad y la resistencia del aire, es posible utilizar las ecuaciones de la física clásica para predecir con alta precisión el comportamiento de la piedra, lo que se denomina medición teórica o modelación física [49].

Simulación Ab-initio

La simulación computacional desempeña un papel fundamental en la ciencia de materiales, debido a los avances significativos en los modelos teóricos y en los algoritmos de supercomputación disponibles en la actualidad. Inicialmente, las simulaciones *ab initio* se centraban en describir la materia desde un enfoque cuántico fundamental; sin embargo, con el tiempo han evolucionado hasta permitir el estudio de sistemas que contienen varios miles de átomos. Este tipo de simulaciones tiene como objetivo representar de manera simplificada y esquemática sistemas físicos complejos, proporcionando información detallada sobre sus propiedades estructurales, electrónicas y ópticas.

Las simulaciones *ab initio* se fundamentan en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT, por sus siglas en inglés), la cual simplifica la compleja interacción entre electrones en sistemas multielectrónicos al transformarla en un potencial efectivo de un solo electrón que depende únicamente de la densidad electrónica [50].

Desarrollo de modelo de Teoría Funcional de la Densidad

La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT, por sus siglas en inglés) se basa en la determinación de propiedades del estado fundamental de un sistema, como la energía total y la distribución electrónica, a partir de la densidad de carga electrónica, en lugar de la función de onda. Esto se debe a que la densidad electrónica es una cantidad mucho más sencilla de manejar computacionalmente que la función de onda de muchos cuerpos, lo que ha permitido realizar cálculos más rápidos y eficientes en el estudio de sistemas complejos. Gracias a estas ventajas, la DFT se ha consolidado como una de las herramientas más utilizadas para el análisis de la estructura electrónica, con un notable incremento en su aplicación dentro de la literatura científica en los últimos años [51].

La DFT es actualmente uno de los métodos más empleados para el cálculo de estructuras de banda y propiedades electrónicas de materiales, y se encuentra implementada en diversos paquetes computacionales, entre los que destaca **WIEN2k**, ampliamente reconocido en la comunidad científica [52]. Esta teoría constituye una de las herramientas computacionales más eficientes para predecir propiedades electrónicas, ópticas y estructurales de distintos tipos de materiales, lo que la convierte en una opción adecuada para orientar estudios teóricos y experimentales. Aunque presenta ciertas limitaciones, como la subestimación del ancho de banda prohibida en algunos materiales, proporciona una descripción razonable de la estructura electrónica, lo cual resulta de gran utilidad en investigaciones del área de la electrónica y la ciencia de materiales.

La DFT puede aplicarse al estudio de una amplia variedad de sistemas, incluyendo átomos, moléculas, sólidos, núcleos, sistemas cuánticos y fluidos clásicos, lo que evidencia su versatilidad como herramienta teórica. En su formulación original, permite determinar propiedades del estado fundamental, donde la densidad electrónica desempeña un papel central [53]. Posteriormente, esta teoría ha sido extendida a múltiples contextos, como sistemas con polarización de espín, cálculos de energía libre a temperaturas finitas, superconductividad, efectos relativistas, fenómenos dependientes del tiempo, estados excitados y simulaciones de dinámica molecular, entre otros.

Los cálculos basados en la DFT son ampliamente utilizados en estudios cuánticos debido a su equilibrio entre precisión y costo computacional. Los métodos ab initio derivados de esta teoría se emplean, por ejemplo, en el análisis de superficies de óxidos metálicos, nanoestructuras y materiales funcionales, proporcionando información fundamental para el diseño y optimización de nuevos dispositivos electrónicos y optoelectrónicos.

Aplicación del software Wien2K

Para abordar el tema de WIEN2k, es importante señalar que se trata de un conjunto de programas computacionales utilizado para realizar cálculos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). Este software se emplea ampliamente en el estudio de la estructura electrónica de materiales sólidos. WIEN2k es uno de los códigos más utilizados en la comunidad científica debido a que implementa el método de ondas planas aumentadas con potencial completo (FP-LAPW), reconocido por proporcionar resultados de alta precisión en cálculos de estructura de bandas y propiedades electrónicas.

Su popularidad se debe, además, a su confiabilidad, robustez numérica y amplio respaldo en la literatura científica, donde ha sido citado en miles de trabajos de investigación, consolidándose como una herramienta estándar en estudios teóricos de materiales [54]. En particular, WIEN2k permite un análisis detallado de la densidad de estados (DOS) y de la estructura de bandas, aspectos fundamentales para la comprensión de las propiedades electrónicas y ópticas de los materiales.

Asimismo, el código es especialmente adecuado para el tratamiento de materiales con fuertes interacciones electrónicas, como óxidos de metales de transición y sistemas magnéticos, gracias a la inclusión de esquemas avanzados como GGA+U y métodos relativistas. Aunque el uso del software requiere conocimientos técnicos especializados, WIEN2k incorpora herramientas gráficas que facilitan la visualización y análisis de los resultados, lo que resulta útil para investigadores en formación.

Finalmente, WIEN2k se caracteriza por su estabilidad y precisión en cálculos complejos, lo que lo convierte en una herramienta adecuada para estudios que requieren simulaciones repetidas y configuraciones numéricas delicadas. Por estas razones, WIEN2k constituye una opción idónea para el presente proyecto, en el cual se requiere alta exactitud y un análisis detallado de las propiedades electrónicas en el ámbito de la ciencia de materiales.

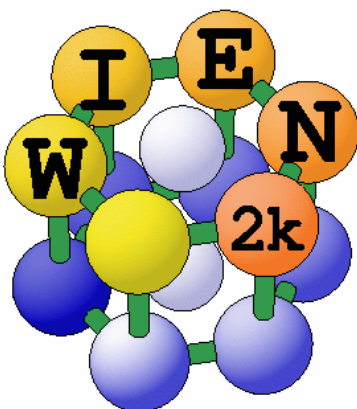


Figura _3.1 Logotipo Wien2k.

El proceso de procesamiento puede resumirse de la siguiente manera:

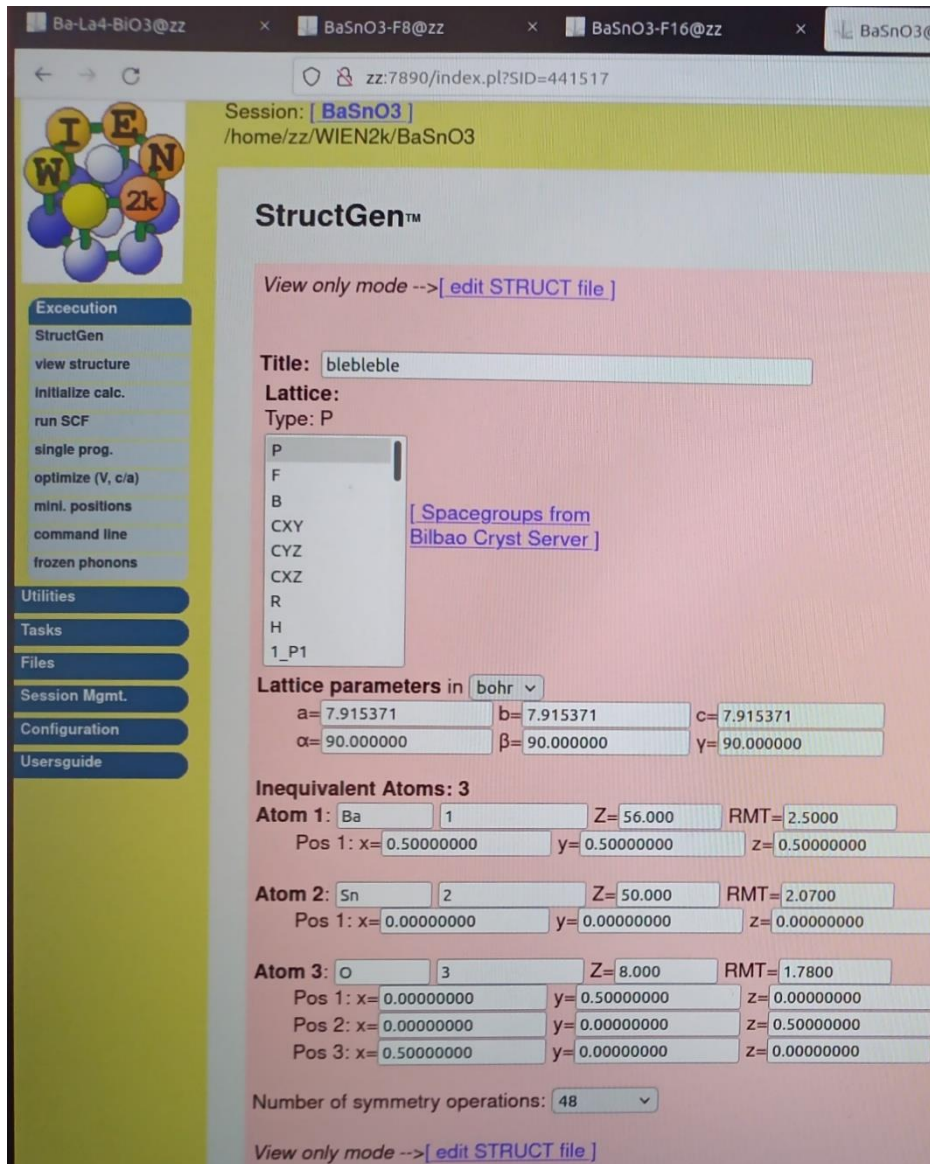
1. Se inicia el servidor w2web en el equipo, y luego nos conectamos a él a través de cualquier navegador.
2. Se crea una nueva sesión y se selecciona el directorio donde se guardarán los archivos de los resultados de los cálculos.
3. Se genera el archivo de estructura de entrada (archivo.struct), que contiene la configuración atómica del sistema (parámetros de red, posiciones atómicas, radios atómicos, etc.), y el software verifica que no haya superposición entre los átomos y determina la simetría de la celda unitaria.

Una vez establecidos los parámetros de entrada, se deben iniciar los cálculos con el comando “initialize calc”, donde se calculan las densidades atómicas de la celda, se determinan parámetros como el potencial de intercambio y correlación electrónica, los vectores K, los radios, entre otros.

4. Con los parámetros fijados y la densidad calculada, se inician los cálculos auto- consistentes para obtener la energía del material, ejecutando un **ciclo continuo** hasta alcanzar la convergencia y obtener la energía del sistema.
5. Finalmente, se utilizan las herramientas del software para calcular las propiedades deseadas (densidad de estados, propiedades ópticas, estructura de banda, etc.).

Los resultados se almacenan en el directorio elegido. Para la visualización gráfica, es necesario utilizar un software externo, como Excel; en este caso, se optó por Origin 2024 Pro.

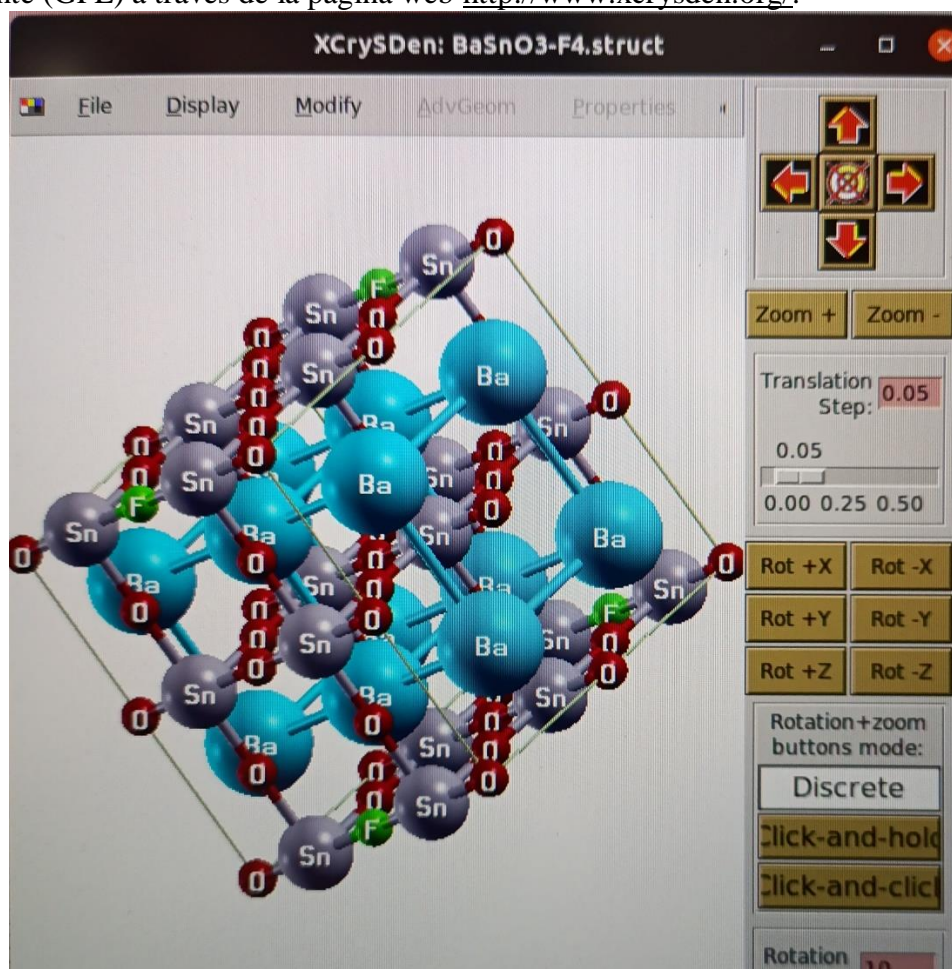
Para generar un archivo de entrada en WIEN2k, se necesita principalmente el archivo estructural llamado case.struct. Este archivo define la estructura cristalina del material que vas a simular este archivo contiene toda la información necesaria como: tipo de átomos, posiciones atómicas, tipos de red, simetría cristalina, parámetros de celda. Cada nuevo cálculo genera un directorio. Todos los archivos tienen la misma raíz, igual al nombre del directorio. Paralelización, de espín, etc.



Figura_3.2 variables para generar un archivo en WIEN2k.

Visualización con XCrysDen

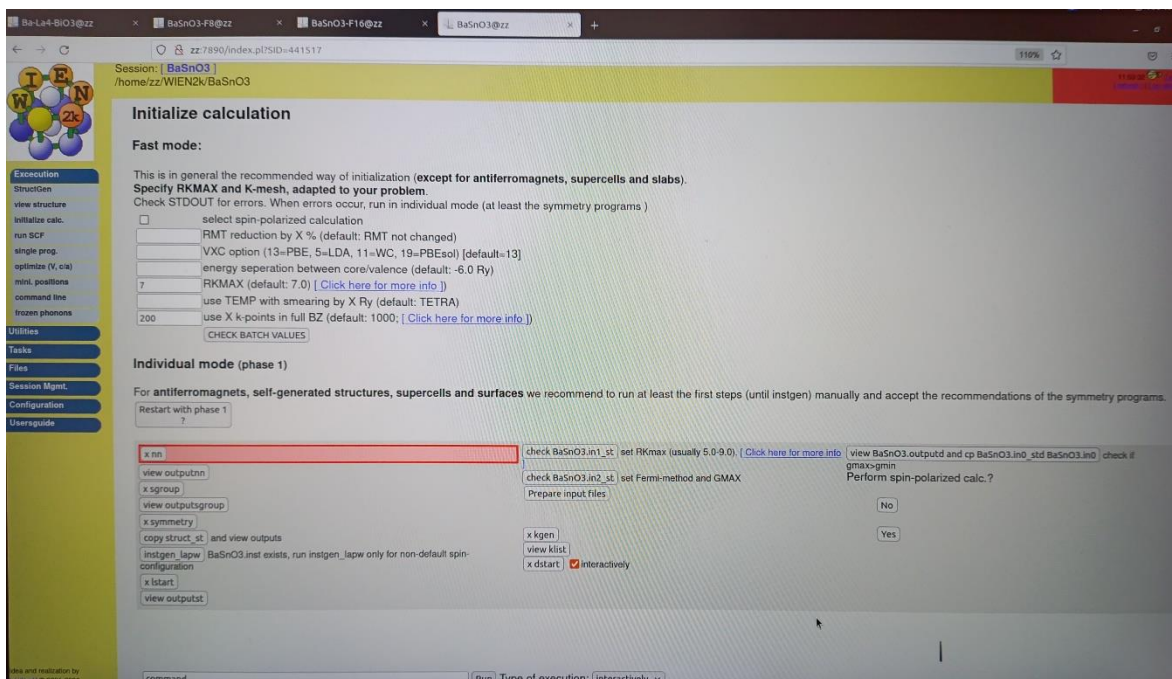
XCrysDen (A. Kokalj y M. Causa, J. Mol. Graphics Modell., 17 (1999) 176–179) es un programa de visualización que permite verificar la geometría introducida. Se distribuye libremente (GPL) a través de la página web <http://www.xcrysden.org/>.



Figura_3.3 Interfaz estructura BaSnO₃ dopada con Flúor.

- Además de representar interactivamente la estructura, permite calcular densidades electrónicas, superficies de Fermi, etc.
- Además de WIEN2k, puede representar estructuras calculadas con otros códigos: crystal, PWscf,
- En WIEN2k, permite generar visualmente caminos en la 1BZ para diagramas de estructuras de bandas.

inicialización – simetría de la celda



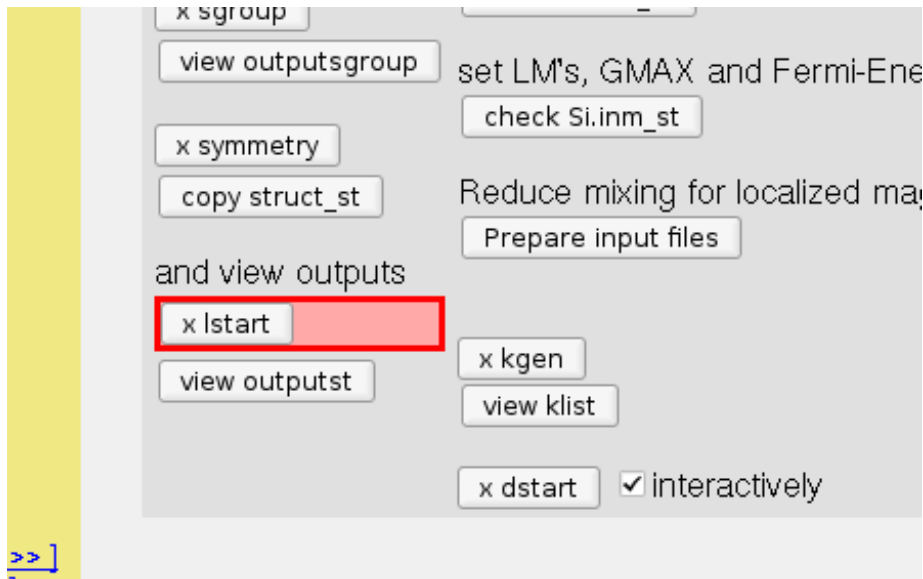
Figura_3.4 simetría de la celda.

nn: calcula las distancias entre vecinos. Permite comprobar que no existen colisiones entre esferas de muffin.

sgroup: encuentra el grupo puntual y cualquier posible grupo espacial más favorable para el cálculo. Genera un nuevo struct que se puede utilizar opcionalmente.

symmetry: genera las operaciones de simetría del grupo espacial, las matrices de rotación atómicas y los términos de la expansión LM de la densidad y el potencial.

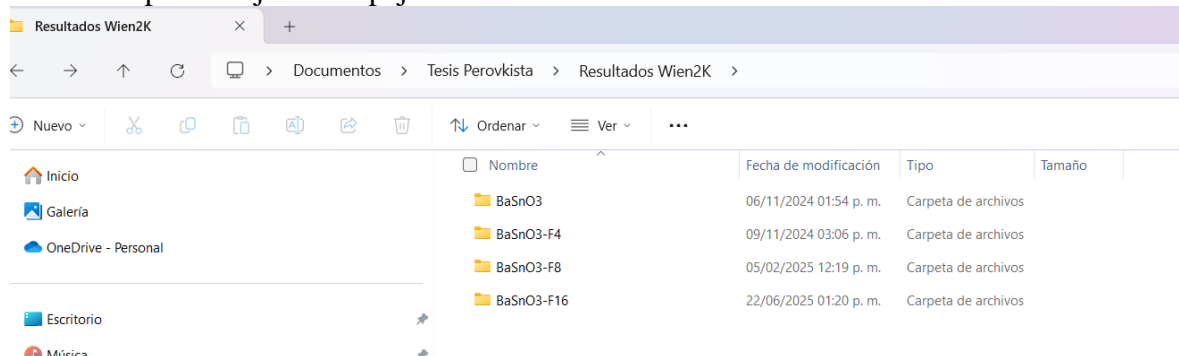
inicialización – la densidad inicial



Figura_3.5 Planteamiento inicial de densidad inicial.

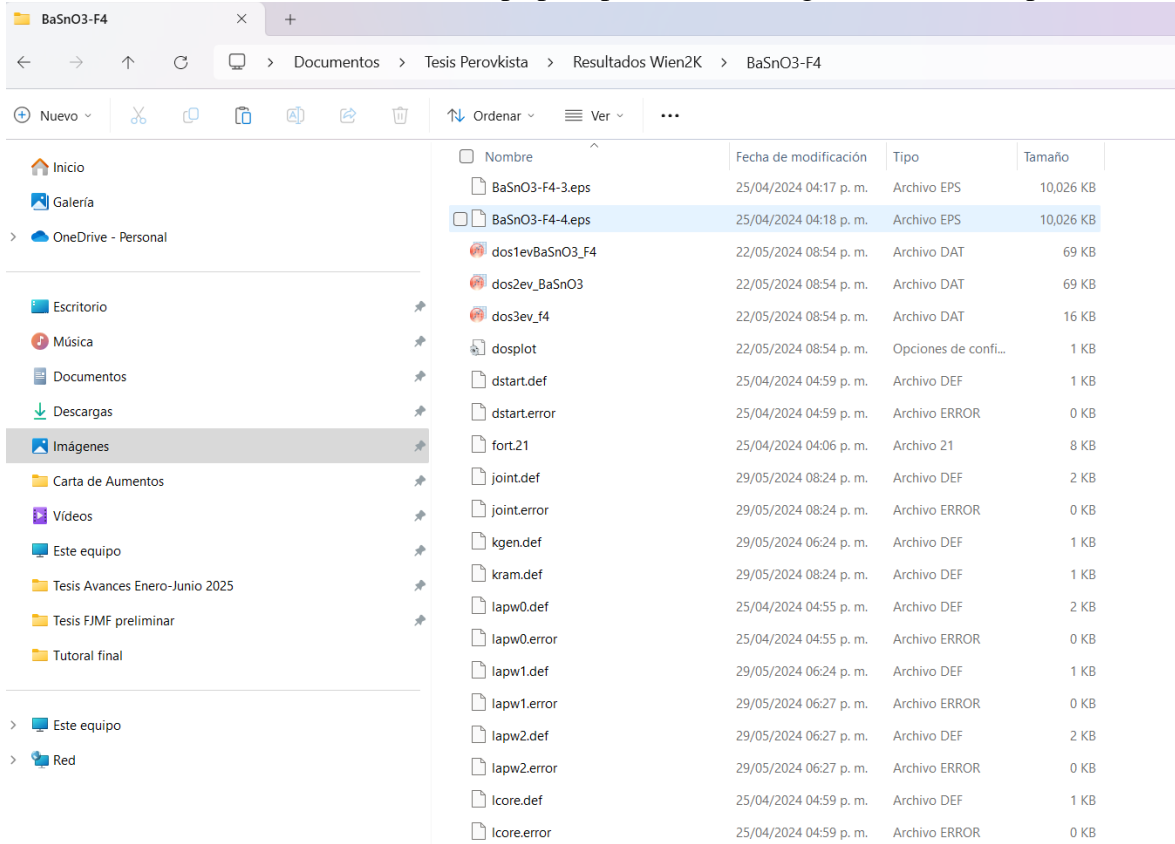
- **lstart:** calcula las densidades atómicas relativistas resolviendo las ecs. Dirac-Fock atómicas. Input: potencial xc y energía core-valencia.
- **Potenciales xc estables:** LDA, GGA- PBE96, GGA-WC06 (muchos más experimentales).
- **Separacion del core y valencia:** leaking del core.
- **dstart:** construye la densidad inicial como superposición de densidades atómicas. Parámetro gmax, relacionado con la expresión de la densidad en WIEN2k.

Una vez terminada la simulación se extraen los datos, como se observa en la imagen se pueden dar cuenta que son cuatro carpetas ordenadas y cada una de ellas representa una simulación, comenzando por la perovskita BaSnO3 pura y posteriormente por sus diferentes porcentajes de dopaje.



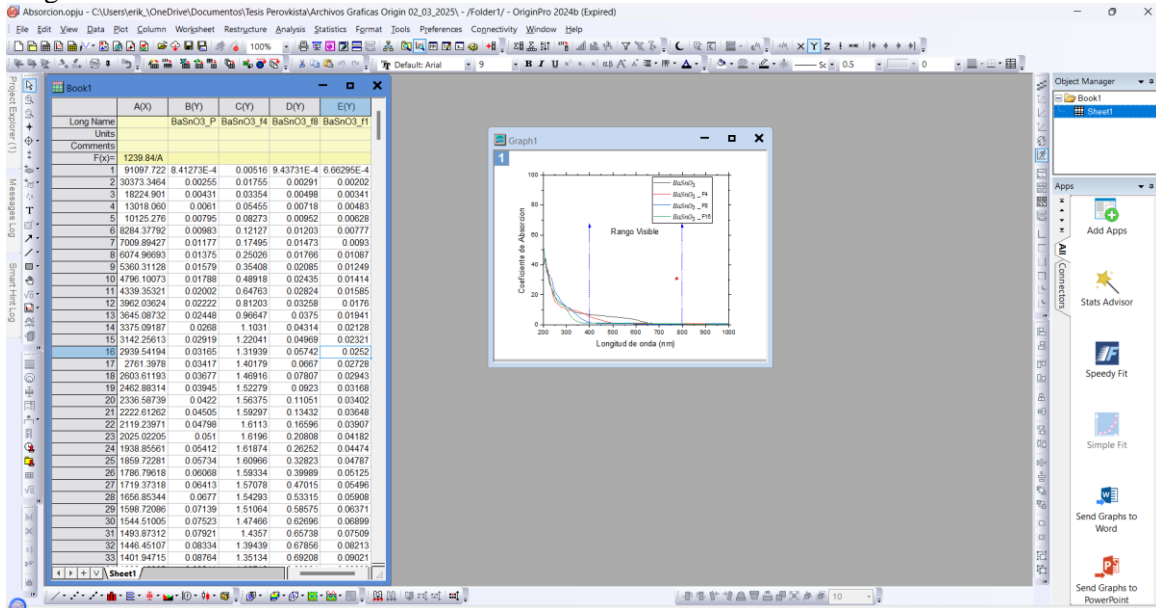
Figura_3.6 Evidencia de carpetas de extracción de datos.

En esta imagen se observa los archivos con diferentes formatos , eps,dot,def etc. generados por la simulación de la perovskita BaSnO₃ del dopaje correspondiente al 4% de fluor, el que interesa son los datos de los archivos eps para posteriormente graficarlos e interpretarlos.



Figura_3.7 Archivos de resultado de dopaje del 4%.

Finalmente, como se puede observar, esta es la interfaz del software OriginPro2024, que es el graficador que se utilizó para la interpretación de los resultados, en esta ilustración del lado izquierdo donde se ubica el tabulador están los datos obtenidos del software Wien2k, posteriormente una vez que ya se ordenó y están listos los datos se prosigue a graficar y ajustar los rangos de la gráfica acorde al comportamiento esperado del material en la zona de rango de luz visible.



Figura_3.8 Resultados del software OriginPro2024.

3.5 Volumen de Celda unitaria

La celda unitaria es la representación más pequeña de un material, lo que permite determinar diversas propiedades.

Entre ellas, el volumen de la celda unitaria es clave para analizar la composición del material y la cantidad de elementos que la conforman. Es importante destacar que la posición de los átomos influye en el volumen total de la celda, por lo que es fundamental calcular la contribución de cada átomo según su ubicación específica.

La relevancia de contar con un método para visualizar nuestro material nos permite enfocar los estudios de manera adecuada. A lo largo de este trabajo, se desarrollaron superceldas que siguen el mismo principio previamente expuesto [55].

Posición del átomo	Valor agregado al volumen de la celda unitaria
Vértices	1/8
Aristas	1/4
Caras	1/2
Dentro de la celda	1

Tabla_3.1 Ubicación específica de cada átomo.

3.6 Dopaje de un material

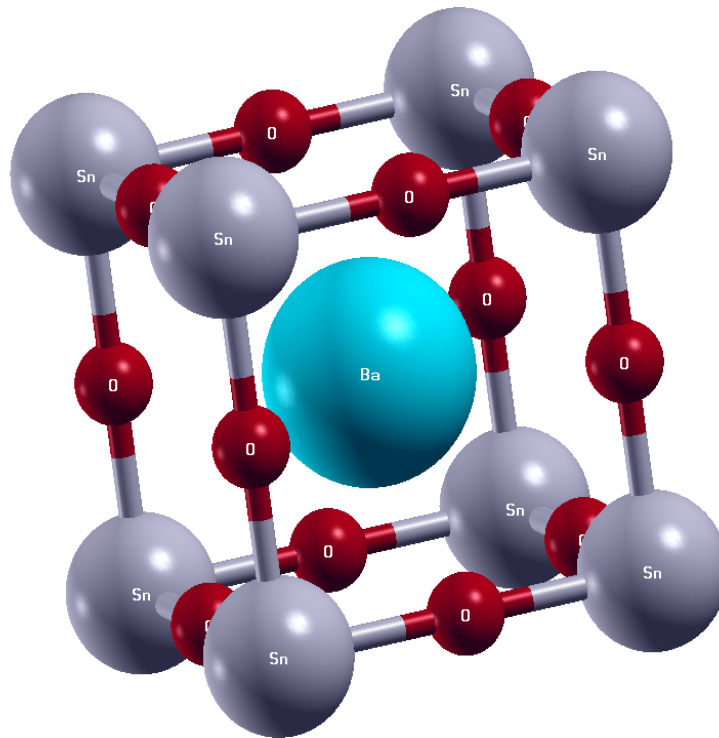
El dopaje consiste en la incorporación deliberada de impurezas en un semiconductor intrínseco con el propósito de optimizar sus propiedades eléctricas, ópticas y estructurales. Estas impurezas, que son sustancias o elementos químicos presentes en una cantidad específica dentro de un líquido, gas o sólido con una composición distinta a la del material base, pueden añadirse durante el proceso de síntesis de un material o compuesto. La inclusión de estas impurezas busca mejorar las características del compuesto, abarcando aspectos tanto eléctricos como ópticos, según el enfoque de nuestro estudio [56].

Capítulo 4: Resultados y Análisis

Modelo de la perovskita Oxido de Bario y Estaño

El BaSnO_3 en su estado puro cristaliza en una estructura cúbica tipo perovskita ideal. Se caracteriza por presentar una amplia brecha de banda, en el rango de 3.4 a 4.0 eV, lo que lo clasifica como un semiconductor de tipo n. Además, destaca por su elevada estabilidad térmica, propiedad que lo hace atractivo para aplicaciones en dispositivos electrónicos y optoelectrónicos.[57].

Estructura cristalina de BaSnO_3



Figura_4.1 Estructura cristalina (celda unitaria) de BaSnO_3 .

La estructura optimizada del BaSnO_3 presenta una fase cúbica tipo perovskita (ABO_3), donde el átomo de Ba ocupa la posición A en el centro de la celda unitaria, los átomos de Sn se localizan en los vértices del cubo y los oxígenos en los centros de las aristas, formando octaedros SnO_6 . La ausencia de distorsiones estructurales y la conservación de la simetría cúbica confirman la estabilidad del sistema en su fase ideal, en concordancia con resultados experimentales reportados en la literatura. La celda unitaria de BaSnO_3 tiene una estructura perovskita cúbica con el grupo espacial Pm-3m . En esta estructura, el catión Ba ocupa las esquinas, el catión Sn se ubica en el centro, y los átomos de oxígeno están en las caras del cubo, formando un octaedro alrededor de Sn. La constante de red es de aproximadamente 4.12 Å. La celda unitaria representa la unidad mínima repetida que contiene la disposición de átomos en el cristal.

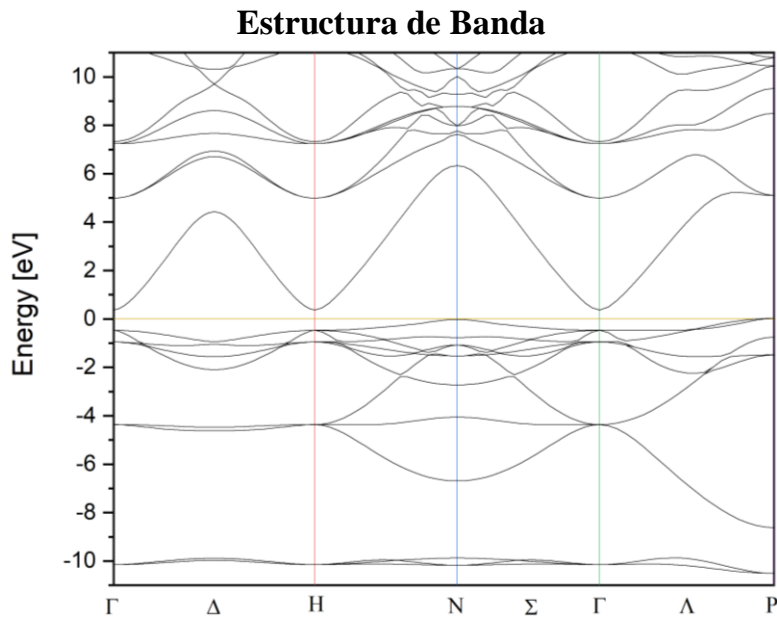


Figura _4.2 Estructura de banda.

La estructura de bandas electrónica del material fue calculada dentro del marco de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) a lo largo de las direcciones de alta simetría del espacio recíproco Γ - Δ -H-N- Σ - Γ - Λ -P. En la figura correspondiente, el nivel de Fermi fue fijado en 0 eV como referencia energética. Del análisis de la estructura de bandas se observa claramente la ausencia de estados electrónicos en el nivel de Fermi, lo que confirma el carácter semiconductor del sistema. La Banda Máxima de Valencia (VBM) se localiza en el punto N, mientras que la Banda Mínima de Conducción (CBM) se encuentra en el punto Γ . Dado que estos extremos no coinciden en el mismo vector de onda \mathbf{k} , el material presenta una brecha de banda indirecta (N- Γ).

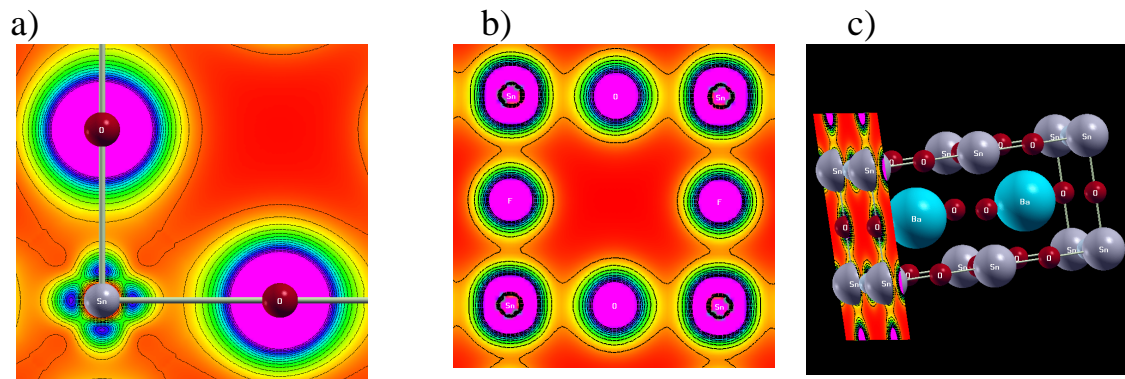
El valor calculado del intervalo de banda es aproximadamente 0.77 eV, obtenido mediante la aproximación GGA. Este valor es menor que el reportado experimentalmente (3.1–3.4 eV), lo cual es consistente con la conocida subestimación del band gap por parte de los funcionales locales y semilocales (LDA/GGA), atribuida a limitaciones en la descripción del potencial de intercambio-correlación y la ausencia de la discontinuidad del potencial exacto. La estructura de bandas permite describir la naturaleza electrónica de un material sólido. Cuando un gran número de átomos se organiza en una red cristalina, los niveles de energía discretos característicos de los átomos aislados se ensanchan y se dividen debido al solapamiento de sus orbitales, originando intervalos de energía aproximadamente-continuos. Estos intervalos se denominan bandas de estados permitidos, dentro de los cuales existe un gran número de estados electrónicos disponibles para ser ocupados por los electrones.

El nivel de Fermi se fijó en 0 eV como referencia energética, coincidiendo con la posición de la Banda Máxima de Valencia (VBM). Por encima de este nivel se ubica la banda de conducción, la cual presenta una marcada dispersión en las cercanías de su mínimo, comportamiento característico de materiales semiconductores y asociado a una baja masa efectiva de los portadores de carga. La región energética que separa la banda de valencia de

la banda de conducción se denomina brecha de banda (band gap), y constituye un parámetro fundamental en la determinación de las propiedades ópticas del material. Si la energía de la radiación electromagnética incidente es mayor que el valor de la brecha, el material absorberá dicha energía, promoviendo un electrón desde la banda de valencia hacia la banda de conducción y generando así una transición electrónica interbanda. En contraste, cuando la energía del fotón es inferior al valor del intervalo de banda, no ocurre excitación electrónica y la radiación atraviesa el material, lo que se traduce en transparencia dentro de ese rango energético.

En el caso particular del material analizado, se observa que la Banda Máxima de Valencia (VBM) y la Banda Mínima de Conducción (CBM) se localizan en diferentes puntos del espacio recíproco. Esta diferencia en el vector de onda indica que el sistema presenta una brecha de banda indirecta, ya que las transiciones electrónicas entre ambas bandas requieren la participación de fonones para conservar el momento cristalino.

Densidad Electronica

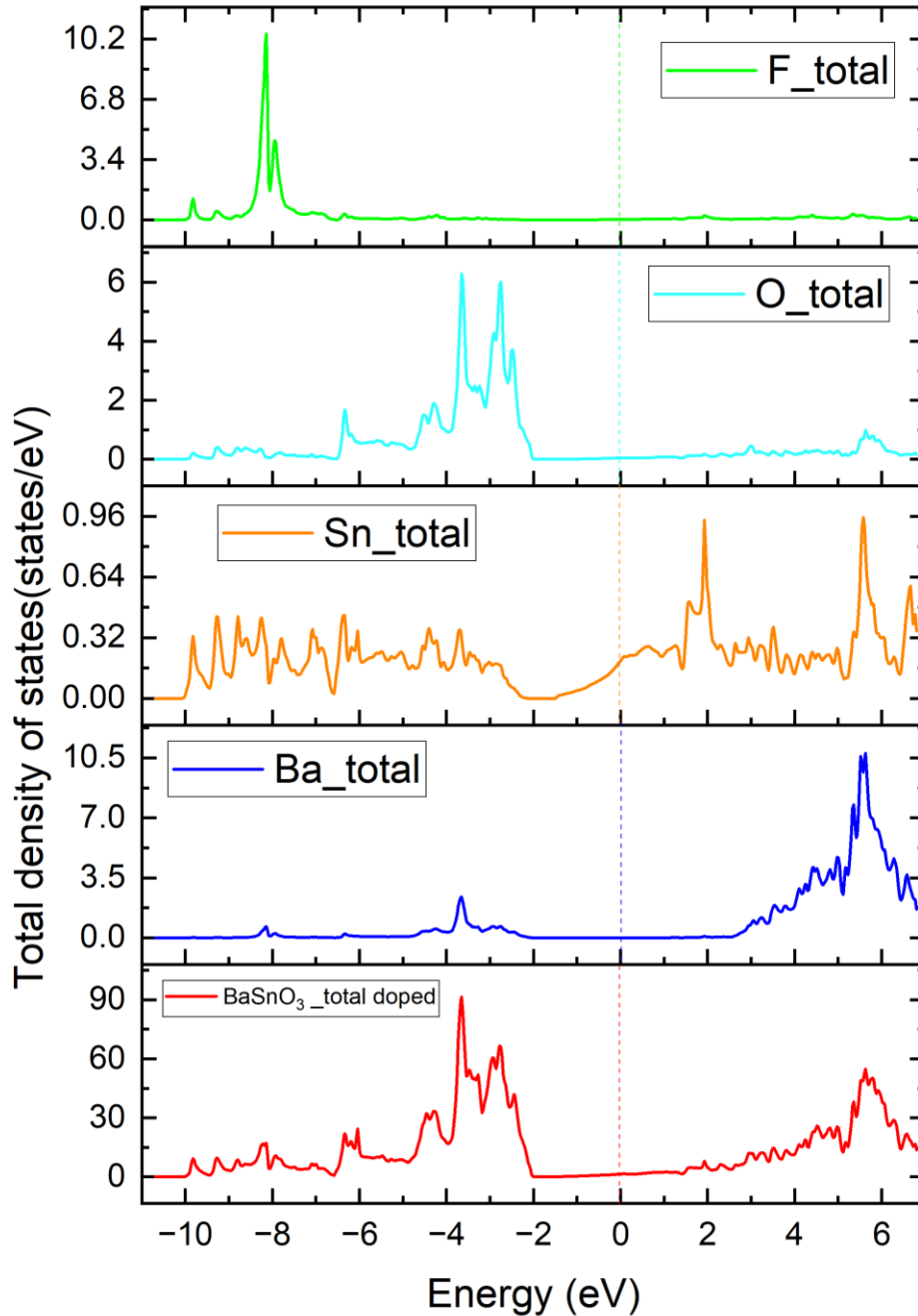


Figura_4.3 Densidad electrónica del (a) $BaSnO_3$ puro y (b) dopado con %12 de F (c) La estructura en diferente ángulo.

La densidad electrónica fue calculada y representada en un plano específico del cristal, definido a partir de tres átomos seleccionados estratégicamente con el objetivo de incluir al átomo dopante de flúor (F). Esta selección permite analizar directamente la distribución de carga electrónica y visualizar las interacciones del flúor con sus átomos vecinos más cercanos. En el plano considerado, los átomos vecinos del flúor corresponden principalmente al estaño (Sn). A partir de la distribución de las nubes electrónicas y del grado de superposición entre los átomos involucrados, es posible inferir la naturaleza del enlace químico formado entre el flúor y el estaño. En la gráfica presentada no se observa el átomo de bario (Ba), ya que este se encuentra fuera del plano seleccionado. En caso de requerirse su análisis, sería necesario definir un nuevo plano que lo incluya; sin embargo, debido a las distancias interatómicas calculadas, se determina que el flúor no presenta interacción significativa ni con el bario ni con otros oxígenos vecinos en términos de formación de enlace directo. Por lo tanto, el análisis se centra en la interacción F–Sn, que resulta ser la más relevante desde el punto de vista estructural y electrónico.

En las imágenes de densidad electrónica se aprecia la distribución característica de cada especie atómica: el oxígeno muestra una densidad predominantemente asociada a orbitales 2p, el estaño presenta contribuciones principalmente de carácter 5s (con posible hibridación), y el bario evidencia contribuciones asociadas a orbitales 5d. La forma y extensión de estas distribuciones permiten identificar el grado de localización o deslocalización electrónica en el sistema. La electronegatividad, entendida como la capacidad de un átomo para atraer densidad electrónica hacia sí mismo dentro de un enlace químico, juega un papel importante en la interpretación de los resultados. En la figura (a), correspondiente al material sin dopar, se observan las distribuciones electrónicas alrededor del estaño coordinado por oxígeno, formando la red octaédrica característica. En la figura (b), tras la sustitución de un átomo de oxígeno por flúor, se aprecia una redistribución de la densidad electrónica en torno al nuevo enlace F–Sn, evidenciando un carácter predominantemente covalente con cierto grado de polarización, lo que contribuye a la estabilidad estructural del sistema dopado. Finalmente, en la figura (c), se presenta una vista rotada de la estructura para mostrar con mayor claridad la geometría tridimensional y la disposición espacial del dopante dentro de la red cristalina. En conjunto, el análisis de la densidad electrónica confirma que el flúor se integra estructuralmente en el sitio del oxígeno y establece una interacción directa con el estaño, modificando localmente la distribución de carga sin generar distorsiones estructurales significativas en la red cristalina.

Densidad de estados totales (DOS)



Figura_4.4 Densidad de estados totales obtenidos de los diferentes porcentajes con respecto a la longitud de onda.

La densidad de estados totales (DOS) del óxido de bario y estaño dopado con flúor permite analizar la cantidad de estados electrónicos disponibles para los electrones en función de la energía, proporcionando información fundamental sobre el comportamiento electrónico del material. A partir de esta gráfica es posible identificar la distribución de estados en la banda

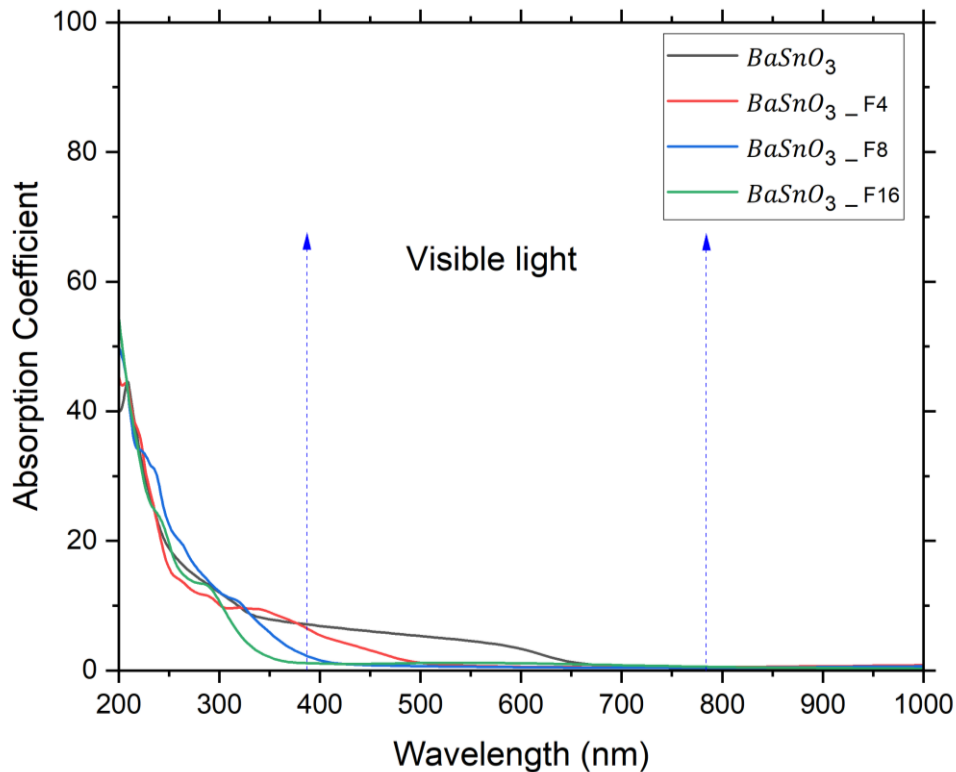
de valencia y en la banda de conducción, así como evaluar el efecto del dopaje sobre la estructura electrónica.

En el sistema dopado, se observa que la banda de valencia se extiende aproximadamente desde 0 hasta -10 eV con respecto al nivel de Fermi, el cual fue fijado en 0 eV como referencia energética. La región cercana al nivel de Fermi es particularmente importante, ya que determina la capacidad del material para conducir electricidad. La densidad de estados totales fue descompuesta en contribuciones parciales (PDOS) correspondientes a cada elemento constituyente del sistema: flúor (F), oxígeno (O), estaño (Sn) y bario (Ba), además de la contribución total del compuesto BaSnO_3 dopado. Este desglose permite identificar qué especies atómicas tienen mayor influencia en las propiedades electrónicas del material.

Se observa que los estados asociados al flúor, elemento dopante, presentan contribuciones cercanas al nivel de Fermi. Esta proximidad indica que el dopaje introduce estados electrónicos que favorecen la disponibilidad de portadores en la región próxima a la banda de conducción, lo que puede contribuir al incremento de la conductividad eléctrica. En particular, la interacción entre los estados del flúor y los orbitales del estaño modifica localmente la estructura electrónica, facilitando la generación de electrones libres. En cuanto a la interpretación de los ejes, el eje X representa la energía en electronvoltios (eV). Los valores negativos corresponden a estados por debajo del nivel de Fermi, mientras que los valores positivos representan estados por encima de este nivel. El eje Y muestra la densidad de estados, es decir, el número de estados electrónicos disponibles por unidad de energía en cada intervalo energético.

En conjunto, el análisis de la DOS total y parcial permite concluir que el dopaje con flúor modifica la distribución electrónica cerca del nivel de Fermi, incrementando la disponibilidad de estados que pueden participar en la conducción eléctrica y reforzando el carácter semiconductor tipo n del material.

Coefficiente de Absorción



Figura_4.5 Coeficiente de absorción obtenida de los diferentes porcentajes con respecto a la longitud de onda.

El coeficiente de absorción del material fue calculado para diferentes concentraciones de dopaje con flúor: BaSnO₃ puro (sin dopaje), BaSnO₃-F 4%, BaSnO₃-F 8% y BaSnO₃-F 16%. El objetivo de este análisis es evaluar el efecto de la concentración del dopante sobre las propiedades ópticas del sistema y determinar cómo la incorporación progresiva de flúor modifica el comportamiento de absorción. En la gráfica comparativa, el material puro se representa en color negro, el sistema con 4% de dopaje en rojo, 8% en azul y 16% en verde. El eje horizontal corresponde a la longitud de onda (nm), mientras que el eje vertical representa el coeficiente de absorción. Se ha delimitado explícitamente el rango del espectro visible entre 380 nm y 780 nm, con el fin de analizar la transparencia del material en esta región de interés tecnológico. Se observa que, en el rango visible, el coeficiente de absorción disminuye conforme aumenta la longitud de onda. Este comportamiento está directamente relacionado con las transiciones electrónicas Interbanda, las cuales dependen de la energía del fotón incidente. Cuando la energía del fotón es mayor que la brecha de banda, se producen excitaciones electrónicas desde la banda de valencia hacia la banda de conducción, lo que genera absorción óptica. Sin embargo, dentro del espectro visible, la energía de los fotones no es suficiente para inducir transiciones significativas si el material posee una brecha de banda amplia, como es el caso de los óxidos conductores transparentes (TCOs).

En consecuencia, la absorción en la región visible es baja, lo que se traduce en una alta transparencia óptica. Este comportamiento está estrechamente vinculado con la estructura electrónica del material, particularmente con el valor de la brecha de banda y la densidad de estados disponibles en las cercanías del borde de conducción. Además, factores como la composición química, la concentración del dopante y la posible presencia de defectos estructurales pueden influir en la magnitud del coeficiente de absorción.

Un resultado relevante del análisis es que, al incrementar la concentración de flúor, el coeficiente de absorción en el rango visible disminuye. Esto indica que el dopaje favorece una mayor transparencia del material. Desde el punto de vista fotovoltaico, esta característica es altamente deseable, ya que permite que una mayor cantidad de radiación solar atraviese la capa conductora transparente y alcance la unión p-n del dispositivo, donde se generan los pares electrón-hueco responsables del efecto fotovoltaico. En términos generales, en el intervalo de 380–780 nm el material mantiene un bajo coeficiente de absorción, comportamiento característico de los TCOs, debido a su amplia brecha de banda, que restringe las transiciones ópticas en esta región del espectro. Adicionalmente, se observa que el material presenta mayor absorción en el infrarrojo cercano, lo cual puede asociarse a transiciones intrabanda o efectos relacionados con portadores libres en sistemas dopados. En conjunto, estos resultados indican que el BaSnO₃ dopado con flúor combina alta transparencia en el rango visible con propiedades conductoras mejoradas, lo que lo convierte en un candidato prometedor para su aplicación como electrodo transparente en celdas solares y dispositivos fotovoltaicos integrados en edificaciones.

Refracción

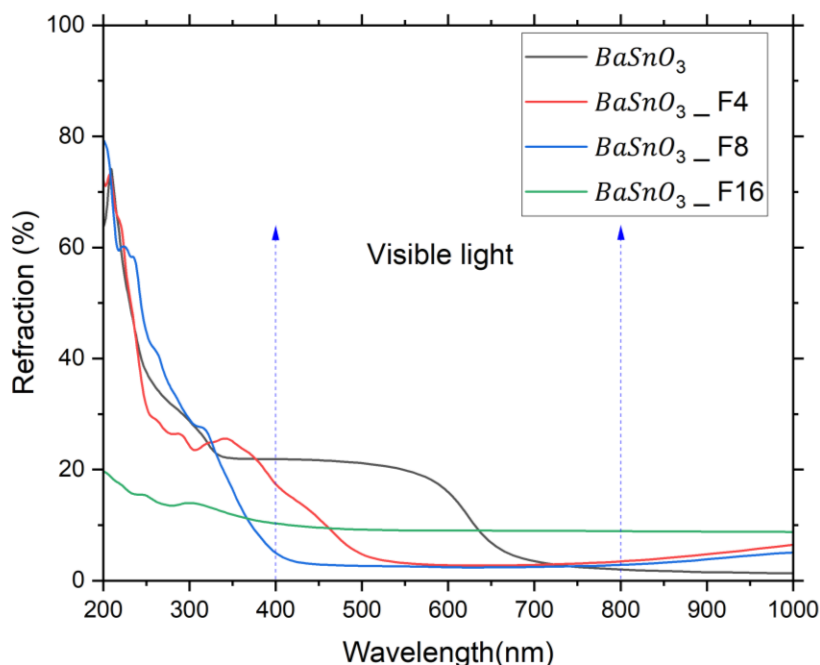
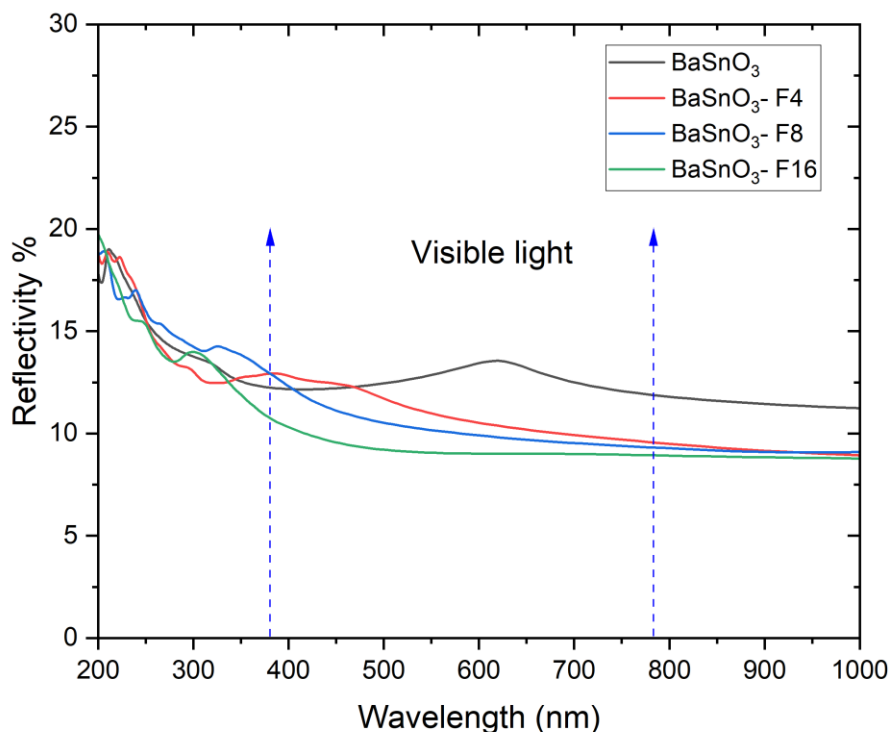


Figura _4.6 Refracción obtenida de los diferentes porcentajes con respecto a la longitud de onda.

La gráfica muestra la variación del índice de refracción (n) en función de la longitud de onda para el material $BaSnO_3$, tanto en su estado puro como dopado con diferentes concentraciones de flúor (F). El análisis permite evaluar cómo el dopaje modifica la respuesta óptica del sistema en distintas regiones del espectro electromagnético. En la región ultravioleta (200–400 nm), el índice de refracción presenta una marcada variación, caracterizada por picos y oscilaciones pronunciadas. Este comportamiento está asociado a transiciones electrónicas interbanda de alta energía, donde la interacción entre la radiación incidente y los electrones del material es más intensa. Los valores elevados del índice de refracción en esta región indican una fuerte respuesta óptica del material frente a radiación UV, lo cual está relacionado con su estructura electrónica y la proximidad a transiciones ópticas permitidas. En la gráfica comparativa, la línea negra corresponde al $BaSnO_3$ puro, mientras que las líneas roja, azul y verde representan las concentraciones de dopaje con flúor del 4%, 8% y 16%, respectivamente. En el rango visible (380–780 nm), el material puro presenta valores de índice de refracción mayores en comparación con los sistemas dopados. Por ejemplo, para el 4% de dopaje (línea roja), se observa un máximo cercano a 380 nm, seguido de una disminución progresiva conforme aumenta la longitud de onda. En términos generales, al incrementar la concentración de flúor se observa una reducción del índice de refracción en el rango visible. Esta disminución sugiere que el dopaje modifica la polarizabilidad electrónica del material, reduciendo su capacidad de desviar la trayectoria de la luz incidente. Desde el punto de vista físico, un índice de refracción menor implica menor desviación de los rayos luminosos y, por lo tanto, mayor transmisión óptica, lo cual favorece la transparencia del material. Esta característica es especialmente relevante en aplicaciones fotovoltaicas, donde se requiere que la radiación solar atraviese la capa conductora

transparente y alcance la unión p–n del dispositivo para generar pares electrón-hueco. El comportamiento espectral del índice de refracción proporciona información clave sobre la dispersión óptica y la interacción luz-materia en distintos rangos energéticos. En el espectro visible, los valores de n se mantienen en un intervalo aproximado entre 2 y 2.3, lo cual es consistente con valores típicos reportados para óxidos conductores transparentes. Aunque índices de refracción elevados pueden generar mayores pérdidas por reflexión en algunas aplicaciones, también resultan útiles en dispositivos ópticos como diodos emisores de luz (LEDs), sensores CMOS, pantallas de gran formato y componentes ópticos para sistemas de realidad virtual y aumentada. En conjunto, los resultados indican que el dopaje con flúor no solo modifica la estructura electrónica del BaSnO_3 , sino que también influye directamente en su respuesta óptica, reduciendo el índice de refracción en el rango visible y favoreciendo su desempeño como material transparente en aplicaciones optoelectrónicas y fotovoltaicas.

Reflexión

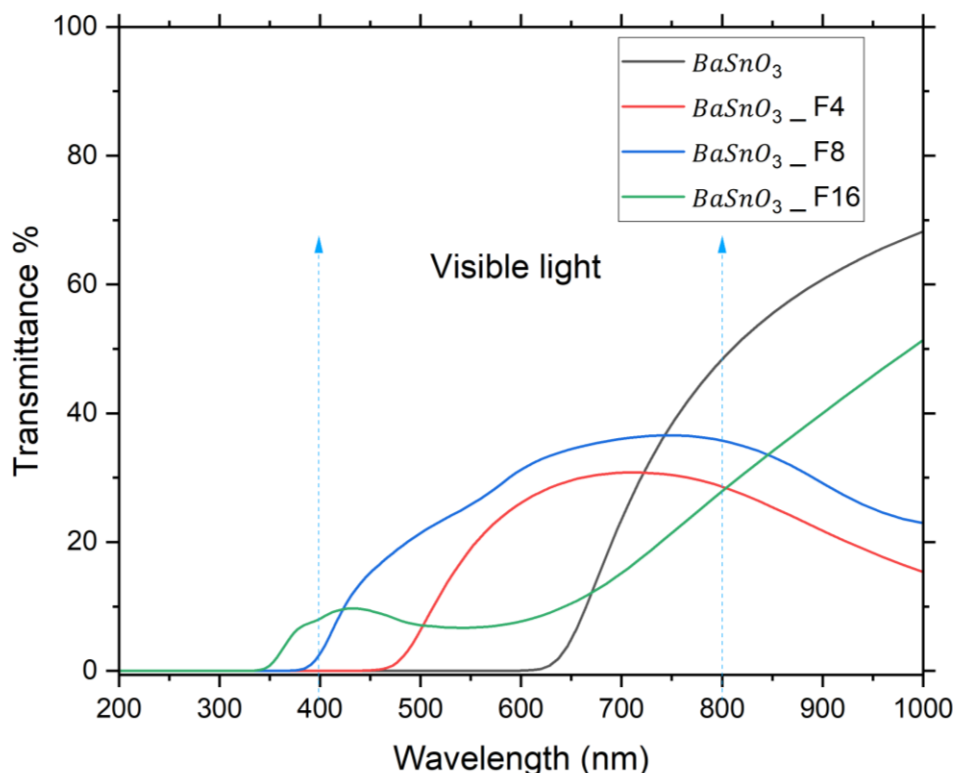


Figura_4.7 Reflexión obtenida de los diferentes porcentajes con respecto a la longitud de onda.

Para que la propiedad óptica de reflectividad sea adecuada en el presente proyecto, es necesario que el material presente valores bajos en el rango visible, ya que una menor reflectividad implica menores pérdidas ópticas por reflexión y, por lo tanto, mayor transmisión de luz hacia la región activa del dispositivo fotovoltaico. En la gráfica correspondiente, la línea negra representa el BaSnO₃ puro, el cual exhibe la mayor reflectividad en comparación con los sistemas dopados. A medida que se incrementa la concentración de flúor, la reflectividad disminuye progresivamente en el rango de luz visible (380–780 nm), que constituye la región de mayor interés tecnológico. En particular, el material dopado con 16% de flúor presenta los valores más bajos y un comportamiento más uniforme, aproximándose a una curva casi constante en esta región espectral. Este resultado indica una reducción significativa de las pérdidas por reflexión y, en consecuencia, un mejor aprovechamiento de la radiación incidente en aplicaciones como TCOs. El espectro de reflectividad en función de la longitud de onda muestra máximos y mínimos asociados a la interacción luz-materia y a la dispersión óptica del material. Estos extremos señalan las regiones espectrales donde el BaSnO₃ refleja mayor o menor fracción de la radiación incidente, proporcionando información relevante sobre sus propiedades ópticas y electrónicas.

En la mayor parte del espectro visible (aproximadamente 380–780 nm), la reflectividad del BaSnO₃ se mantiene en un intervalo aproximado entre 10% y 15%. Esto indica que el material presenta una transmisión significativa de luz visible, coherente con su amplia brecha de banda y con su potencial aplicación como óxido conductor transparente. La disminución de la reflectividad al aumentar el dopaje sugiere que la incorporación de flúor modifica la respuesta dieléctrica del sistema, favoreciendo una mayor transmisión óptica. A partir de longitudes de onda cercanas a 780 nm, en la región del infrarrojo cercano, se observa una tendencia decreciente en la reflectividad del material dopado con flúor. Este comportamiento indica que el compuesto se vuelve más transparente a mayores longitudes de onda, lo cual puede estar relacionado con la reducción de transiciones ópticas interbanda en esa región energética. En términos comparativos, el BaSnO₃ puro presenta mayor reflectividad y, por lo tanto, mayor pérdida de radiación incidente. En cambio, al incrementar la concentración de flúor, la reflectividad disminuye, siendo el sistema con 16% de dopaje el que muestra el comportamiento óptico más favorable. Esto implica que una mayor fracción de la radiación electromagnética puede atravesar la capa conductora y alcanzar la unión p–n del dispositivo fotovoltaico, contribuyendo a una mejor generación de pares electrón-hueco y, en consecuencia, a una mayor eficiencia del sistema. En conjunto, estos resultados indican que el dopaje con flúor mejora las propiedades ópticas del BaSnO₃ al reducir la reflectividad en el rango visible, reforzando su viabilidad como material TCO para aplicaciones en sistemas fotovoltaicos transparentes y dispositivos optoelectrónicos avanzados.

Transmitancia



Figura_4.8 Transmitancia obtenida de los diferentes porcentajes con respecto a la longitud de onda.

La transmitancia es la fracción de radiación electromagnética incidente que logra atravesar un material después de interactuar con él. Esta propiedad óptica es fundamental en el estudio de materiales destinados a aplicaciones optoelectrónicas, ya que permite evaluar qué porcentaje de la energía luminosa es efectivamente transmitida a través del sistema. En la gráfica correspondiente se analiza la transmitancia del BaSnO₃ puro y dopado con diferentes concentraciones de flúor (4%, 8% y 16%). Las curvas muestran que, a medida que aumenta el porcentaje de dopaje, la transmitancia disminuye progresivamente. En particular, el material con 16% de flúor (línea verde) presenta los valores más bajos de transmitancia dentro del rango visible (380–780 nm), mientras que el BaSnO₃ puro (línea negra) exhibe los valores más altos en toda esta región espectral. En el intervalo de 200–350 nm (región ultravioleta), la transmitancia es prácticamente nula para todas las muestras, lo cual es consistente con la absorción asociada a transiciones electrónicas de alta energía. Sin embargo, a partir de aproximadamente 380 nm, correspondiente al inicio del espectro visible, las curvas muestran un incremento significativo en la transmitancia. A 780 nm, el BaSnO₃ puro alcanza aproximadamente un 50% de transmitancia, mientras que el material con 16% de dopaje presenta un valor cercano al 24%. Este comportamiento indica que el incremento en la concentración de flúor provoca una reducción en la transmisión óptica, lo cual puede atribuirse a un aumento en los procesos de absorción y/o reflexión dentro del material. Desde el punto de vista físico, la transmitancia está relacionada con la absorción y la reflectividad

a través de la conservación de la energía incidente. Por lo tanto, una disminución en la transmitancia implica un aumento relativo en la fracción de energía absorbida o reflejada. En consecuencia, el material dopado presenta un comportamiento más opaco en comparación con el compuesto puro, el cual muestra menor absorción y reflexión, y por ende mayor transparencia. Estos resultados indican que, aunque el dopaje con flúor puede mejorar ciertas propiedades electrónicas (como la conductividad), también influye negativamente en la transmitancia óptica cuando se incrementa en altas concentraciones. El BaSnO₃ puro, al presentar mayor transmitancia en el rango visible, resulta más adecuado para aplicaciones donde se requiere alta transparencia, como pantallas, dispositivos ópticos, sensores y, especialmente, capas conductoras transparentes en celdas solares, objetivo principal de esta investigación.

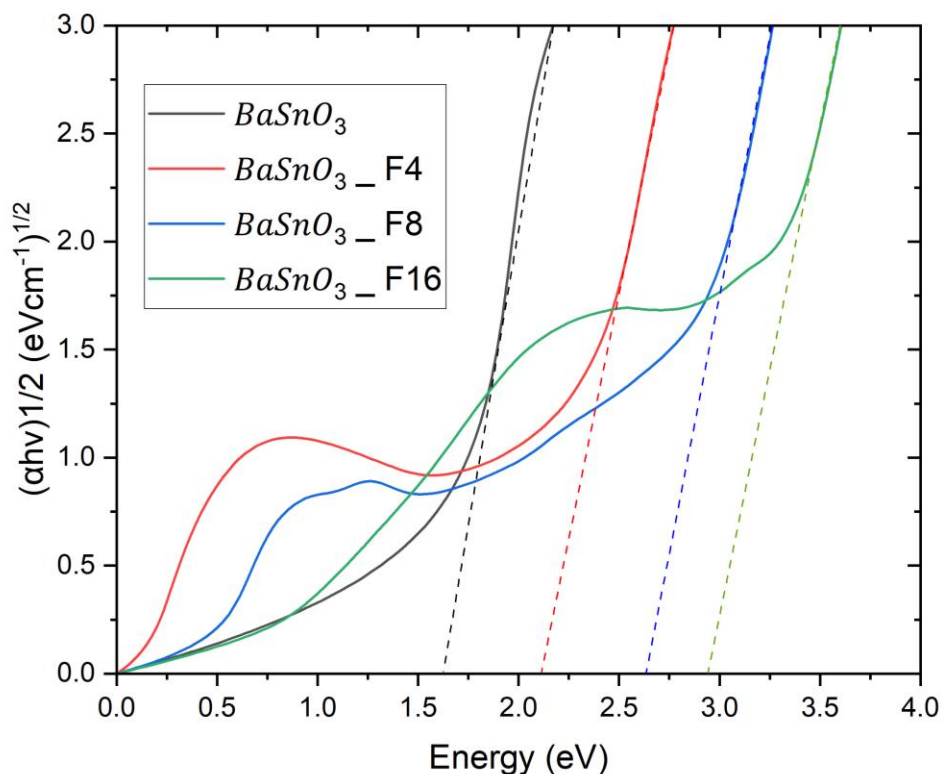
Muestra	Transmitancia Máxima	Comentario
BaSnO₃_Puro	~85%	Muy transparente en visible
BaSnO₃_F4	~40-45%	Transparencia media
BaSnO₃_F8	~50%	Similar a F4, pero más ancha la curva
BaSnO₃_F16	~60%	Mejor transparencia que F4 y F8.

Tabla_4.1 Comparativa de Transmitancia Máxima según el Nivel de Dopaje con Flúor

A partir del análisis conjunto de la gráfica y la tabla, se pudo observar que el comportamiento de las propiedades ópticas está directamente relacionado con las modificaciones en la estructura electrónica inducidas por el dopaje. En particular, dentro del rango de luz visible (380–780 nm), se identificó que al incrementar la concentración de flúor disminuye la transmitancia del material.

Esto implica que el BaSnO₃ puro presenta los valores más altos de transmitancia en la región visible, que es precisamente la zona de mayor interés en este proyecto. En consecuencia, aunque el dopaje puede mejorar ciertas propiedades electrónicas, el material sin dopar resulta más favorable desde el punto de vista de transparencia óptica en el rango espectral relevante para aplicaciones fotovoltaicas.

Banda prohibida (Tauc)



Figura_4.9 Banda prohibida obtenida de los diferentes porcentajes con respecto a la longitud de onda.

El análisis del coeficiente de absorción en función de la energía del fotón, particularmente en la región del borde de absorción fundamental, permite determinar el ancho de banda óptico y la naturaleza de la transición electrónica del material. Para estimar el intervalo de banda óptica (E_g) de las muestras, se empleó el método de Tauc, considerando el modelo correspondiente al tipo de transición electrónica evaluada. Los resultados obtenidos a partir de la gráfica de Tauc para el BaSnO_3 puro y dopado con diferentes concentraciones de flúor (4%, 8% y 16%) permiten identificar el valor de la energía de la banda prohibida (gap óptico) en cada caso. Para determinar E_g , se extrapolaron la región lineal de cada curva hasta interceptar el eje de la energía (línea punteada), procedimiento estándar en este método. El punto de intersección con el eje horizontal corresponde al valor estimado del intervalo de banda óptica. En el caso del BaSnO_3 puro (línea negra), el valor del gap óptico obtenido es aproximadamente 1.7 eV. Se observa que, al incrementar la concentración de flúor, el valor del intervalo de banda aumenta progresivamente, alcanzando su valor máximo para la muestra con 16% de dopaje. Este ensanchamiento del gap óptico puede atribuirse a modificaciones en la estructura electrónica inducidas por el dopante, como cambios en la densidad de estados cercana al borde de conducción o efectos asociados a la concentración de portadores. Asimismo, se realizó la determinación del tipo de transición electrónica para el BaSnO_3 con distintas concentraciones de flúor. El análisis indica que el material presenta un comportamiento compatible con una transición indirecta, en concordancia con los resultados obtenidos previamente en la estructura de bandas electrónica. Este

comportamiento se mantiene tanto para el compuesto puro como para las muestras dopadas al 4%, 8% y 16%.

Tabla del gap.

Muestra	Línea	Eg estimado (eV)
BaSnO ₃ _Puro	Negra	~2.65eV
BaSnO ₃ _F4	Roja	~2.85eV
BaSnO ₃ _F8	Azul	~3.05eV
BaSnO ₃ _F16	Verde	~3.25eV

Tabla_4.2 Banda prohibida (band gap).

De acuerdo con los resultados obtenidos, se observa que al incrementar la concentración del dopante, el nivel de energía correspondiente a la banda prohibida (Eg) tiende a aumentar. Es decir, la brecha de banda se ensancha progresivamente conforme se incrementa el porcentaje de flúor incorporado en la red cristalina.

Este comportamiento indica que el dopaje influye directamente en las propiedades electrónicas del material, modificando su estructura de bandas y, en consecuencia, su respuesta óptica. El aumento del intervalo de banda sugiere que la incorporación de flúor genera cambios en la distribución de estados electrónicos cercanos al borde de la banda de conducción y la banda de valencia, lo cual repercute en la energía necesaria para promover transiciones electrónicas.

Para la determinación del intervalo de banda óptico en esta investigación se utilizó la relación de Tauc, la cual se expresa como:

$$(\alpha h)^n = A(h\nu - E_g)$$

donde α es el coeficiente de absorción, $h\nu$ es la energía del fotón, A es una constante dependiente del material, E_g es la energía de la banda prohibida y el exponente n depende del tipo de transición electrónica (por ejemplo, $n=1/2$ para transiciones directas permitidas y $n=2$ para transiciones indirectas permitidas).

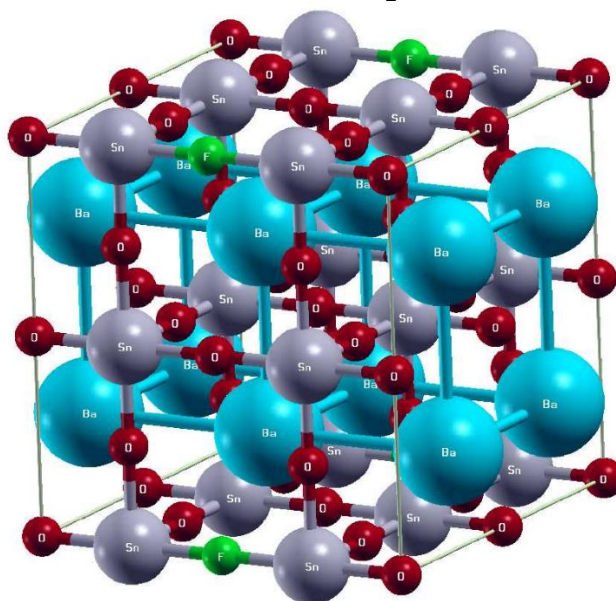
El intervalo de banda de tipo indirecto implica que la transición electrónica entre la banda de valencia y la banda de conducción no ocurre a un mismo momento cristalino (k). En un material con banda prohibida indirecta, la promoción de un electrón requiere no solo el aporte de energía suficiente para superar el bandgap (Eg), sino también un cambio de momento, el cual es generalmente asistido por la interacción con un fonón, es decir, una vibración de la red cristalina.

Debido a este requisito adicional de conservación del momento, la probabilidad de recombinación radiativa directa entre electrones y huecos disminuye. Como consecuencia, los portadores de carga tienden a presentar una mayor vida media antes de recombinarse. Esta reducción en la tasa de recombinación radiativa puede favorecer el transporte de carga,

ya que los electrones y huecos disponen de un mayor tiempo para ser recolectados en los contactos del dispositivo.

Esta característica resulta particularmente ventajosa en dispositivos optoelectrónicos como las celdas solares, donde el objetivo principal es maximizar la separación y recolección de portadores fotogenerados antes de que ocurra la recombinación. En este contexto, bajo un diseño estructural adecuado y una optimización del transporte de carga, la presencia de un bandgap indirecto puede contribuir a mejorar la eficiencia de conversión de energía, especialmente cuando se combina con estrategias que incrementen la absorción óptica y reduzcan los mecanismos no radiativos de recombinación.

Super celda 4x2x2 BaSnO₃ dopada con Flúor (F)



Figura_4.10 super celda.

Para modelar concentraciones bajas de dopaje en un sistema cristalino, generalmente es necesario trabajar con estructuras de mayor tamaño que la celda unitaria primitiva. Para ello, se construye una supercelda, la cual se genera mediante la expansión de la celda unitaria en una o más de las tres direcciones cristalográficas. Esta expansión se realiza multiplicando la celda base por factores enteros (por ejemplo, $2 \times 1 \times 1$, $2 \times 2 \times 1$, $2 \times 2 \times 2$, etc.), lo que permite aumentar el número total de átomos en la estructura y, por tanto, simular concentraciones de dopaje más realistas y controladas. Una vez construida la supercelda, se introduce el dopante mediante sustitución atómica, es decir, reemplazando un átomo anfitrión por un átomo del elemento dopante. En este trabajo, el dopaje se realizó con flúor (F), considerando su sustitución en el sitio del oxígeno dentro de la red cristalina de BaSnO₃. La concentración de dopaje se determina en función del número de átomos sustituidos respecto al total de átomos equivalentes en la supercelda. Para justificar la sustitución del oxígeno por flúor, se llevó a cabo un análisis de electronegatividad y estabilidad energética, con el objetivo de evaluar la viabilidad estructural y termodinámica del sistema dopado. Además, se estudiaron las distintas configuraciones posibles, considerando la ocupación del flúor en los diferentes sitios cristalográficos disponibles (sitios de oxígeno, bario y estaño). Los cálculos de energía total revelaron que la configuración más estable corresponde a aquella en la que el flúor sustituye al oxígeno, ya que presenta la energía mínima del sistema.

En contraste, las configuraciones en las que el flúor ocupa los sitios de bario o estaño resultan energéticamente menos favorables. Este comportamiento se explica por la compatibilidad química y electrónica entre el flúor y el oxígeno, así como por consideraciones de tamaño iónico y estabilidad estructural. Con base en estos resultados, el resto de los cálculos se realizaron considerando que el sitio preferencial del flúor es el del oxígeno.

A partir de esta configuración estable, se modelaron diferentes concentraciones de dopaje mediante sustitución atómica controlada, lo que permitió predecir las propiedades físicas del sistema, particularmente las propiedades ópticas y electrónicas. Estos resultados son relevantes para evaluar el potencial del material en aplicaciones optoelectrónicas, especialmente en dispositivos como celdas solares

Conclusión

En este trabajo, la estructura perovskita del BaSnO_3 fue modelada y optimizada energéticamente para obtener su estado fundamental, garantizando así la confiabilidad de los cálculos posteriores. A partir de esta estructura optimizada, se introdujeron diferentes concentraciones de flúor sustituyendo átomos de oxígeno en la red cristalina, con el objetivo de analizar la influencia del dopaje sobre las propiedades electrónicas y ópticas del sistema. La optimización estructural permitió determinar las configuraciones más estables para cada concentración estudiada, asegurando que los resultados obtenidos correspondan a estados físicamente realistas.

Para la conclusión de la presente tesis, se aplicó la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) como herramienta fundamental para el estudio teórico y computacional de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del material BaSnO_3 dopado con diferentes porcentajes de flúor mediante sustitución atómica. Esta metodología permitió analizar el comportamiento del sistema a nivel cuántico, proporcionando una descripción de la distribución electrónica y de los efectos inducidos por el dopaje en la red cristalina.

Se pudo determinar la determinación precisa de estos parámetros es esencial, ya que pequeñas variaciones estructurales pueden generar cambios significativos en las propiedades físicas del material.

Los resultados muestran que la incorporación de flúor produce modificaciones favorables en la estructura de bandas y en la densidad de estados, promoviendo la formación de portadores de carga adicionales y mejorando la conductividad eléctrica del material. Al mismo tiempo, el ancho de banda prohibida no se ve comprometido, lo que preserva su transparencia en la región visible del espectro electromagnético. Se concluye que el equilibrio entre alta conductividad y elevada transmitancia óptica es una característica esencial para su aplicación como óxido conductor transparente.

En consecuencia, el dopaje controlado con flúor mejora las propiedades optoelectrónicas del BaSnO_3 , incrementando su potencial para ser empleado como un óxido conductor transparente (TCO) en dispositivos fotovoltaicos. Asimismo, se mostró que los resultados concuerdan con los resultados obtenidos comparados con las expectativas teóricas y con reportes previos en la literatura científica, lo que respalda la validez del enfoque metodológico y el estudio realizado utilizado.

Referencias:

- [1] Ardila, P. R. F. (s. f.). *Determinación teórica de la banda prohibida Band gap del $\text{Bi}(\text{OH})\text{CrO}_4$ en su estructura mínima, celda unitaria y sistema periódico.*
- [2] Aristizábal Duarte, L. M. (2024). *Electrodeposición de capas de óxido de níquel (NiOx) dopado con lantano y evaluación de sus propiedades de transporte de huecos en celdas solares de perovskita de arquitectura invertida.* <https://hdl.handle.net/1992/75791>
- [3] Aucar, M. G. (2021). *Implementación de métodos de mecánica cuántica para modelar la interacción ligando-proteína y su aplicación en el descubrimiento de fármacos líderes.*
<http://repositorio.unne.edu.ar/xmlui/handle/123456789/27737>
- [4] Barragán, N. E. V. (2024). *Obtención y estudio de películas semiconductoras tipo p+ de ZnTe:N y Sb_2Te_3 para aplicaciones fotovoltaicas basadas en la heteroestructura CdS/CdTe .* <https://ri-ng.uaq.mx/handle/123456789/11216>
- [5] Barranco Cisneros, J., Barranco Cisneros, J., & 554899. (2020). *Síntesis y caracterización óptica de fluoruros metálicos en película delgada para aplicaciones en microcavidades de silicio.*
<https://hdl.handle.net/20.500.12371/19063>
- [6] Bartolomé, F., Damborenea, J. de, García Fierro, J. L., Figueras, A., González de la Campa, J., Hernando, A., Pascual, J., San Román, J., & Zaldo, C. (2007). *Nuevos materiales en la sociedad del siglo XXI.* Consejo Superior de Investigaciones Científicas (España).
<https://digital.csic.es/handle/10261/3155>
- [7] Bravo Ordoñez, J. (2026). *Efectos del desorden en la transmisión de la luz en nanomateriales con propiedades fotónicas.* <https://repositorio.unal.edu.co/handle/unal/89438>
- [8] Calderón Naranjo, C. P. (2024). *Diseño y simulación de un seguidor solar para mejorar el rendimiento de paneles solares portátiles [bachelorThesis].*
<http://dspace.ups.edu.ec/handle/123456789/28740>

- [9] Campos, E. B. (2020). *Presente y futuro de las tecnologías verdes: Contribuciones desde la Universitat de València*. Universitat de València.
- [10] Cañón Bermúdez, J. D. (2025). *Fabricación y caracterización de capas delgadas graduadas y multicapa de InxAl1-xN para su potencial uso en la generación de energía fotovoltaica*. <https://repositorio.unal.edu.co/handle/unal/88264>
- [11] Carranza Sánchez, A. C. (2025). *Estudio teórico-experimental de celdas solares basadas en las heteroestructuras IZO/CdTe e IZO/CuO*. <https://hdl.handle.net/20.500.12371/31098>
- [12] Chavarría, D. A. A. (2024). *Efecto del espesor de la película CdTe obtenida mediante erosión catódica sobre la eficiencia en ventanas fotovoltaicas*. <https://ri-ng.uaq.mx/handle/123456789/9932>
- [13] Coromina, P. S. (2025). *Todos los colores del Universo. El descubrimiento del espectro de radiación electromagnética*. Edicions Universitat Barcelona.
- [14] De Miguel Armisen, D. (2025). *El algoritmo de estimación de la fase cuántica en ordenadores cuánticos y sus aplicaciones*. <http://hdl.handle.net/10045/154709>
- [15] Djouah, H. E. (s. f.). *TRABAJO FIN DE MÁSTER*.
- [16] Doncel, M. G. (1997). El electrón y la probabilidad cuántica. *Arbor*, 158(622), 173-190. <https://doi.org/10.3989/arbor.1997.i622.1803>
- [17] Foglia, N. O. (2019). *Simulación computacional de dinámica electrónica y reactividad química* [Tesis Doctoral, Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales]. https://bibliotecadigital.exactas.uba.ar/collection/tesis/document/tesis_n6669_Foglia
- [18] Fontal, B. (s. f.). *El espectro electromagnético y sus aplicaciones*.
- [19] García Fernández, J. (2021). *Influencia del orden estructural en el comportamiento luminescente de óxidos transparentes conductores complejos*. <https://hdl.handle.net/20.500.14352/11392>
- [20] Gómez, Á. M. (s. f.). *Simulación microscópica mediante dinámica molecular, Monte Carlo y teoría del funcional de la densidad. Una aproximación matemática*.
- [21] González Morales, S. (2025). *Espectrometría de masas elemental para el estudio de nanoestructuras metálicas como herramientas de diagnóstico y tratamiento en biomedicina y salud*

- [Doctoral thesis]. <https://digibuo.uniovi.es/dspace/handle/10651/81430>
- [22] Hernández-Aguirre, F. A., Tánori-Ruíz, V. A., Orrante-Sakanassi, J. A., & Vázquez-Palma, M. G. (2019). Medidor bidireccional trifásico interconectado a la red con monitoreo de la generación de energía eléctrica del conjunto panel-microinversor. *Revista de Ingeniería Eléctrica*, 21-32. <https://doi.org/10.35429/JEE.2019.8.3.21.32>
- [23] Hernández-Valle, A., & Chaves-Villarreal, C. (2014). Síntesis de nanoestructuras de ZnO en vidrio recubierto con In₂O₃/SnO₂ Deposición química en fase gaseosa. *Revista Tecnología en Marcha*, pág. 41-51. <https://doi.org/10.18845/tm.v27i0.2148>
- [24] Ibarra Santacruz, J. J. (2016). *Hacia un análisis del determinismo en la física cuántica* [Monografía]. Universidad de Nariño. <https://sired.udenar.edu.co/7699/>
- [25] *Item 1002/1352 | Repositorio CIO*. (2025, abril 1). <https://cio.repositorioinstitucional.mx/jspui/handle/1002/1352>
- [26] *Item 1004/843 | Repositorio CIMAV*. (2017, septiembre 19). <https://cimav.repositorioinstitucional.mx/jspui/handle/1004/843>
- [27] *Item 1009/327 | Repositorio INAOE*. (2017a, marzo 2). <https://inaoe.repositorioinstitucional.mx/jspui/handle/1009/327>
- Item 1009/327 | Repositorio INAOE*. (2017b, marzo 2). <https://inaoe.repositorioinstitucional.mx/jspui/handle/1009/327>
- [28] *Item 1009/1467 | Repositorio INAOE*. (2018, octubre 4). <https://inaoe.repositorioinstitucional.mx/jspui/handle/1009/1467>
- [29] Kragh, H. (2007). *Generaciones cuánticas*. Ediciones AKAL.
- [30] Larrouyet, M. C. (2015). *Desarrollo sustentable: Origen, evolución y su implementación para el cuidado del planeta*. <http://ridaa.unq.edu.ar/handle/20.500.11807/154>
- [31] Lozano Caicedo, J. D. (2021a). *Síntesis, caracterización y estudio de las propiedades estructurales y ópticas del sistema Ba_{0.9}La_{0.1}Ce_{0.9}Sm_{0.09}O_{3-d}*. <https://hdl.handle.net/1992/53977>
- [32] Lozano Caicedo, J. D. (2021b). *Síntesis, caracterización y estudio de las propiedades estructurales y*

ópticas del sistema Ba_{0.9}La_{0.1}Ce_{0.9}Sm_{0.09}O_{3-d}. <https://hdl.handle.net/1992/53977>

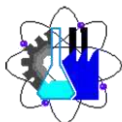
- [33] Martínez, J. M. C. (2025). *EN OPCIÓN AL GRADO DE: DOCTORADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES*.
- [34] Medina Sierra, J. C. (2014). *Efecto del dopaje con elementos lantánidos sobre las propiedades ópticas, estructurales y fotocatalíticas de TiO₂*. <https://repositorio.unal.edu.co/handle/unal/55267>
- [35] Moreno Yalet, N. (2025). *Investigación teórica de la interacción entre moléculas, nanoestructuras y superficies* [Tesis, Universidad Nacional de La Plata]. <https://doi.org/10.35537/10915/181872>
- [36] Muñoz Fernández, L. (2021). *Síntesis, caracterización y desarrollo de nuevos dispositivos y aplicaciones basados en partículas nanoestructuradas híbridas de sistemas semiconductores de óxidos metálicos*. <https://hdl.handle.net/10016/34766>
- [37] Nussenzveig, H. M. (s. f.). *¿Por qué aparecen en el cielo esos bellos arcos coloreados cuando las gotas de agua difunden la luz del sol? La respuesta a esta difícil pregunta ha puesto a contribución todos los recursos de la física matemática*.
- [38] Pachón Rojas, M. P. (2025). *Luz en mutación: Diseño material para la reconfiguración óptica*. <https://repositorio.uniandes.edu.co/entities/publication/repositorio.uniandes.edu.co>
- [39] Peña Negrete, J. A. (2013). *Síntesis y cálculo de las propiedades estructurales y electrónicas del material Sr₂TiCrO₆ aplicando el formalismo de la teoría funcional densidad (DFT)*. <https://repositorio.unal.edu.co/handle/unal/36166>
- [40] Posada Posada, S. (2024). *Comparación de la caracterización entre panel de silicio policristalino optimizado con placa superficial modificada geométricamente Vs. La Teja Solar CIGS*. <https://repositorio.unal.edu.co/handle/unal/87735>
- [41] Ramos, M., & Ximena, A. (2021a). *Análisis comparativo de las principales tecnologías de la Energía Solar Fotovoltaica: Alcance comercial, aplicaciones y retos*. <http://repository.unad.edu.co/handle/10596/40460>
- [42] Ramos, M., & Ximena, A. (2021b). *Análisis comparativo de las principales tecnologías de la Energía Solar Fotovoltaica: Alcance comercial, aplicaciones y retos*.

<http://repository.unad.edu.co/handle/10596/40460>

- [43] Rico, F. F., & Castrillón, Y. U. L. (2019). *Energía solar fotovoltaica*. Alpha Editorial.
- [44] Robledo, A. J. (2019). *Síntesis y caracterización de semiconductores de película delgada de Zn(O,S), para su empleo en celdas solares* [Thesis, Universidad Nacional de Mar del Plata. Facultad de Ingeniería. Argentina].
<https://rinfi.fi.mdp.edu.ar/xmlui/handle/123456789/220>
- [45] Rosales, K. R. (2023). *Propiedades optoelectrónicas de electrodos transparentes tipo p para su uso en celdas solares basadas en CdS/CdTe*. <https://ri-ng.uaq.mx/handle/123456789/7824>
- [46] Schwarz, D. K. (s. f.). *An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*.
- [47] Segura, C. A. Q. (2012). Síntesis de películas transparentes y conductoras utilizadas en celdas solares sensibilizadas por colorantes. *Elementos*, 2(2). <https://doi.org/10.15765/e.v2i2.182>
- [48] Senno, M. A. (s. f.). *ESTUDIO EXPERIMENTAL Y COMPUTACIONAL DE PEROVSKITAS HÍBRIDAS ORGÁNICAS-INORGÁNICAS PARA LA FABRICACIÓN DE CELDAS SOLARES DE ÚLTIMA GENERACIÓN*.
- [49] Sierra, N., & Johan, W. (2025). *Análisis a estrategias de optimización energética en sistemas de energía solar fotovoltaica para aplicaciones residenciales: Un enfoque comparativo*.
<http://repository.unad.edu.co/handle/10596/68290>
- [50] Suarez Menendez, F. C. (2025). *ANÀLISIS DE ENERGÌA ALTERNATIVA (PANELES SOLARE) PARA SU APLICABILIDAD EN EQUIPOS MÒVILES (PORTATILES) EN LA SALA DE DOCENTES DE LA CARRERA DE TECNOLOGÌAS DE LA INFORMACIÒN*. [bachelorThesis, Jipijapa - Unesum].
<http://repositorio.unesum.edu.ec/handle/53000/8343>
- [51] Tepox, N. C. (s. f.). *CAPÍTULO 5. INTRODUCCIÓN*.
- [52] Tortajada Lavin, L. (2013). *Estudio de nanocristales semiconductores aislados y fusionados utilizando técnicas de simulación " ab initio " en el espacio real* [Http://purl.org/dc/dcmitype/Text, Universidade de Santiago de Compostela]. <https://dialnet.unirioja.es/servlet/tesis?codigo=122378>
- [53] Vizoso Gutiérrez, A. (2020). *Aplicaciones del índice de refracción complejo*.
<https://uvadoc.uva.es/handle/10324/50510>



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS



Facultad de Ciencias
Químicas e Ingeniería

FORMATO T-2
NOMBRAMIENTO DE COMISIÓN REVISORA
Y DICTAMEN DE REVISIÓN
Cuernavaca, Mor., a 28 de abril del 2026

Dr. Zakaryaa Zarhri
Dr. Mario Acosta Flores
Dr. Outmane Oubram
Dr. J. Guadalupe Velásquez Aguilar
Dr. Mario Limón Mendoza

P R E S E N T E

Por este conducto, me permito informarle que ha sido asignado como integrante de la comisión revisora de la tesis que presenta **FRANCISCO JAVIER MARTINEZ FABIAN** titulado: **ESTUDIO DFT DE LA PEROVSKITA BASNO_3 PARA APLICACIONES OPTO-ELÉCTRICAS Y CELDAS SOLARES**, realizada bajo la dirección del Dr. Zakaryaa Zarhri y la codirección del Dr. Mario Acosta Flores, del Programa Educativo de la Maestría en Ingeniería Eléctrica y Electrónica. Agradezco su valiosa participación en esta Comisión y quedo a sus órdenes para cualquier aclaración o duda al respecto.

A T E N T A M E N T E
Por una humanidad culta

MTRA. ANGÉLICA GALINDO FLORES
DIRECTORA DE LA FCQEI

D I C T A M E N

MTRA. ANGELICA GALINDO FLORES
DIRECTORA DE LA FCQEI
P R E S E N T E

En respuesta a su amable solicitud para formar parte de la Comisión Revisora de la tesis mencionada y una vez realizada la revisión correspondiente, me permito informarle que mi VOTO es:

DICTAMEN

NOMBRE	VOTO	FIRMA
Dr. Zakaryaa Zarhri (Director)	APROBADO	
Dr. Mario Acosta Flores (Codirector)	APROBADO	
Dr. Outmane Oubram	APROBADO	
Dr. J. Guadalupe Velásquez Aguilar	APROBADO	
Dr. Mario Limón Mendoza	APROBADO	

Se anexan firmas electrónicas





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento con firma electrónica UAEM, soportada por el certificado vigente a la fecha de su elaboración y con efectos plenos de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS PUBLICADOS en el ÓRGANO INFORMATIVO UNIVERSITARIO "ADOLFO MENÉNDEZ SAMARÁ" número 117 de fecha 20 de abril de 2021.

Sello electrónico

ANGELICA GALINDO FLORES | Fecha:2026-04-29 11:45:10 | **FIRMANTE**

SMcw0gjJkpu/owDGP/DRIJuMBo5RgNuvTt7T282KAZek7HhtT2E1bFi4n1fQVfM2sZQwVCw6x0P0H4qNO49VhiFhmvIF2NzoMB6MZXz1+54JII5yulUKpioQYow2HI8KwUMos0z9snL2iilVhmUF88wqKSppFVYqP/ut7dddb74ipORAA4QcRvUbsrtBAv/elKOPG3KzG9bJLS6pw1jFU02fEaXtyRxJBvStV/Sx9oRJUEZUBCNydy3EB68k9hGwFLe64rVAtkVxliZpL7prADDLVtsukbOcvfCey87AmYYsmlJfs9cMsNo6w8ls5TeOWuqav+f0enIGxkj6dkXDKwQ==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



[UqAaBF0K9](#)

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/bJq8vwyH3kgtm3YDIiKNruEJN0tVQJxQ>



UAEM
RECTORÍA
2023-2029



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento con firma electrónica UAEM, soportada por el certificado vigente a la fecha de su elaboración y con efectos plenos de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS PUBLICADOS en el ÓRGANO INFORMATIVO UNIVERSITARIO "ADOLFO MENÉNDEZ SAMARÁ" número 117 de fecha 20 de abril de 2021.

Sello electrónico

ZAKARYAA ZARHRI | Fecha:2026-04-29 13:06:25 | FIRMANTE

Zi6tgWE7Rox8KV9rSzujtJIRIUwjr0D2iHRTiSSwudoH9Ow3KsmaCGrlXcZsIB6ZkZP5iFZe88ngbt81HkJ63swM9vizB5ZGVRnp3d6Zb6cjrjoe0UI+WTAEYum6l+zEG5DByRbv+ssWnDBuKXQdXq/GW+W860ULAYF0unmQnUUpHJNmXeUOYw1IWHSEBSiFqu33uEd5wKb3fCXQOYSkY1VUB3y9/3j1L5SP6t5Opu8GZSlqnEuTImwl/ZoESGLdePaBdS4ZlwiCCX S44OKJkjqzQgE8ugQzI2IKbr4HlnYahC5J3xpPmNky0d9R4TFJEM28lqmokLZGfJ2yUlG==

OUTMANE OUBRAM | Fecha:2026-04-29 14:34:22 | FIRMANTE

fR3CFbea7fIPIJAMI3s/YJDyWv0Vks7WLx9WCcwo5zPDNAKn6dBdu5uAqF+GDj5b/43K6PqdyI7NkSAV2EIYhJ/1Tf9w33eO4Hdf8AjVmKl1JjvvvDMnLqFwo8a6QeKpf/EJw3b1m47NMItUMaO1YPlktucJWcmGSSOiEiQOhoRvd+/WUar3nRcCyU7ZAm0qXNziv3sxZhGchV11AgRMFX+nMAPAgL8LDt75xHtZ4WnIl4NKApaK6OeyT5HzTDiEmKV2/g3RvPEr92kbCDPJd9hSul75v4o4a/HnGe3u+sF0ozjhUwK4isG1MmAEcPUJnVuceUVvAjgkbnXUARw==

MARIO LIMON MENDOZA | Fecha:2026-04-29 16:33:19 | FIRMANTE

cTZG/FZ7o6s+qu5seLaC39ql/zy5uz6eEL6WkwXeiNZlo5MrDYfkET4h9RN4cYX19lu+GjmxIN3J08Eo7W9x2Bh2CCX4KxOIDfxjBHL2tgGil0/a/ffVn9un9elCtuxSDjJWdlL42a6+jAJI F8ExR70oPvURgete61IkdLFrmCXRu81VHblQXcyLZql4OK5fG0MApEWnBDHt9awDxHOJ/6AveK4V/WCiQXCoHEHJ1IguYVvNFtADZRxoX9HABpNDX3IDRva+v6adn/5JEGv7QAAX5iFGbD/0lg4vsCVsFZ0WjWw0CoiOquv1oYrtIHEKjcwtdPdVW0nhkAkBhNktSQ==

MARIO ACOSTA FLORES | Fecha:2026-04-30 11:48:31 | FIRMANTE

M1zaVKNIY3pn/1mmpBEx6EvVObOolq5oQWnVK/Fj/eY9yUsElhv325AcDikN609xDtbyJ/aQ6L4tdkqalcV1pwmLE4vQ+YzsXAJAPrIvW4VltInTtIYwRecctsW0aIk1x816NnqhLB OMLZqMQ7hVV92+LwkpUMdDCLRjoYsLX9Ub92hFkFf6Va+cZaaAmEc4t7KviXk9Xv/MiVlhvEGC/z+/hWadV1cwnmoFzby1Qoh6HmeLFX/Gauz+UDPpoF4NVBJIMuMBmZQvy CV7AvcxvAudJkY+QjRW4Nwki1Zxf0OQ2+HNcqDk2XAs/zcnO+ir3w5xRq+umzxo9Xw8Gg==

J GUADALUPE VELASQUEZ AGUILAR | Fecha:2026-04-30 14:47:05 | FIRMANTE

rZtKINcVjYsd6AFFa3JR9HkKoPx5Acx5AVBd9SBL6+AQiY1pqZYwTshdz4mb+rh2U+0dV/Yd+cwKBBzsD+A/5ZtQYwpRhuGSziArCf/QrLO7WpZ1kX7FPNhQPwnOikdYFeAXM5k g0QrUJjbnnyBHCPP8s2IMgPniWTUly1ulfSG9QKCZITWmSEi1Q0FMWRH55JfmDnyJNivz5BlaAbjYbRHgSaz12wjxTBEeQRVut+8qA9AjnwoBfU/3ykHBW4J+jw5RD5ePOM BBNnEMiQRhWzGwEdKksla5E7qSavml87ZpM3IQtsGaySuHd9mjFijYzVlFPr06OrFX7N3owaQ==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



N47hi2F9U

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/vYN151ixqhgGUTyiMWKqlu8wWe0mU3>

