



**Universidad Nacional del Litoral**

**Facultad de Ingeniería Química**

*Tesis presentada como parte de los requisitos de la  
Universidad Nacional del Litoral, para optar al título de:*

**DOCTOR EN TECNOLOGÍA QUÍMICA**

*En el campo de:*

Caracterización de dispositivos electrónicos  
de película delgada con métodos computacionales

**Modelado de Curvas Corriente Tensión y  
Respuesta Espectral de celdas solares  
y sensores ópticos de película delgada**

*Autor*

**Marcelo De Greef**

*Director*

**Francisco Rubinelli**

Santa Fe, Argentina

2016



# Resumen

En la presente tesis se estudia, a partir de diferentes aproximaciones, el modelado de curvas características corriente-tensión (I-V) y respuesta espectral (SR) para dispositivos de película delgada de silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) y silicio micro-cristalino ( $\mu\text{-Si:H}$ ). Estos dispositivos tienen como campo de aplicación las celdas solares y los sensores ópticos. Además se realizó un análisis del fenómeno conocido como *efecto photogating complementario* (EPGC), el cual refiere a SR mayores a la unidad para longitudes de onda en la zona del azul, para dispositivos n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$ . Las investigaciones se realizaron en base a simulaciones efectuadas con el código D-AMPS (Analysis of Microelectronic and Photonic Structures + new Developments), calibrando sus parámetros de entrada con datos experimentales obtenidos a partir de técnicas de caracterización de dispositivos de película delgada y del ajuste de las curvas características de esos dispositivos.

En primer lugar se evalúan los alcances y la validez de la Aproximación Simmons-Taylor (AST) en el modelado de curvas características de dispositivos de película delgada de a-Si:H y  $\mu\text{-Si:H}$ . Esta aproximación es una derivación del formalismo de Shockley-Read-Hall (SRH) y se basa en que debido a la dependencia exponencial de los coeficientes de emisión de electrones y de huecos respecto de la energía de las trampas dentro del gap, se puede despreciar alguno de ellos en determinadas zonas de energía dentro de ese gap. El estudio consiste en comparar los resultados de simulaciones realizadas con la aproximación AST y con el formalismo SRH en dispositivos con distintas configuraciones y bajo variadas condiciones de operación. Este análisis se realizó tanto para la aproximación AST como para la denominada Aproximación Simmons-Taylor OK (ASTOK) la cual consiste en incorporar simplificaciones adicionales al modelo. Para describir la densidad de estados de defecto dentro del gap se utilizaron los modelos de densidad uniforme de estados (UDM) y el de Defect Pool (DPM), realizándose el análisis para ambos modelos. Se pudo comprobar que la aproximación AST es una aproximación aceptable para el modelado de dispositivos opto-electrónicos, tales como celdas solares y sensores ópticos, bajo distintos escenarios de temperatura, iluminación, configuración de la juntura, tensiones aplicadas, etc. A su vez, se verificó que la ASTOK también puede ser usada para describir el comportamiento de estos dispositivos aunque con algunas restricciones.

Posteriormente, se presenta un nuevo algoritmo denominado ARDOK para evaluar las curvas características I-V de dispositivos de película delgada cuando operan en condiciones de oscuridad (o con niveles de iluminación muy bajos) y con una tensión inversa aplicada, que

simplifica el formalismo de SRH. En esas condiciones de operación la aproximación ASTOK no puede ser aplicada en dispositivos p-i-n y los errores obtenidos con la AST son considerables, por lo que esta nueva aproximación puede ser considerada como un complemento de las aproximaciones de Simmons-Taylor. La ARDOK consiste básicamente en desprestigiar alguno de los procesos de capturas de portadores que propone el formalismo de SRH, en trampas ubicadas dentro del gap cuya energía torna desprestigiable dicho proceso de captura. La aproximación ARDOK puede implementarse cuando la densidad de estados de defecto es modelada tanto con UDM como con DPM, obteniéndose con este último menores errores en los cálculos de la densidad de corriente.

Por último, se realizó un estudio del efecto EPGC en dispositivos n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$ , en el cual se determinan las condiciones necesarias para obtener respuestas espectrales mayores a la unidad tanto para valores de gap altos en la capa p ( $\text{a-SiC:H}$ ) como para bajos en dicha capa ( $\mu\text{-Si:H}$ ). Se realizó, además, un estudio de sensibilidad de la SR a determinados parámetros del dispositivo, como secciones eficaces de captura, movilidad de portadores, espesor y gap de movilidad, en las distintas capas del mismo, como así también del contenido espectral de la luz de polarización.

# Agradecimientos

A mi director, Francisco Rubinelli, por guiarme y acompañarme en la investigación de los temas contenidos en esta tesis, pero, principalmente, por su apoyo, paciencia y buena predisposición constante en estos años de trabajo compartido, no solo conmigo, sino con todo el grupo de trabajo.

A mi familia, por su comprensión y por ser siempre mi contención.

A mis compañeros de oficina (de todas las oficinas por las que pasamos) por hacer del lugar de trabajo un ambiente distendido y muy agradable. Especialmente, quiero agradecer a Carlos por su “ayuda extra” en las tareas de la docencia, en el último semestre anterior a la presentación de esta tesis.

A todo el grupo de Física de Semiconductores del IFIS, por su amabilidad y por ofrecerme siempre su ayuda desinteresado cuando la necesité.

Al Instituto de desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC) por brindarme el espacio físico para realizar mi tesis, y al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas – CONICET, por haberme becado.

A los proyectos que financiaron la investigación:

- PIP 2012-2014, Proyecto 112-201101-01052, Subsidio CONICET, Fabricación, Caracterización, Simulación y Ensayo de Celdas Solares Basadas en Semiconductores III-V, Investigador participante. (Responsable J. Plá, CNEA).
- PICT 2013 Proyecto 2098, Subsidio de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, “Caracterización y Optimización de Celdas Solares y de Detectores Ópticos de Película Delgada con Métodos Numéricos” (Responsable F.A. Rubinelli).



*A la memoria de Francisco Alberto Rubinelli.*





# Índice de contenidos

<b>Resumen</b> .....	I
<b>Agradecimientos</b> .....	III
<b>Índice de contenidos</b> .....	VIII
<b>Introducción</b> .....	1
<b>Capítulo 1: Características principales de semiconductores desordenados y sus propiedades</b> .....	7
1.1    Materiales ordenados y desordenados.....	7
1.2    Densidad de estados .....	10
1.2.1    Estados extendidos y colas de banda .....	11
1.2.2    Estados de defectos DB .....	12
1.3    Propiedades eléctricas .....	19
1.4    Propiedades ópticas .....	22
1.4.1    Sistemas ópticos e interfaces rugosas.....	24
1.4.2    Coeficiente de absorción .....	28
<b>Capítulo 2: Modelado de dispositivos y características de las junturas p-i-n</b> .....	31
2.1    Juntura p-i-n .....	31
2.2    Modelado de dispositivos y software de simulación D-AMPS.....	34
2.2.1    Ecuación de Poisson .....	35
2.2.2    Ecuaciones de continuidad .....	38
2.2.3    Método de cálculo y condiciones de contorno.....	43
2.3    Modelos de recombinación y funciones de ocupación para estados DB.....	45
2.3.1    Teoría de Shockley-Read-Hall.....	45
2.3.2    Teoría de estados anfotéricos .....	48
2.4    Curvas características de dispositivos p-i-n de a-Si:H y $\mu\text{c-Si:H}$ .....	51
2.4.1    Curva corriente-tensión a oscuras.....	51
2.4.2    Curva corriente-tensión bajo condiciones de iluminación .....	53
2.4.3    Respuesta espectral .....	55

<b>Capítulo 3: Modelado de curvas características de dispositivos opto-electrónicos utilizando la aproximación de Simmons-Taylor .....</b>	<b>59</b>
3.1    Aproximaciones de Simmons-Taylor .....	60
3.1.1    Aproximación Simmons-Taylor - AST .....	60
3.1.2    Aproximación Simmons-Taylor OK – ASTOK.....	66
3.1.3    Antecedentes y motivación .....	68
3.2    Ajuste de curvas experimentales .....	69
3.3    Resultados de la implementación de las aproximaciones .....	73
3.3.1    Aproximación Simmons-Taylor - AST .....	73
3.3.2    Aproximación Simmons-Taylor 0 K – ASTOK.....	85
3.4    Conclusiones.....	87
<b>Capítulo 4: Modelado de curvas características utilizando la aproximación de Simmons-Taylor y el modelo de Defect Pool.....</b>	<b>89</b>
4.1    Implementación de la Aproximación de Simmons-Taylor en el modelo de DPM .....	91
4.1.1    Adaptación del Modelo DPM a la aproximación de estados desacoplados - AED... 91	
4.1.2    La Aproximaciones de Simmons-Taylor y AED aplicadas al modelo de DPM.....	96
4.2    Ajuste de las curvas experimentales .....	97
4.3    Resultados de la aplicación de las aproximaciones.....	100
4.3.1    Aproximación AED en el modelo de DPM .....	100
4.3.2    AST en el modelo de DPM adaptado con la aproximación AED .....	102
4.3.3    La aproximación ASTOK en el modelo de DPM adaptado con la AED .....	107
4.4    Conclusiones.....	109
<b>Capítulo 5: Método simplificado para la evaluación de curvas corriente-tensión de dispositivos de película delgada bajo condiciones de oscuridad y tensiones inversas.....</b>	<b>111</b>
5.1    Aproximación ARDOK: Método simplificado para evaluar las curvas J-V bajo condiciones de oscuridad y con una tensión inversa aplicada.....	112
5.2    Análisis detallado del método ARDOK .....	121
5.3    Explorando la consistencia del método ARDOK.....	129
5.4    Refinamiento del método .....	131
5.5    Conclusiones.....	137

<b>Capítulo 6: Efecto photogating complementario en estructuras n-i-p de Silicio microcristalino</b> .....	139
6.1    Introducción .....	139
6.2    Metodología .....	143
6.3    Origen del efecto photogating complementario (Luz de Polarización Roja) .....	146
6.4    Resultados .....	150
6.4.1    Explorando las condiciones para obtener $SR > 1$ .....	150
6.4.2    Sensibilidad de la $SR > 1$ a parámetros eléctricos de la capa (p)-a-SiC:H .....	151
6.4.3    Sensibilidad de la $SR > 1$ a los parámetros eléctricos de la capa buffer .....	152
6.4.4    Sensibilidad de la $SR > 1$ a algunos parámetros eléctricos de la capa intrínseca .	160
6.4.5    Sensibilidad de la $SR > 1$ al contenido espectral de la luz de polarización .....	162
6.5    Análisis del origen del EPGC a partir de los perfiles de recombinación, carga atrapada y campo eléctrico .....	164
6.6    EPGC en un dispositivo n-i-p con capa p de $\mu\text{c-Si:H}$ .....	167
6.7    Conclusión .....	170
<b>Capítulo 7: Conclusiones generales y perspectivas</b> .....	171
<b>Bibliografía</b> .....	175
<b>Nomenclatura</b> .....	181
<b>Publicaciones</b> .....	185



# Introducción

Los dispositivos opto-electrónicos permiten transformar señales electrónicas en ópticas o viceversa. Por ejemplo, una lámpara incandescente o un fluorescente transforman una señal eléctrica o electrónica en luz, es decir, transforman electrones en fotones, mientras que una celda solar realiza la función contraria, es decir, transforma fotones en electrones. Las posibles aplicaciones son muy extensas y variadas, y forman parte de un sinnúmero de artefactos, muchos de los cuales usamos cotidianamente. En una primera clasificación, teniendo en cuenta las señales de entrada y de salida, se puede dividir a estos dispositivos en dos grandes grupos: los *emisores de luz*, entre los cuales se pueden mencionar los diodos LED y los LÁSER, y los *receptores de luz*, entre los cuales se encuentran los sensores de imágenes, los fototransistores, los sensores ópticos, las celdas fotovoltaicas, etc. El desarrollo y la investigación en dispositivos opto-electrónicos y su uso en circuitos integrados crecieron enormemente con el desarrollo de las fibras ópticas para comunicaciones de larga distancia.

Los dispositivos opto-electrónicos se fabrican a partir de materiales semiconductores. Aunque los semiconductores elementales, en particular el silicio (Si), han sido muy útiles para el desarrollo de la microelectrónica presentan como gran inconveniente su gap indirecto que implica una baja eficiencia de emisión de luz y bajos coeficientes de absorción. Para aplicaciones fotovoltaicas el Si es tecnológicamente bueno, pero su bajo gap ( $E_G = 1,12$  eV) hace que su eficiencia de conversión sea baja. Los semiconductores compuestos ofrecen las propiedades deseadas para aplicaciones opto-electrónicas y pueden ser sintetizados sin mayor dificultad. Históricamente, los compuestos III-V y en particular el GaAs ( $E_G = 1,43$  eV) y el InP ( $E_G = 1,35$  eV) son los más utilizados. Los semiconductores compuestos III-V, además de presentar en su mayoría un gap directo y por consiguiente coeficientes de absorción de luz mayores, poseen elevadas movilidades de portadores que son importantes en el desarrollo de dispositivos de alta velocidad. Utilizando diferentes compuestos binarios es posible seleccionar el gap más apropiado y combinándolos con aleaciones adecuadas se puede variar en forma continua no solo el gap sino también sus propiedades estructurales, electrónicas y ópticas. Sin embargo la producción de estos materiales es bastante costosa, en parte por el equipamiento necesario para depositarlos y en parte por el costo intrínseco de algunos elementos. Este inconveniente hace que, por ejemplo, en conversión fotovoltaica terrestres donde se busca un uso masivo, se prefiera el Si, mientras que los compuestos III-V encuentran mayor aplicación en celdas solares espaciales donde el costo de los paneles no es importante, la eficiencia de conversión debe ser la

máxima posible y los dispositivos deben ser resistentes al daño introducido por la exposición a la radiación extra-terrestre (electrones, protones, etc.).

El silicio es un material cuyas características y propiedades electrónicas y ópticas lo hacen apto para la producción a gran escala en la industria electrónica. En las últimas décadas se han publicado numerosos trabajos científicos y se ha incrementado notablemente el interés tecnológico por el silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) y sus aleaciones debido a sus múltiples aplicaciones y las ventajas que presenta. El bajo costo de fabricación y el ahorro de energía en el proceso debido a la posibilidad de depositar películas delgadas en grandes áreas y a bajas temperaturas, es una de las ventajas más importantes que hacen que este material sea muy empleado en la fabricación de dispositivos opto-electrónicos.

Los resultados y discusiones presentados en esta tesis tienen aplicación en el modelado de sensores ópticos y celdas solares desarrollados a partir de a-Si:H y  $\mu\text{c-Si:H}$ .

Dentro de las celdas solares, que producen electricidad a partir de la luz solar incidente mediante el efecto fotoeléctrico, las celdas de Si pueden clasificarse en cristalinas y amorfas. Dentro de las cristalinas se encuentran las mono-cristalinas, que contienen un cristal con una estructura ordenada y continua libre de bordes de granos y con una cantidad de impurezas o dopantes perfectamente controlada, y las poli-cristalinas producidas a partir del Si de grado metalúrgico por un proceso de purificación química a elevadas temperaturas. Las últimas contienen pequeños y múltiples cristales que pueden observarse en forma de granos orientados aleatoriamente. Este tipo de celdas solares forman parte de las celdas solares denominadas de primera generación.

Las celdas solares de película delgada como las de a-Si:H, diseleniuro de indio y cobre ( $\text{CuInSe}_2$  o CIS), diseleniuro de cobre-indio-galio ( $\text{CuInGaSe}_2$  o CIGS) y telurio de cadmio (CdTe) se conocen como celdas de segunda generación. El a-Si:H es un material que presenta la estructura atómica de un sólido desordenado, con un orden en la red de corto alcance. La incorporación de hidrógeno (H) durante su deposición permite pasivar parte de los enlaces colgantes o "dangling bonds" (DB) propios de un material amorfo. Por su parte el  $\mu\text{c-Si:H}$  está compuesto por pequeños trozos de silicio cristalino incrustados en una red de silicio amorfo [1]. Tanto el a-Si:H como el  $\mu\text{c-Si:H}$  o nc-Si:H (silicio nano-cristalino) se utilizan en dispositivos de película delgada que permiten absorber gran parte de la radiación solar en pequeños espesores debido a que la ruptura del orden cristalino incrementa considerablemente el coeficiente de absorción de luz. A modo comparativo el silicio presenta algunas ventajas importantes sobre otros materiales, como su disponibilidad en la naturaleza en comparación con la del indio, y la no toxicidad de sus componentes, en contraposición a las celdas de CIS, CIGS y de CdTe. Además,

hoy en día el procesamiento del silicio está muy desarrollado debido a su utilización en la industria de la electrónica. Las celdas solares de película delgada si bien reducen el material utilizado y los costos de producción, tienen como principal desventaja su relativa baja eficiencia. Por ejemplo, una celda solar p-i-n de a-Si:H optimizada presenta una eficiencia del 9-10% en el estado inicial, que se reduce al 6-7% en el estado estabilizado debido a la creación de defectos adicionales ante la exposición a la luz (efecto Staebler Wronski). Las celdas solares de segunda generación son una buena alternativa para dispositivos de bajo costo, en los que no es crucial obtener una alta eficiencia.

Los dispositivos de película delgada han encontrado aplicación no sólo en el área fotovoltaica sino también como transistores (TFT), dispositivos de conmutación en monitores de cristal líquido, sensores de imágenes, arreglos para impresión, foto-receptores para procesos de fotocopiado, etc. Por ejemplo, en sensores de imágenes lineales o bidimensionales los arreglos de sensores y los TFT pueden combinarse con fotodiodos o fotoconductores también de a-Si:H aprovechando su alta foto-conductividad. El  $\mu\text{c-Si:H}$  puede combinarse con capas de a-Si:H en TFT o en celdas solares, ya sea como emisores en los transistores bipolares de hetero-junturas o bien como capas activas en las celdas, ya que presentan movilidades de portadores más elevadas que las del a-Si:H, una respuesta espectral que permite absorber fotones de menor energía y en el infrarrojo (IR) y una mayor estabilidad frente a la irradiación luminosa.

La tercera generación de celdas solares comprende las estructuras con un mayor potencial, ya que presentan eficiencias teóricas de conversión más elevadas que las de primera y segunda generación. Esta categoría abarcan a las celdas solares de materiales orgánicos y de polímeros o sus combinaciones, las de conversión "up" y "down", las de perovskita, los "quantum dots", las "dye sensitized cells" y las de múltiple juntura, que combinan materiales con distinto gap, permitiendo una absorción más eficiente del espectro solar. Dentro de este grupo se encuentran las junturas múltiples de silicio, que contienen estructuras p-i-n de a-Si:H y nc-Si:H, conectadas en serie a través de junturas túneles de recombinación (TRJ) y las de materiales III-V compuestas de junturas n-p conectadas a través de diodos túnel. Las primeras encuentran aplicación en la generación de energía PV para uso terrestre y las segundas para la alimentación de satélites espaciales o bien para uso terrestres, pero acoplándole espejos que concentren la radiación solar. En las celdas solares de múltiple juntura de Si se han reportado eficiencias estabilizadas del 11% para celdas de a-Si:H/ $\mu\text{c-Si:H}$  [2,3], del 13,5% en celdas triples de a-Si:H/ $\mu\text{c-Si:H}$ / $\mu\text{c-SiGe:H}$  [4,5] y por encima del 16% para el estado inicial [6]. Estas son las eficiencias más elevadas reportadas hasta el momento, según nuestro conocimiento, para estructuras de múltiple juntura de película delgada combinando el a-Si:H con a-SiGe:H y  $\mu\text{c-Si:H}$ . El  $\mu\text{c-Si}$  es un material atractivo para ser utilizado como capa activa de las sub-celdas inferiores

(bottom) de celdas solares dobles o triples por su mayor absorción óptica en el rojo e IR [7] y para formar parte o el todo de las juntas TRJ por su bajo gap de movilidad.

En los sensores de imágenes que convierten una señal lumínica en una señal electrónica secuencial, las *juntas múltiples* han encontrado aplicación en *detección de colores*. La captación del color es usualmente implementada con filtros ópticos de polímeros o bien con detectores de dos terminales. Alternativamente, es posible lograrlo mediante el cambio del voltaje de polarización aplicado a una junta múltiple que permite seleccionar una de las sub-celdas para que colecte los portadores foto-generados que limiten la corriente total. La penetración de la luz incidente, al ser fuertemente dependiente de la longitud de onda, nos ofrece una herramienta para la separación de colores a partir de la resolución espacial de los pares electrón-hueco (e-h) foto-generados. Se han fabricado detectores de a-Si:H/c-Si que cubren el espectro UV-visible-IR cercano [8]. El  $\mu\text{-Si:H}$  que permite también extender la respuesta al IR cercano tiene la ventaja de ser un material más económico que el c-Si. Dado que todo el proceso se realiza a baja temperatura, la tecnología es económica y compatible con los procesos VLSI de circuitos electrónicos. El número de juntas p-i-n define la cantidad de colores detectables.

Dada la complejidad y el costo de fabricación de las estructuras complejas utilizadas como celdas solares y sensores ópticos, resulta atractivo el uso de códigos numéricos para optimizar sus diseños y emular su comportamiento como paso previo a su fabricación. El uso de estas simulaciones permite, dentro del campo teórico de la ciencia, verificar la validez de nuevas teorías y comprender mejor la física que gobierna estos dispositivos. A partir de allí, se pueden proponer nuevos diseños que mejoren el rendimiento y establecer con mayor precisión las relaciones presentes entre los parámetros de las capas e interfaces que constituyen el dispositivo y sus curvas características de salida finales. La ausencia de simplificaciones para el tratamiento del problema permite obtener resultados más certeros y una mejor comprensión de la física del sistema. Como en general en este tipo de modelos no se puede conocer con precisión cuando dejan de ser válidas las hipótesis y suposiciones planteadas, se hace necesaria la revalidación constante del modelo a partir del ajuste de resultados experimentales, proceso que se conoce como calibración de los parámetros de ingreso al código. Una gran parte de los parámetros eléctricos y ópticos se pueden determinar experimentalmente a través de técnicas de caracterización de materiales de película delgada mientras que otros se obtienen a partir del ajuste de curvas experimentales de dispositivos. Entre los códigos más conocidos para modelar detectores ópticos y celdas solares se encuentran los de Delft University, Holanda (ASA) [9], Purdue University, USA (ADEPT) [10], Penn State University, USA (AMPS) [11], USA, University of Ljubljana, Eslovenia (ASPIN) [12], Helmholtz Zentrum Berlin, Alemania (AFOR+HET) [13], Illinois University y USA (wxAMPS) [14], todos ellos de origen académico. También existen



códigos de origen comercial como ATLAS [15] y Medici [16]. Todos se basan en la resolución de las ecuaciones de Poisson y de continuidad con distintos grados de rigurosidad y robustez. El Dr. Rubinelli es el autor del código D-AMPS-1D (AMPS + new Developments) [17] que es el utilizado en esta tesis y en nuestro grupo de trabajo. D-AMPS es un desprendimiento del código original AMPS.

La presente tesis está organizada de la siguiente manera: en el Capítulo 1 se discuten aspectos básicos de los materiales semiconductores y de sus propiedades ópticas y eléctricas. En el Capítulo 2 se presenta la juntura p-i-n y los modelos básicos que se utilizarán en el resto de este trabajo. Además se exponen aspectos generales del modelado de dispositivos y el funcionamiento del software de simulación D-AMPS. En el Capítulo 3 se estudian los límites y alcances de la Aproximación de Simmons-Taylor en el modelado de las curvas características cuando se asume que la densidad de defectos en cada capa del dispositivo es uniforme. En el Capítulo 4 se realiza un análisis similar cuando la densidad de defectos se evalúa con el modelo de Defect Pool. En el Capítulo 5 se presenta un modelo simplificado para la evaluación de curvas corriente-tensión de dispositivos de película delgada que operan polarizados bajo una tensión inversa y bajo condiciones de oscuridad. En el Capítulo 6 se exhiben los primeros resultados de una investigación sobre el efecto photogating complementario en estructuras n-i-p de  $\mu\text{c-Si:H}$ . Por último, en el Capítulo 7, se sintetizan las conclusiones más importantes de la tesis y se plantean las perspectivas para continuar con estas líneas de investigación.

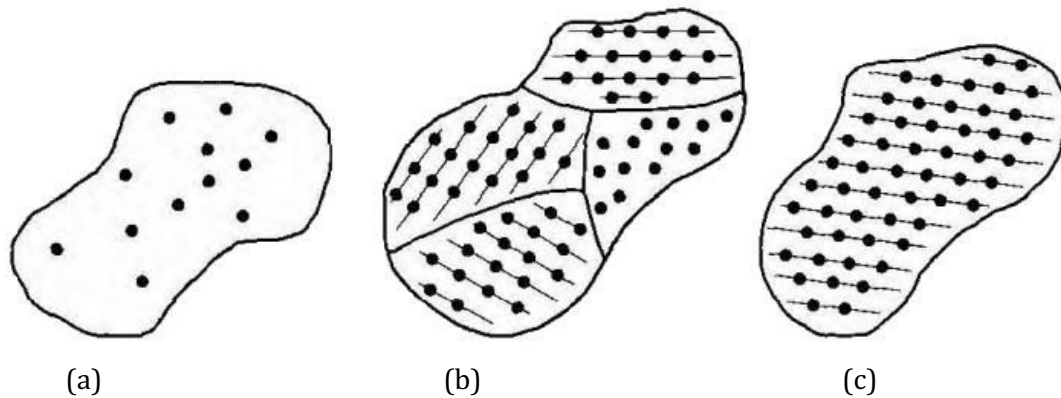


# Capítulo 1

## Características principales de semiconductores desordenados y sus propiedades

### 1.1 Materiales ordenados y desordenados

Los materiales sólidos se pueden clasificar, según el ordenamiento de su estructura atómica, en: cristalinos, poli-cristalinos y amorfos. En los sólidos cristalinos los átomos o grupos de átomos están ubicados siguiendo un orden regular. Se designan también con el nombre de cristales simples (“single crystals” en inglés) porque el orden regular se extiende sobre todo el cristal, es decir muestran un ordenamiento de largo alcance en toda su estructura atómica. El cristal simple se describe o construye con la simple repetición de una celda unidad que define enteramente la estructura de la red. La traslación de la celda unidad da lugar a la generación de la red (“lattice”) del cristal. En cada sitio de la red se sitúan los átomos o grupos de átomos. Los sólidos amorfos, en cambio, son materiales desordenados que contienen una gran cantidad de defectos estructurales y de enlace. No poseen un orden atómico de largo alcance, y por lo tanto no se puede definir una celda unidad ni una red como en los cristalinos. El sólido está compuesto por un arreglo al azar o “random” de los carozos de iones (átomos o grupo de átomos con capas de electrones incompletas) que muestran un alto grado de orden sólo de corto alcance, es decir, sólo el ordenamiento de los primeros vecinos (los vecinos más próximos) es muy similar al observado en los materiales cristalinos. Los sólidos poli-cristalinos están compuestos por muchas regiones de cristal simple, denominadas granos, que varían en tamaño y orientación respecto una de otra. Cada una de estas regiones o granos, presentan un ordenamiento de largo alcance en su interior. La región de transición que existe entre los cristales simples que forman el material poli-cristalino se conoce como borde de grano. La Figura 1.1 ilustra los tres tipos de orden de las estructuras atómicas descriptos.



**Figura 1.1:** Representación esquemática de los tres tipos generales de estructura: (a) amorfo, (b) poli-cristalino y (c) cristalino.

A su vez, dentro de los materiales poli-cristalinos se pueden distinguir distintos tipos de sólidos, según el tamaño característico de los granos de su estructura. Un esquema de la clasificación de los materiales según el tamaño de grano de su composición se presenta en la Tabla 1.1.

**Tabla 1.1:** Materiales sólidos clasificados según el ordenamiento de su estructura atómica [18].

Tipo de material	Tamaño de la región de cristal simple	Comentarios
Nanopartículas	Partículas de tamaño < 100 nm	Pueden presentarse en cristales simple, poli-cristalinos o amorfos
Materiales nanocristalinos (nc)	< 100 nm	En el caso del Si, los nano cristales están embebidos en una red de silicio amorfo, y al material se lo denomina "silicio micro-cristalino ( $\mu\text{c}$ )"
Materiales microcristalinos ( $\mu\text{c}$ )	>100 nm < 1000 $\mu\text{m}$	Comúnmente a estos materiales se los denomina también como "poli-cristalinos".
Materiales multi-cristalinos (mc) o semi-cristalinos	>1 mm	
Materiales de cristal simple	Todo el material es un solo cristal	No contiene bordes de grano por ser un solo cristal

La estructura atómica del a-Si:H es la de un sólido amorfo, donde la mayoría de los átomos de Si forman cuatro enlaces covalentes. La red exhibe un orden de corto alcance que da origen a sus propiedades de material semiconductor. Pequeñas desviaciones en los ángulos y en

la longitud de los enlaces hacen que el orden local se pierda completamente al cabo de unas pocas distancias atómicas (el orden no se mantiene más allá de los dos o tres átomos vecinos). En contraposición, el c-Si presenta un orden de largo alcance con un arreglo regular de átomos en su estructura atómica. En el c-Si cada átomo Si está rodeado por otros cuatro átomos de manera ordenada. Esto posibilita que los cuatro electrones de valencia de cada átomo formen enlaces covalentes con los electrones de valencia de sus átomos vecinos, con iguales longitudes y ángulos de enlaces. En el a-Si:H, en cambio, algunos átomos forman tres enlaces covalentes en lugar de cuatro debido a la desviación acumulada a lo largo de varios enlaces atómicos. El cuarto electrón de valencia que queda sin formar el enlace covalente se conoce como enlace colgante o DB. La concentración de DBs en el a-Si(sin hidrogenar) es muy elevada, del orden de  $10^{19}$ - $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$ , lo que lo convierte en un material inviable para dispositivos electrónicos. Para utilizar este material en dispositivos como transistores, celdas solares y detectores ópticos es necesario disminuir la concentración de enlaces colgantes en varios órdenes de magnitud. Para ello se introduce en el reactor donde se forma el plasma una mezcla del gas de silano ( $\text{SiH}_4$ ) con proporciones apropiadas de hidrógeno que se incorpora al material durante su deposición como hidrógeno atómico pasivando parte de los DBs presentes. Es posible también realizar un tratamiento de post-hidrogenado al finalizar la deposición del a-Si para pasivar los DB. En cualquier caso un número importante de DBs permanecerá en el material sin ser pasivados, del orden de  $10^{15}$ - $10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$ . Una menor concentración de DBs hace posible el dopaje del material, es decir, la incorporación controlada de impurezas como boro (B) o fósforo (P) para dar lugar a la formación de capas tipo p- y n-, respectivamente. Pequeñas proporciones de estas impurezas alojadas en la red de a-Si:H dan lugar al desplazamiento del nivel de Fermi desde cerca del medio del gap (material intrínseco) hacia los bordes de banda.

Las técnicas más utilizadas para producir a-Si:H de calidad electrónica se conocen con las siglas PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) y HWCVD (Hot Wire Chemical Vapor Deposition). La descarga se inicia y mantiene por un campo eléctrico entre dos electrodos paralelos con un voltaje DC o AC a frecuencias que varían entre 13,65 y 200 MHz y presiones entre 0,1-1 mbar. En la técnica HWCVD se suele utilizar un filamento de tungsteno que se calienta a temperaturas del orden de 1400-1800 °C.

El  $\mu\text{-Si:H}$  es un material compuesto por dos fases: pequeños cristales de silicio cristalino incrustados en una red de a-Si. Los dominios cristalinos (o granos) en este material son del orden de los 10-20 nm de diámetro [1]. La fracción de material cristalino depende de las condiciones de deposición. Se utilizan las mismas técnicas de deposición que para el a-Si:H y, al igual que en este material, se utiliza hidrógeno gaseoso para poder incorporar átomos de hidrógeno en el  $\mu\text{-Si:H}$  a los efectos de disminuir el número de DBs de la fase amorfa. En el  $\mu\text{-$

Si:H la calidad del material viene determinada por la fracción de volumen cristalino  $V_f$  y por el tamaño de los granos. Al ser el tamaño de grano de 20 nm o menor, en los procesos de deposición a baja temperatura las películas de este material contienen suficiente hidrógeno para poder pasivar bien los bordes de grano. El parámetro  $V_f$  puede ser determinado por espectroscopía Raman y el tamaño de grano a través de difracción de rayos X o por microscopía electrónica. Películas de  $\mu\text{-Si:H}$  de buena calidad se obtienen con fracciones de volumen cristalino mayores al 90% [1].

## 1.2 Densidad de estados

En el c-Si la estructura periódica de la red, y por lo tanto la periodicidad del potencial que experimentan los electrones, da lugar a la formación de una estructura de bandas caracterizada por dos bandas de energías permitidas cuya densidad de estados por unidad de energía es relativamente alta: la banda de conducción y la banda de valencia. Entre ellas se ubica una franja de valores de energía donde, idealmente, no existen estados que puedan ser ocupados por electrones, que se conoce como banda prohibida o “gap” y tiene un ancho de 1,12 eV a temperatura ambiente. Esta disposición genera una transición abrupta de la densidad de estados, entre los bordes de las bandas de valencia y de conducción y el gap. En un cristal ideal de c-Si a una temperatura de 0K la banda de valencia estaría completamente llena mientras que la banda de conducción estaría completamente vacía. Los estados ubicados en las bandas de valencia y de conducción se denominan estados extendidos. Debido a que las funciones de ondas de electrones y huecos en estos estados son no localizadas, los portadores pueden considerarse libres, es decir, pueden moverse libremente a través del material.

El a-Si:H, si bien no posee orden de largo alcance en su estructura atómica, exhibe un orden local o de corto alcance que da origen a una estructura de bandas (de conducción y valencia) similar a la del c-Si. Sin embargo, la naturaleza amorfa del material con enlaces de longitud y ángulos ligeramente diferentes, da lugar también a densidades de estados significativas dentro del gap con forma de colas exponenciales que decaen desde los bordes de banda hacia el interior del gap, estando además los bordes de bandas no muy bien definidos como sucede en los materiales ordenados o periódicos. Por otra parte, los DBs o defectos de la matriz amorfa dan origen a la presencia de estados electrónicos en la región central del gap. El gap del a-Si:H, que es de 1,70eV-1,74 eV, alberga entonces un cuasi-continuo de estados compuesto por los estados de las colas y de los defectos. Los estados ubicados dentro del gap se conocen con el nombre de estados localizados porque las funciones de onda de electrones y huecos se vuelven más localizadas a medida que el

estado se encuentra más lejos de los bordes de banda. Así mismo, la movilidad de los portadores se reduce drásticamente a medida que nos alejamos de los bordes de banda. Los detalles del cambio de la movilidad con la energía son aún desconocidos, por lo que, en el modelado de dispositivos optoelectrónicos, se asume un cambio abrupto en los bordes de banda, es decir, la movilidad se supone nula dentro del gap y constante en las bandas de conducción y valencia. El gap definido por los bordes de banda, dentro del cual se asume una movilidad interna nula se conoce como gap de movilidad. Experimentalmente, el gap de movilidad se ha extraído con la técnica de fotoemisión interna aplicada simultáneamente en barreras Schottky con estructuras m-i-n y m-i-p o bien a partir de la dependencia de las curvas corriente-tensión (I-V) a oscuras para tensiones directas bajas, donde la corriente es controlada por el mecanismo de recombinación [19,20]. El  $\mu\text{-Si:H}$ , al contener pequeños cristales de c-Si embebidos en una matriz amorfa, presenta un gap de movilidad intermedio entre el c-Si y el a-Si:H que varía entre 1,2eV y 1,6eV según los autores[21].

La performance de los dispositivos electrónicos de materiales amorfos y micro-cristalinos es altamente dependiente de la densidad de estados dentro de la banda prohibida. Por esta razón existen numerosos trabajos dedicados a la búsqueda de modelos teóricos que describan fielmente el comportamiento y las características propias de este tipo de materiales. El número de estados por unidad de energía y volumen disponibles para ser ocupados por electrones se denomina densidad de estados (DOS) y suele expresarse en  $\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ .

### 1.2.1 Estados extendidos y colas de banda

Las densidades de estados en las bandas de conducción y valencia,  $g_{bc}(E)$  y  $g_{bv}(E)$  respectivamente, presentan una dependencia parabólica con respecto a la energía similar a la del c-Si debido al orden de corto alcance que presentan el a-Si:H y el  $\mu\text{-Si:H}$ .

Las distribuciones de estados localizados presentes en los bordes del gap de movilidad se denominan colas de banda y se conectan a las bandas de conducción y de valencia, penetrando dentro del gap con una dependencia exponencial respecto a la energía. Su origen proviene de las variaciones en las longitudes y ángulos de los enlaces atómicos de silicio. Estos estados generan la pérdida de la transición abrupta entre las bandas de conducción y valencia y el gap. Los estados de colas de banda se comportan como estados simples, es decir, admiten como máximo un electrón. Los que forman la cola de la banda de conducción presentan carácter aceptor, es decir, poseen carga neutra cuando están vacíos y carga negativa cuando están ocupados por un electrón. Los estados de la cola de la banda de valencia, en cambio, presentan carácter donador, o sea son neutros cuando están ocupados por un electrón y presentan carga positiva cuando están vacíos. Experimentalmente se ha comprobado con las técnicas de constant

photocurrent method (CPM) o dual beam photoconductivity (DBP) y time of flight (TOF) la dependencia exponencial decreciente de las colas de banda hacia el interior del gap. Las mismas técnicas permiten determinar las pendientes de las colas, observándose que la de la banda de conducción es mayor que la pendiente de la cola de la banda de valencia [22]. En el modelado de dispositivos opto-electrónicos, las pendientes de las colas de banda de conducción y valencia determinadas experimentalmente se ingresan como parámetros de entrada en los códigos numéricos.

Las expresiones de las DOS en función de la energía de trampa,  $E_t$ , para la cola de la banda de valencia,  $g_{cv}(E_t)$ , y para la cola de la banda de conducción,  $g_{cc}(E_t)$ , vienen dadas por:

$$g_{cv}(E_t) = g_{v0} e^{\frac{E_v - E_t}{E_D}}, \quad (1.1-a)$$

$$g_{cc}(E_t) = g_{c0} e^{\frac{E_t - E_c}{E_A}}, \quad (1.1-b)$$

donde  $g_{v0}$  y  $g_{c0}$  representan los valores de la DOS en los bordes de banda de valencia y conducción, respectivamente,  $E_D$  y  $E_A$  son las respectivas energías características o pendientes de la cola de valencia y de conducción. En películas delgadas de a-Si:H de buena calidad  $E_D$  varía entre 45 a 50 meV mientras que  $E_A$  varía entre 25 y 30 meV. En el  $\mu\text{-Si:H}$  las mismas pendientes presentan valores menores, de 30-40meV para  $E_D$  y 20-25meV para  $E_A$  aproximadamente.

### 1.2.2 Estados de defectos DB

Si bien la introducción de átomos de hidrógeno en el a-Si:H pasiva una gran cantidad de DB, subsiste una concentración remanente del orden de  $10^{15}$ - $10^{16}$  cm<sup>-3</sup>. Esta densidad de DBs que el H atómico no consigue pasivar da origen a la presencia de estados energéticos ubicados más cerca del centro del gap, que presentan un carácter anfotérico, es decir que pueden actuar como donores o como aceptores pudiendo alojar ninguno, uno o dos electrones. Los estados de carga asociados son: positivos cuando están vacíos, neutros cuando están ocupados por un electrón y negativos cuando son ocupados por dos electrones. Los estados de carácter anfotérico se pueden aproximar por un par de estados desacoplados: uno de carácter donador y otro de carácter aceptor separados entre sí por una energía  $U_{AD} = U + 2kT \ln 2$ , donde  $U$  es la energía de correlación necesaria para ubicar el segundo electrón en el enlace. El estado donador se ubica por debajo de la energía  $E$  del estado anfotérico (nivel +/0) en  $kT \ln 2$  y el estado aceptor por encima en  $U + kT \ln 2$  (nivel 0/-). En el próximo apartado se discuten las condiciones para la validez de esta aproximación.



Los modelos para describir la distribución de estados de defectos han ido evolucionando en las últimas décadas. Antiguamente (1980-1995) se describían mediante un par de gaussianas: una con estados donores y otra con estados aceptores separadas entre sí por la energía  $U_{AD}$  de alrededor de 0,4eV o bien con una distribución gaussiana de estados anfotéricos. Hoy en día es práctica común utilizar tres pares de Gaussianas si se escoge el formalismo de estados desacoplados: tres con estados donores y tres con estados aceptores separadas entre sí por una energía  $U_{AD}$  de 0,2 eV. La distribución gaussiana se adopta entre otras posibles por su simetría y sus bondades matemáticas. Su desviación estándar representa el grado de desorden que presenta la red del semiconductor desordenado. El modelo de densidad uniforme (que denotaremos con las siglas UDM) adopta la distribución de los tres pares de gaussianas y asume que la densidad de estados es independiente de la posición o profundidad “ $x$ ” a lo largo de cada capa de un dispositivo. Los tres pares de gaussianas se identifican con los símbolos  $D^-$ ,  $D^0$  y  $D^+$  al desplazarnos en energía desde la banda de valencia hacia la banda de conducción. Tanto en el a-Si:H como en sus aleaciones con Ge o C se tornó más popular en los últimos años el uso del modelo termodinámico de primeros principios conocido como el modelo de defect pool (que denotaremos con las siglas DPM) en el cual la creación de defectos está dada por un equilibrio químico entre diferentes configuraciones de enlaces para una cierta temperatura. No existen evidencias experimentales que sustenten su validez en  $\mu\text{-Si:H}$ . En el DPM la densidad de estados dentro de una capa de un dispositivo de, por ejemplo, a-Si:H resulta altamente no uniforme en función de la posición “ $x$ ” cuando las bandas de energía no son planas, como en el caso de dispositivos p-i-n. En la sección siguiente se discuten con más detalle los modelos UDM y DPM.

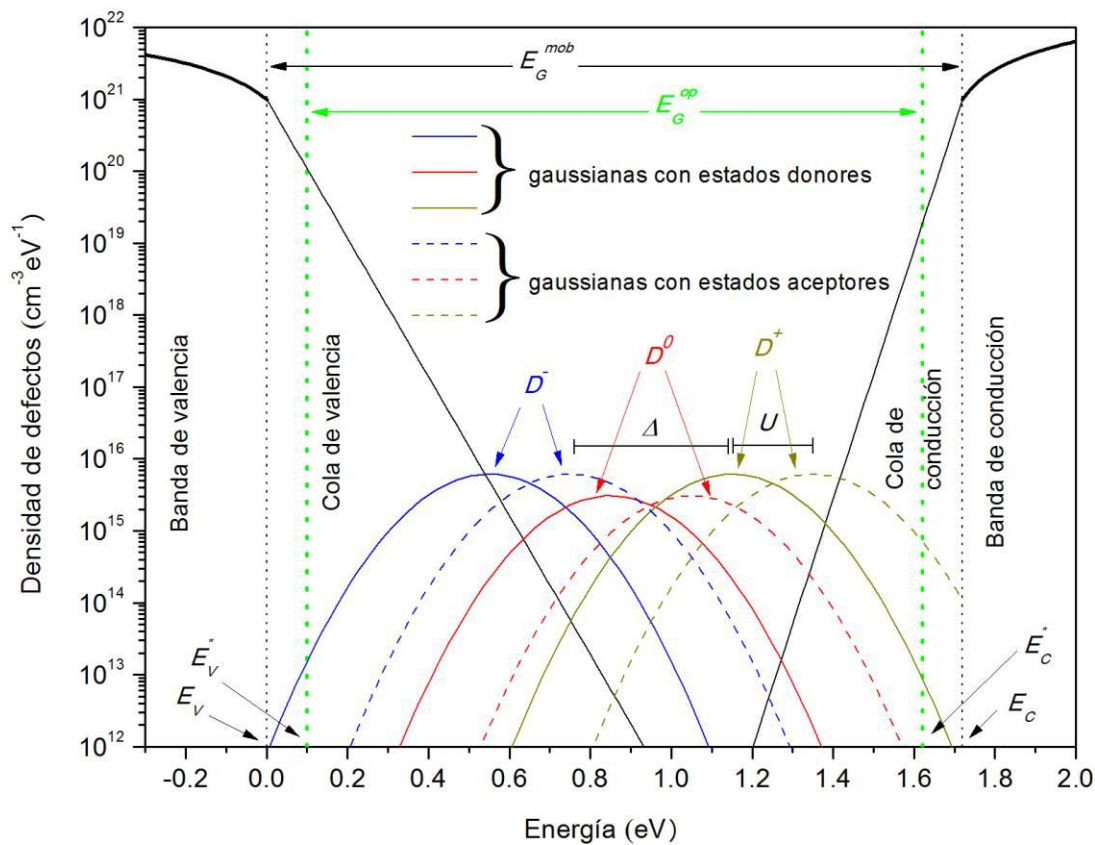
Experimentalmente se pueden conocer las densidades de DBs hasta una energía de aproximadamente 0,6-0,8 eV desde la banda de conducción mediante las técnicas CPM (Constant Photocurrent Method) y DBP que miden la corriente producida en una muestra co-planar por fotones con energía por debajo del gap. Ajustando la curva experimental medida con CPM o DBP mediante modelos que en materiales evalúan la dependencia del coeficiente de absorción sub-gap con la energía, es posible deducir en forma aproximada las posiciones de los picos y las densidades de defectos encerradas por las gaussianas adoptadas para representar las densidades de DB. Generalmente se puede obtener información sobre las gaussianas  $D^-$  y  $D^0$  ya que las gaussianas  $D^+$  están más próximas a la banda de conducción. Estos ajustes también se utilizan para obtener información sobre las secciones eficaces de captura. Las posiciones de los picos de las gaussianas, las DOS en cada gaussiana y las secciones eficaces de captura son datos que deben ingresarse en el código numérico utilizado para modelar dispositivos optoelectrónicos. Cuando la DOS se representa con el modelo UDM, las energías de activación de las diferentes capas del dispositivo determinadas experimentalmente se reproducen en las

simulaciones ajustando convenientemente la densidad de dopantes en las capas dopadas y las posiciones en energía de las gaussianas en las capas intrínsecas.

En la Figura 1.2, se muestra la DOS correspondiente a un semiconductor desordenado cuando se utiliza el modelo UDM para representar los estados de defectos. La DOS se compone de dos colas exponenciales, conectadas a las bandas de conducción y valencia y de las distribuciones gaussianas correspondiente a los defectos: tres con estados donores y tres con estados aceptores. La DOS total viene dada por la suma de las colas y gaussianas, y presenta una distribución continua en toda la banda prohibida. En esta figura,  $E_c^*$  y  $E_v^*$  son, respectivamente, niveles de energía próximos a los bordes de banda de valencia,  $E_v$ , y conducción,  $E_c$ , pero internos al gap, es decir  $E_c^* = E_c - \Delta$  y  $E_v^* = E_v + \Delta$ , donde  $\Delta$  es una cantidad positiva que definen el gap óptico del a-Si:H que es menor al gap de movilidad (ver Sección 1.4.2). Se puede demostrar a partir de la teoría de bandas que la función densidad de estados y su derivada deben ser continuas en los bordes de banda  $E_c$  y  $E_v$ . Estas restricciones definen el empalme de las colas que penetran en el gap con la densidad de estados en las bandas.

### 1.2.3.1 Aproximación del modelo anfotérico con estados desacoplados

Existe suficiente evidencia experimental para afirmar que los estados DBs tienen carácter anfotérico [22]. Sin embargo, para realizar los cálculos de recombinación y carga atrapada en dispositivos de a-Si:H y  $\mu$ c-Si:H se suele recurrir a la aproximación de estados desacoplados. El error de realizar dicha aproximación fue discutido por Halpern [23] y Suntharalingam *et al.* [24] quienes concluyeron que el modelo de estados desacoplados puede implementarse siempre y cuando se cumplan dos condiciones: (a) que  $U \gg kT$ , siendo  $U$  el valor de la energía de correlación, y (b) que las secciones eficaces de las trampas cargadas,  $\sigma_{ch}$ , sean mayores que las secciones eficaces de las trampas neutras,  $\sigma_0$ , en al menos un orden de magnitud. Willemen [25] presentó un análisis numérico de las diferencias entre ambos modelos donde corrobora que estas dos condiciones son suficientes para la implementación de la aproximación. Su estudio fue realizado sin suposiciones previas ni aproximaciones para materiales tipo p, n e intrínsecos. Willemen concluyó, además, que el error introducido en la función ocupación es significativo únicamente en materiales intrínsecos y que la discrepancia en la eficiencia de recombinación es función directa de la relación entre las secciones eficaces de captura de las trampas cargadas y de las trampas neutras correspondientes a los portadores minoritarios.



**Figura 1.2:** Densidad de estados en función de la energía en la banda prohibida del a-Si:H cuando se utiliza el modelo UDM para representar los estados de defectos.  $\Delta$  corresponde a la diferencia de energía entre la Gaussiana  $D^-$  doblemente ocupada, y la  $D^+$  desocupada.

En 2002, Klimovsky, discutió el error de introducir la aproximación de estados desacoplados, directamente en dispositivos [26]. En las contribuciones anteriores la inexactitud de la aproximación fue explorada en materiales, donde las propiedades eléctricas son generalmente uniformes. En un dispositivo, un error en el cálculo de la recombinación y en la densidad de cargas atrapadas puede repercutir en los valores de las concentraciones de portadores libres, los cuales a su vez afectarían la ocupación de las trampas. Un error en la estimación de ocupación de las trampas impactaría sobre el valor del campo eléctrico, que a su vez podría alterar los valores calculados para la densidad de carga atrapada y la tasa de recombinación. Esta retroalimentación entre los valores de las distintas propiedades internas del dispositivo hace que los resultados de los modelos aplicados a materiales no sean necesariamente directamente extrapolables a dispositivos. Sólo es posible cuantificar el error introducido por la aproximación en el cálculo de curvas características de dispositivos implementando la aproximación directamente en el código numérico utilizado para simularlos dispositivos electrónicos. Sin embargo, realizando simulaciones numéricas de celdas solares p-i-n de a-Si:H con ambos modelos, concluyó, en concordancia con los autores anteriores, que se

puede aplicar la aproximación de estados desacoplados en los dispositivos siempre y cuando se cumplan las dos condiciones  $U \gg kT$  y  $\sigma_{CH} \gg \sigma_0$ , aunque no encontró correlación clara entre el error introducido por la aplicación del modelo de estados desacoplados y la relación de las secciones eficaces de captura de trampas cargadas y neutras.

### 1.2.3.2 Modelo de Defect Pool

En la última década del siglo pasado se ha desarrollado, con muy buenos resultados, un modelo termodinámico conocido como modelo de Defect Pool (DPM) que describe la distribución de estados de dispositivos de a-Si:H y sus aleaciones a partir de primeros principios. Este modelo describe la creación de defectos como un proceso de equilibrio químico de diferentes configuraciones de enlaces a la temperatura de deposición de la muestra, que están claramente por encima de la temperatura ambiente o las temperaturas de operación estándar del dispositivo. La densidad de DBs obtenida con la aplicación del DPM resulta altamente no uniforme, es decir, varía con la posición dentro de la capa intrínseca de los dispositivos de a-Si:H utilizados en conversión solar o en detección de radiación.

El DPM se basa en el proceso de transformación de los enlaces débiles (WBs) de Si-Si en enlaces colgantes o DBs [27]. Los WBs corresponden a estados electrónicos de la cola de la banda de valencia. La ruptura de un WB resulta en dos enlaces colgantes. La incorporación del hidrógeno al material juega un papel fundamental en el proceso de conversión, ya que un átomo de H puede pasivar uno de los dos enlaces colgantes creados, generando un enlace H-Si e impidiendo que vuelva a formarse el WB. El equilibrio final también depende del estado de carga que adquiere el DB después de la rotura del enlace Si-Si, por lo tanto la posición del nivel de Fermi en el gap (lo cual define la carga que adquiere el DB) influye en la densidad de DBs final. Según el modelo, la densidad de DBs surge de minimizar la energía libre del sistema compuesto por los enlaces débiles Si-Si, los enlaces colgantes (DBs) y los enlaces H-Si [28]. La reacción de equilibrio ocurre en el proceso de deposición a temperaturas elevadas, y por debajo de una determinada temperatura, conocida como temperatura de congelamiento (“freezing” en inglés) la densidad de DBs se vuelve fija, es decir “se congela” y no cambia más con la temperatura.

La derivación detallada del DPM puede encontrarse en los trabajos publicados por Powell y Deane [28,29]. Aquí se presentarán sólo las ideas básicas y la formulación del modelo. Los autores asumen que los estados asociados a los DBs presentan un carácter anfotérico y proponen la siguiente expresión para la distribución de defectos, derivada en su segunda versión del modelo [29]:

$$g_{DB}(E_t) = \gamma \left[ \frac{2}{F_{eq}^0(E)} \right]^{2E_D} P \left( E_t + \frac{\sigma_{DP}^2}{2E_D} \right), \quad (1.2)$$

donde el coeficiente  $\gamma$  viene dado por:

$$\gamma = g_{v0} \left( \frac{H}{N_{Si-Si}} \right)^{\frac{kT}{4E_D}} \left( \frac{2E_D^2}{2E_D + kT} \right) \exp \left( -\frac{1}{2E_D} \left[ E_{DP} - E_v - \frac{\sigma_{DP}^2}{4E_D} \right] \right)$$

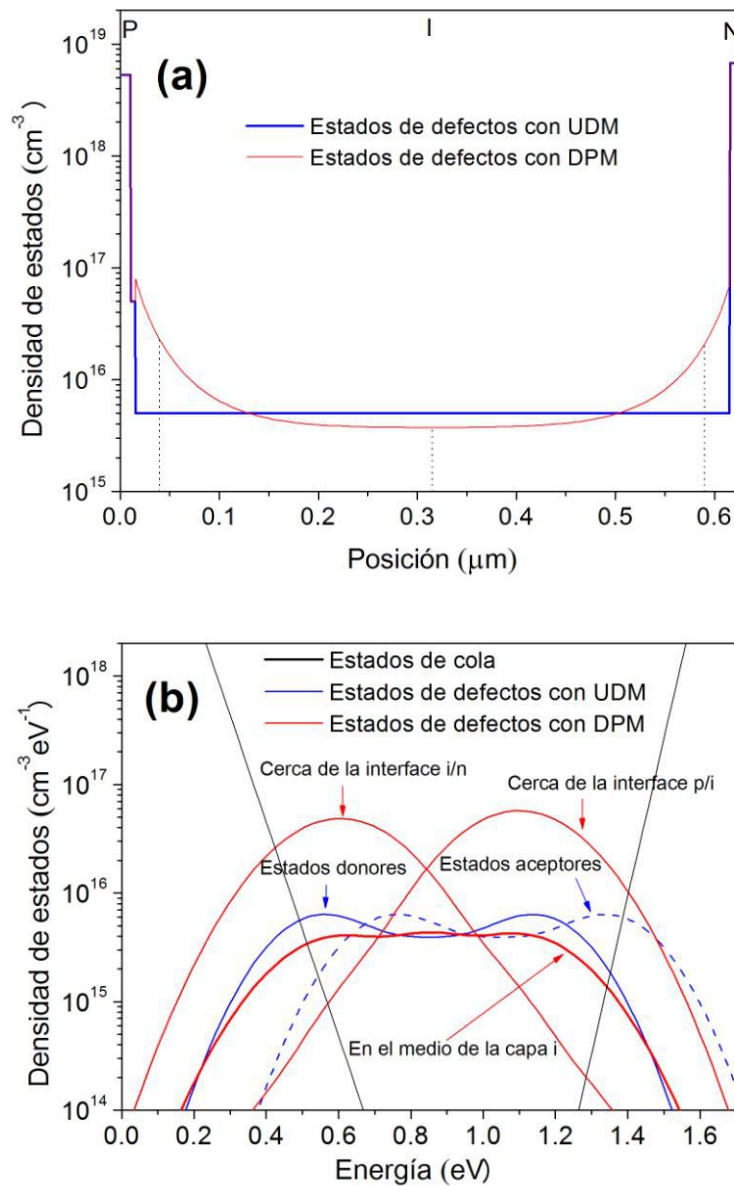
y la función de  $P(E_t)$ , que define la probabilidad de formación de DBs a la energía  $E_t$ , por:

$$P(E_t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{DP}} \exp \left[ -\frac{(E_t - E_{DP})^2}{2\sigma_{DP}^2} \right],$$

donde  $F_{eq}^0$  es la probabilidad en función de la energía en condiciones de equilibrio termodinámico, de que un estado anfotérico sea ocupado por un solo electrón (ver definición en la Sección 2.3 del Capítulo 2),  $H$  es la concentración de hidrógeno y  $N_{Si-Si}$  es la concentración de enlaces Si-Si. En la distribución  $P(E_t)$ ,  $E_{DP}$  representa la energía del pico de la distribución o sea la energía más probable de formación de un defecto y  $\sigma_{DB}$  determina el ancho de distribución que define aproximadamente el rango de energías posibles dentro del cual es posible la formación del defecto. Las Ecuaciones (1.2) dan lugar a una densidad de defectos 3 o 4 veces menor de la que surge de la primera versión del modelo DPM propuesto por Powel-Deane, haciéndose más factible el ajuste de curvas J-V bajo iluminación AM1.5. La densidad de DBs generada por la primera versión hacía imposible el ajuste del fill factor o factor de llenado ( $FF$ ) en junturas p-i-n con espesores de capas intrínsecas superiores a 300nm. Las Ecuaciones (1.2) permiten modelar celdas solares de a-Si:H y de sus aleaciones en el estado inicial. No se discutirá en la presente tesis el modelado con DPM de las celdas solares de a-Si:H y de sus aleaciones en el estado estabilizado [30].

El resultado más importante del DPM es que la distribución de defectos depende de la posición del nivel de Fermi dentro del gap relativo a los bordes de banda (ver Ecuación 1.2, el nivel de Fermi está contenido dentro de  $F_{eq}^0$ ). Dado que la posición en energía del nivel de Fermi cambia de acuerdo a su posición espacial en el eje  $x$  en las celdas solares y sensores que contienen junturas p-i-n, la concentración y la distribución de DBs también varía con la posición a diferencia del modelo UDM. En la Figura 1.3(a) se muestra la concentración de los defectos o DBs en función de la posición dentro de la capa intrínseca de un dispositivo p-i-n de a-Si:H y en la Figura 1.3(b) se muestra la densidad de estados para tres regiones diferentes de la capa intrínseca (las coordenadas espaciales correspondientes a estas tres regiones están marcadas con línea de puntos en la Figura 1.3(a)). Estas gráficas fueron realizadas a partir de los ajustes presentados en el Capítulo 3. Como puede observarse en ambas figuras, la densidad de defectos es menor en el medio de la capa intrínseca y aumenta a medida que nos acercamos a las capas

dopadas. A los efectos de realizar una comparación se muestra el perfil constante de la densidad de DBs del modelo UDM para una densidad total de defectos de  $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .



**Figura 1.3:** Densidad de estados predicha por el modelo DPM en función (a) de la posición y (b) de la energía, de un dispositivo p-i-n de a-Si:H. Las tres curvas rojas de la Figura (b) corresponden a la densidad de DBs predichas por el modelo DPM para tres posiciones distintas dentro de la capa i, las cuales se marcan con línea de puntos en la Figura (a): a 25 nm de la interface p/i, a 300 nm de ambas interfaces y a 25 nm de la interface i/n. Se muestra también, a modo de comparación, la densidad de DBs (aceptores y donores) correspondiente al modelo UDM, que se mantiene constante en toda la capa i, cuando se adopta una densidad de estados de  $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . La capa intrínseca del dispositivo tiene un espesor de 600 nm.

### 1.3 Propiedades eléctricas

Los estados extendidos en las bandas de valencia y conducción están poblados por electrones y huecos respectivamente. En el c-Si a temperatura ambiente una fracción de electrones de la banda de valencia es excitada térmicamente a la banda de conducción dejando consecuentemente huecos en la banda de valencia. En a-Si:H y en el  $\mu\text{-Si:H}$  los electrones y huecos se distribuyen entre los estados extendidos y los localizados. La gran cantidad de estados presentes en las colas de banda que poseen estos materiales impiden que el nivel de Fermi se ubique muy próximo a los bordes de bandas, lo que permite aproximar la ocupación de los estados extendidos con la función de Maxwell-Boltzmann. Además, da lugar a que la probabilidad de ocupación de estos estados extendidos sea baja. En consecuencia, y a diferencia del c-Si, la densidad de carga en materiales de a-Si:H y  $\mu\text{-Si:H}$ , ya sea negativa o positiva, está dominada por los electrones y huecos situados en los estados localizados y no en los estados extendidos.

La baja movilidad de los portadores y la menor densidad de estados de defectos presentes en el gap determinan que la conducción a temperatura ambiente o superior tenga lugar principalmente cerca de los bordes de banda. La conductividad eléctrica puede ser evaluada integrando respecto a la energía el producto entre la función de ocupación, la DOS y la movilidad presente en los estados que contribuyen a la conducción. Como ya se estableció en la Sección 1.2, en el modelado de dispositivos electrónicos se supone que la movilidad cae abruptamente a cero dentro del gap (es decir se asume conductividad cero a través de los estados localizados dentro del gap) y que es constante dentro de cada banda, o sea independiente de la energía. Por tanto, la conductividad se puede evaluar multiplicando las movilidades de los portadores libres, la carga del electrón y la integral del producto entre la función de ocupación y la DOS (la movilidad puede extraerse de la integral al ser asumida constante). De la operación de integración resultan las concentraciones de electrones y huecos libres presentes en las bandas, según:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g_{bc}(E) f_n(E) dE, \quad (1.3-a)$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} g_{bv}(E) f_p(E) dE, \quad (1.3-b)$$

donde  $f_n(E)$  y  $f_p(E)$  son las funciones de ocupación de electrones y huecos respectivamente. En condiciones de equilibrio  $f_n(E)$  y  $1-f_p(E)$  vienen dadas por la función de Fermi-Dirac  $f_{FD}(E)$ , es decir  $f_n(E) = 1-f_p(E) = f_{FD}(E)$ . La conductividad, entonces, se puede expresar como:

$$\sigma_{elec} = e(\mu_n n + \mu_p p). \quad (1.4)$$

En la Ecuación (1.4)  $\mu_n$  y  $\mu_p$  son las movilidades de electrones y huecos en los estados extendidos de las bandas de conducción y valencia, respectivamente.

La aplicación de un campo eléctrico a un material o a un dispositivo semiconductor da lugar a la aparición de una fuerza que actúa sobre los electrones y huecos libres presentes en las bandas de conducción y de valencia, respectivamente, que tiende a desplazarlos y acelerarlos. Para que los portadores puedan moverse libremente en las bandas deben existir suficientes estados vacíos disponibles a los que los portadores accedan a medida que se desplazan empujados por el campo eléctrico. Este escenario está garantizado en los semiconductores. Este movimiento de cargas como consecuencia de la aplicación de un campo eléctrico se conoce como movimiento de deriva o “drift” y da lugar a una corriente también denominada de deriva o “drift”.

El transporte y la movilidad de portadores libres en los estados extendidos del a-Si:H y  $\mu$ c-Si:H están limitados por la dispersión o “scattering” con fonones, impurezas dopantes e imperfecciones de la red amorfa. La conducción viene acompañada de eventos frecuentes de atrapamiento de los portadores por los estados del gap seguidos por re-emisiones a los estados extendidos de las bandas. Si el campo aplicado  $F$  es constante, la fuerza y la aceleración ejercidas sobre los portadores del material semiconductor también resultarían en principio constantes, esperándose que la velocidad de los portadores aumente linealmente con el tiempo. Sin embargo esto no ocurre porque las partículas que se mueven a través del semiconductor colisionan con los átomos de las impurezas ionizadas y con los átomos de la red. Un portador que se encuentra en los estados extendidos de una banda, y siendo acelerado por el campo eléctrico, incrementa su velocidad a medida que se desplaza por el semiconductor, pero al colisionar con un átomo el portador pierde toda o gran parte de su energía cinética. La partícula vuelve a ser acelerada y a adquirir velocidad y energía hasta volver a colisionar. Este proceso se repite una y otra vez. El portador termina adquiriendo una velocidad promedio proporcional a la magnitud del campo eléctrico  $F$  aplicado que se conoce como velocidad “drift”. La proporcionalidad entre el campo eléctrico y la velocidad promedio está dada por la movilidad. La velocidad “drift” puede expresarse según:

$$v_{drift} = \mu F, \quad (1.5)$$

donde  $\mu$  es el factor de proporcionalidad denominado movilidad. Esta relación de proporcionalidad se pierde para magnitudes de campo elevadas. Para los valores de campo con los que se trabaja en esta tesis ( $F < 10^5$  V/cm) la desviación de esa relación lineal no es tan significativa. La Ecuación (1.5) es genérica y se aplica tanto a electrones como a huecos, pero la movilidad, y por lo tanto la velocidad drift, es diferente para electrones y huecos. En general, la



movilidad de los huecos es menor a la movilidad de los electrones. La movilidad es un parámetro muy importante para describir y caracterizar el transporte en materiales semiconductores, ya que es un indicador de la velocidad a la que se puede desplazar un portador cuando se le aplica un campo eléctrico externo  $F$ . La movilidad en las bandas puede expresarse como [31]:

$$\mu = \frac{e\tau_c}{m^*}, \quad (1.6)$$

donde  $\tau_c$  es el tiempo medio entre colisiones y  $m^*$  es la masa efectiva del portador. Notar que la Ecuación (1.6) también es genérica ya que tanto la movilidad como el tiempo entre colisiones y la masa efectiva son distintos para los electrones y los huecos.

Existen, principalmente, dos tipos de colisiones o procesos de scattering en un semiconductor cristalino que afectan la movilidad de los portadores: el scattering con fonones (con la red) y el scattering con impurezas ionizadas. En semiconductores desordenados las movilidades son inferiores a las presentes en semiconductores cristalinos debido a mecanismos adicionales que limitan aún más su valor: el desorden propio de la red aleatoria y la existencia de muchos defectos que pueden atrapar el portador por cierto tiempo y luego liberarlo a los estados extendidos de las bandas.

En un semiconductor cristalino los átomos poseen un cierto movimiento relacionado con la energía térmica que causa una vibración aleatoria del átomo en torno a su posición de equilibrio en la red. La agitación térmica provoca la interacción entre los electrones y huecos que se mueven dentro del material y los átomos “fijos” de la red. Estas interacciones entre portadores y átomos se conocen con el nombre inglés de “scattering” de red o “scattering” con fonones. Como el fenómeno está relacionado con la agitación térmica es de esperar que la tasa de colisión entre los átomos de la red y los portadores sea función de la temperatura. Así, a mayor temperatura, mayor será la agitación térmica de los átomos de la red y mayor será también la tasa de colisión entre éstos y los portadores. Esto se traduce en una relación inversamente proporcional entre la movilidad de los portadores y la temperatura, según [31]:

$$\mu_r \propto T^{-\frac{3}{2}}. \quad (1.7)$$

Adoptamos el símbolo de  $\mu_r$  para la movilidad relacionada con el scattering de los portadores libres con la red.

Las impurezas que se agregan a los semiconductores para modificar sus características intrínsecas se ionizan completamente a temperatura ambiente. En los semiconductores dopados existen interacciones coulombianas entre las impurezas ionizadas y los electrones y huecos que se mueven en las bandas de conducción y valencia respectivamente. Estas interacciones

provocan dispersiones y colisiones de los portadores cargados que alteran su trayectoria y velocidad. Este fenómeno se conoce como scattering con impurezas ionizadas. La dependencia de este proceso de scattering con la temperatura está dada por [31]:

$$\mu_i \propto \frac{T^{3/2}}{N}, \quad (1.8)$$

donde  $\mu_i$  representa a la movilidad relacionada al scattering de los portadores libres con impurezas ionizadas y  $N$  es la concentración total por unidad de volumen de las impurezas ionizadas en el semiconductor. El aumento de la temperatura provoca un aumento en la velocidad térmica aleatoria de los portadores, reduciendo así el tiempo que éstos se encuentran en las proximidades de las impurezas ionizadas. Al disminuir este tiempo disminuye también la fuerza de atracción coulombiana y por lo tanto el scattering se vuelve menor. Por esta razón, la movilidad por scattering con impurezas ionizadas aumenta cuando aumenta la temperatura. Por otra parte, si se aumenta la concentración de impurezas ionizadas aumenta la probabilidad de que un portador se encuentre con una de ellas. Así también, a mayor concentración de impurezas ionizadas la movilidad se vuelve menor.

Teniendo en cuenta estas dos formas de scattering y sus correspondientes movilidades, se puede definir la movilidad  $\mu$  efectiva, que engloba ambos fenómenos como:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_r} + \frac{1}{\mu_i}. \quad (1.9)$$

Los mecanismos adicionales que disminuyen la movilidad de los portadores en semiconductores desordenados fueron el objetivo de la tesis de la Dra. Helena Ramírez (integrante de nuestro grupo de investigación). La dependencia de la movilidad con la temperatura no es bien conocida en los semiconductores amorfos, pero la hipótesis de una dependencia similar a la presente en los semiconductores cristalinos homólogos permite un ajuste razonable de la dependencia de las curvas corriente-tensión con la temperatura en dispositivos de a-Si:H.

Las expresiones de las densidades de carga libre se discutirán en la Sección 2.2 del próximo capítulo.

## 1.4 Propiedades ópticas

Las propiedades ópticas de un semiconductor se pueden describir a partir del índice de refracción complejo,  $\tilde{n} = n - ik$ , donde  $n$  es el *índice de refracción* que corresponde a la parte real

y  $k$  es el *coeficiente de extinción* que corresponde a la parte imaginaria. Los parámetros  $n$  y  $k$  son función de la longitud de onda de la luz incidente.

La creación de pares electrón-hueco (e-h) en un dispositivo a partir de la absorción de luz es el proceso físico básico responsable del funcionamiento de las celdas solares y de los detectores en el espectro UV, visible e IR. El coeficiente de absorción,  $\alpha$ , se define como el número relativo de fotones que son absorbidos por unidad de distancia [31] y generalmente se expresa en unidades de  $\text{cm}^{-1}$ . Este coeficiente también es función de la longitud de onda y está relacionado con el coeficiente de extinción  $k$  a través de la expresión:

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda}, \quad (1.10)$$

donde  $\lambda$  es la longitud de onda de la radiación incidente. El coeficiente de absorción  $\alpha$  de un material es el parámetro óptico más importante en lo que respecta a su funcionamiento dentro de los dispositivos opto-electrónicos que convierten una señal luminosa en una corriente eléctrica. La tasa de generación de pares e-h depende exponencialmente del mismo a través de la relación:

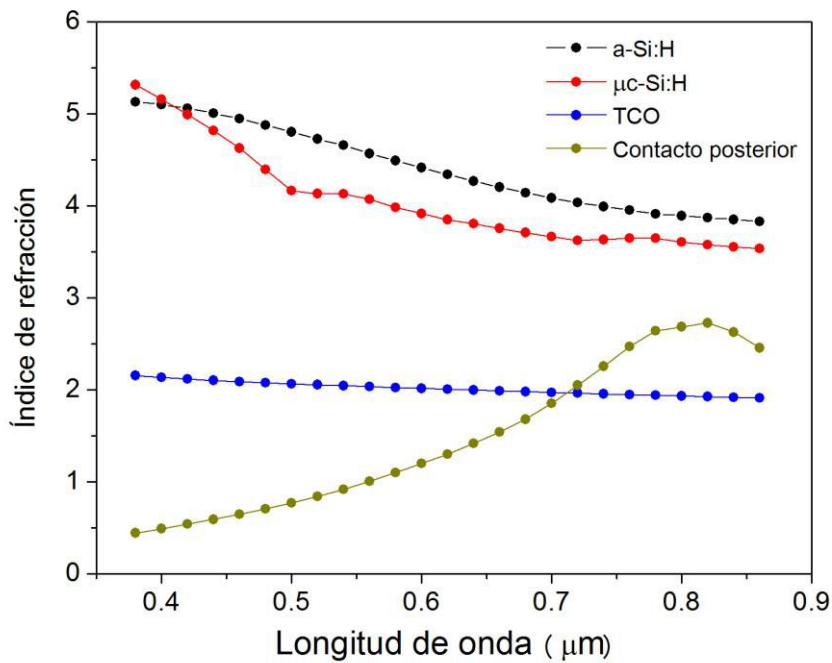
$$G(x, \lambda) = R(\lambda) = \alpha(\lambda)\Phi(\lambda)\exp[-\alpha(\lambda)x], \quad (1.11)$$

donde  $R$  es la reflexión en el contacto anterior,  $\Phi(\lambda)$  es el flujo incidente que ingresa al dispositivo de una fuente de radiación monocromática de longitud de onda  $\lambda$  que incide perpendicularmente sobre la cara frontal del material o dispositivo ( $x=0$ ) y  $x$  es la profundidad o distancia a la cara frontal. La inversa del coeficiente  $\alpha$  nos brinda una idea del espesor óptico que la capa absorbente del dispositivo en cuestión debe poseer para maximizar la relación costo-beneficio, entre la corriente eléctrica a coleccionar y la cantidad de material a emplear en la fabricación de un dispositivo.

El índice de refracción  $n$  es también un parámetro óptico importante del material, pero su influencia en el valor de la corriente eléctrica generada es de segundo orden respecto al coeficiente de absorción  $\alpha$ . La reflectancia ( $R$ ) se define como la relación entre la energía reflejada y la energía incidente en una interfaz, y, análogamente, la transmitancia ( $T$ ) es la relación entre la energía transmitida y la energía incidente. Los índices de refracción de los materiales a ambos lados de la interfaz y el ángulo de incidencia de la radiación definen en gran medida los valores de  $R$  y  $T$  (ver Sección 1.4.1).

Para valores de energía del fotón incidente por encima del gap óptico, los parámetros  $n$  y  $k$  se obtienen a partir de la reflectancia y la transmitancia ( $R$ - $T$ ) medidas en una interfaz. Para valores por debajo del gap óptico esta técnica pierde exactitud, por lo que se utilizan otros

métodos como el método de la fotocorriente constante (CPM) [32] o espectroscopía fototérmica por desviación (PDS) [33]. En la Figura 1.4 se muestran los valores del índice de refracción  $n$  en función la longitud de onda  $\lambda$  para el a-Si:H y el  $\mu\text{c-Si:H}$  a los efectos de su comparación. También se incluyen los valores de  $n(\lambda)$  para el óxido conductor transparente (TCO) que se utiliza como electrodo en la cara frontal de una celda solar, y para un contacto posterior de Al que también se emplea con frecuencia en el mismo dispositivo. Estos dos últimos conceptos se abordan en el siguiente apartado.



**Figura 1.4:** Índice de refracción en función de la longitud de onda de los siguientes materiales: a-Si:H,  $\mu\text{c-Si:H}$ , TCO y Al.

### 1.4.1 Sistemas ópticos e interfaces rugosas

El sistema óptico más simple es el de una interfaz óptica plana, que separa dos medios distintos, cada uno caracterizado por su índice de refracción complejo. Cuando la luz incidente es normal a la interfaz, la reflectancia,  $R$ , y la transmitancia,  $T$ , pueden calcularse a partir de los índices de refracción complejos  $\tilde{n} = n - ik$  según las ecuaciones de Fresnel. En la interfaz  $i-j$  entre los materiales con índices de refracción  $\tilde{n}_i$  y  $\tilde{n}_j$ ,  $R$  y  $T$  vienen dadas por:

$$R = \frac{|\tilde{n}_i - \tilde{n}_j|^2}{|\tilde{n}_i + \tilde{n}_j|^2} \quad (1.12)$$

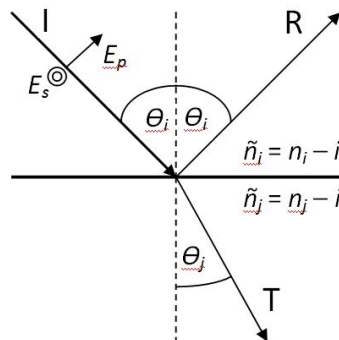
$$T = \frac{4|\tilde{n}_i \tilde{n}_j|}{|\tilde{n}_i + \tilde{n}_j|^2} \quad (1.13)$$

Cuando  $|n| \gg |k|$ , escenario muy frecuente en a-Si:H y  $\mu\text{c-Si:H}$ , se pueden aproximar los índices de refracción complejos por sus componentes reales utilizando  $n$  en lugar de  $\tilde{n}$  en las Ecuaciones (1.12) y (1.13).

Así, si se quiere aumentar la reflectancia, como puede suceder en la interfaz entre la capa  $n$  y el contacto posterior de una celda solar o detector p-i-n, es conveniente escoger para el contacto posterior un material con un índice de refracción bien diferente al del material de la juntura. En cambio cuando se procura maximizar la transmitancia, como por ejemplo en la interfaz contacto frontal/capa p de la misma estructura p-i-n, conviene que los índices de refracción sean lo más parecidos posibles. Otra forma de obtener un resultado similares introducir entre ambos un material con un índice de refracción intermedio  $n_k$ , tal que  $n_k = (n_i n_j)^{1/2}$ . Como estos índices son funciones de la longitud de onda  $\lambda$ , la máxima transmitancia se obtiene para una longitud de onda y no simultáneamente para todas las longitudes de onda de una fuente de radiación policromática.

Cuando la incidencia de la luz no es normal a la interfaz,  $R$  y  $T$  resultan funciones también del ángulo de incidencia y de la polarización de la luz. La polarización de la luz se expresa en función de dos componentes: la componente de campo eléctrico que oscila perpendicularmente al plano de incidencia, denominada *componente s*, y la componente de campo eléctrico que oscila paralelamente al mismo, denominada *componente p*. El plano de incidencia está definido por el rayo incidente y la normal a la superficie de la interfaz. En la Figura 1.5 se definen los ángulos de incidencia y de trasmisión respecto de la normal. También se incluyen las componentes  $p$  y  $s$  de la polarización de la luz.

Cuando la incidencia no es normal a la interfaz la reflectancia y la transmitancia se evalúan a partir de los coeficientes de reflexión y trasmisión correspondientes a las componentes  $s$  y  $p$ , que vienen dados por [34]:



**Figura 1.5:** Reflexión y transmisión en una interfaz plana con incidencia de la luz en ángulo respecto de la normal a la interfaz. Se muestran las componentes  $p$  y  $s$  del campo eléctrico del haz de luz incidente. En la figura el plano de la hoja coincide con el plano de incidencia de la luz.

$$\tilde{r}_s = \frac{\tilde{n}_i \cos \theta_i - \tilde{n}_j \cos \theta_j}{\tilde{n}_i \cos \theta_i + \tilde{n}_j \cos \theta_j}, \quad (1.14-a)$$

$$\tilde{t}_s = \frac{2\tilde{n}_i \cos \theta_i}{\tilde{n}_i \cos \theta_i + \tilde{n}_j \cos \theta_j}, \quad (1.14-b)$$

$$\tilde{r}_p = \frac{\tilde{n}_j \cos \theta_i - \tilde{n}_i \cos \theta_j}{\tilde{n}_j \cos \theta_i + \tilde{n}_i \cos \theta_j}, \quad (1.14-c)$$

$$\tilde{t}_p = \frac{2\tilde{n}_i \cos \theta_i}{\tilde{n}_j \cos \theta_i + \tilde{n}_i \cos \theta_j}. \quad (1.14-d)$$

A partir de estos coeficientes, la reflectancia y la transmitancia en la interfaz se calculan como:

$$R = \frac{1}{2} \left( |\tilde{r}_s|^2 + |\tilde{r}_p|^2 \right), \quad (1.15)$$

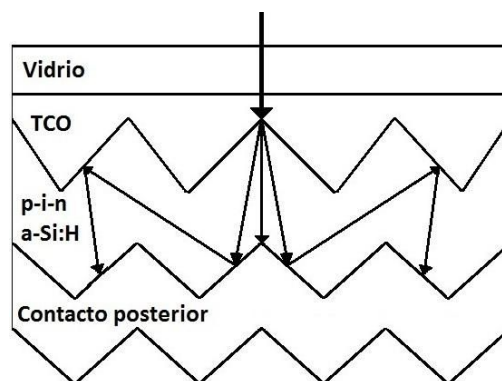
$$T = \frac{1}{2} \left( \left| \frac{\tilde{n}_j \cos \theta_j}{\tilde{n}_i \cos \theta_i} \right| |\tilde{t}_s|^2 + \left| \frac{\tilde{n}_j \cos \theta_i}{\tilde{n}_i \cos \theta_j} \right| |\tilde{t}_p|^2 \right). \quad (1.16)$$

Un sistema óptico simple de una capa de material contiene dos interfaces separadas por una distancia o espesor  $d$  determinado. Al pasar la luz a través de esta capa de material una fracción de la misma es absorbida. La absorbancia ( $A$ ) se define como la relación entre la energía absorbida por el material y la energía incidente. Entre los tres procesos  $R$ ,  $T$  y  $A$  se cumple la relación  $R + T + A = 1$  que surge de ley de conservación de la energía. En esta ecuación,  $R$  y  $T$  se refieren a la reflectancia y transmitancia del sistema compuesto por la capa de material y las dos interfaces. Por lo tanto para evaluarlas se deben contemplar los procesos de reflexión y de transmisión que tienen lugar en ambas interfaces, que vienen dadas por las Ecuaciones (1.15) y (1.16) del sistema, y se deben tener en cuenta las sucesivas reflexiones que tienen lugar dentro del material, lo que da lugar a expresiones de  $R$  y  $T$  más complejas que las anteriores. Asimismo, en cada reflexión del haz incidente hay un nuevo paso de la luz por el material y por consiguiente se produce una nueva absorción. En una estructura multicapa, como las que presentan los foto-transistores, celdas solares o detectores ópticos, es necesario tener en cuenta las reflexiones múltiples posibles en todas las interfaces para poder evaluar correctamente la foto-corriente eléctrica generada por el dispositivo al absorber la luz incidente. Se pueden utilizar métodos iterativos de seguimiento de los rayos lumínicos o métodos matriciales.

Para incrementar la absorción de la luz incidente en distintos dispositivos optoelectrónicos se implementan técnicas conocidas como de "light trapping" (atrapamiento de luz). Estas técnicas utilizan sustratos texturados y reflectores posteriores especiales con el objetivo de capturar la luz incidente en determinadas zonas de los dispositivos y evitar que no sea absorbida y escape. La utilización de sustratos texturados disminuye la pérdida por reflexión en la cara frontal del dispositivo y desvían el haz incidente de la trayectoria perpendicular a la interfaz. Esto provoca un incremento del camino óptico recorrido dentro de la capa intrínseca,

capa donde debe absorberse preferentemente la luz ya que contiene una densidad de defectos bastante menor que las capas dopadas. La gran densidad de defectos presentes en las capas dopadas hace que la probabilidad de recombinación de los pares e-h foto-generados sea elevada. Por ese motivo las capas dopadas se crecen con los espesores mínimos posibles a los efectos también de sustentar el campo eléctrico y evitar hacer un efecto de sombra sobre la luz que incide sobre la capa intrínseca. Los reflectores posteriores previenen la pérdida por transmisión en el contacto posterior debido a la diferencia entre su índice de refracción y el del material absorbente.

A modo de ejemplo, en la Figura 1.6 se ilustra una representación esquemática de la técnica “light trapping” en una celda solar de a-Si:H. La luz incidente pasa a través del vidrio y del electrodo frontal de la celda, que usualmente consiste en un TCO. Al llegar a la interfaz rugosa se produce una dispersión de la luz que penetra en la juntura p-i-n de a-Si:H. Los fotones que no son absorbidos en la juntura llegan al contacto posterior de la celda, que está compuesto por una delgada capa de ITO (indium tin oxide) o ZnO y un metal, generalmente aluminio o plata. La luz que se trasmite a través de este contacto es considerada como pérdida óptica y por esta razón se busca maximizar la reflexión en esta interfaz. La superficie que separa al silicio del contacto posterior también es rugosa para provocar la dispersión de la luz que se refleja en ella. Además, debido a que el índice de refracción del a-Si:H es mayor que el del ITO, los rayos que llegan a la interfaz desde la juntura con un ángulo mayor al ángulo crítico son reflejados totalmente y vuelven a atravesar la capa de a-Si:H. En la Figura 1.4 se pueden observar comparativamente los índices de refracción del a-Si:H y del TCO (TCO e ITO tienen índices de refracción similares). La rugosidad de las interfaces y la reflexión interna en el contacto posterior posibilitan que la luz pueda atravesar varias veces la capa de a-Si:H, aumentando la absorción dentro de la misma.



**Figura 1.6:** Representación esquemática del proceso de *light trapping* en una celda solar de a-Si:H.

### 1.4.2 Coeficiente de absorción

Existen distintos procesos de absorción en los semiconductores, como la absorción entre sub-bandas, entre impurezas y bandas, de portadores libres dentro de una banda, etc., siendo el proceso banda a banda el más significativo, especialmente para energías próximas o superiores al gap óptico. El término absorción fundamental hace referencia a los procesos en los cuales un electrón de la banda de valencia se excita a la banda de conducción (absorción banda a banda y excitónica). El proceso de la absorción fundamental banda-banda es utilizado para determinar experimentalmente el gap óptico de los semiconductores que en los materiales desordenados no coincide con el gap de movilidad. En el proceso banda a banda un fotón que llega a un semiconductor interacciona con un electrón de la banda de valencia y lo promueve a la banda de conducción, dejando un hueco en la banda de valencia y creándose así un par e-h. Tanto la energía como el momento del conjunto de partículas involucradas en el proceso de excitación de un electrón deben conservarse. El electrón y el hueco foto-generados son separados entre sí por el campo eléctrico presente en la capa intrínseca de una juntura p-i-n o alternativa y son empujados hacia los contactos externos donde son colectados. No todos los portadores generados son colectados. Algunos de ellos, en su trayecto hacia el contacto, son aniquilados por recombinación con otros portadores de carga opuesta, mientras que otros viajan en sentido opuesto al campo por un mecanismo de difusión. En el caso de excitones, los electrones y huecos no llegan a ser libres y viajan en forma conjunta mantenidos por la atracción coulombiana hasta que finalmente son separados.

Los fonones son partículas relacionadas a la vibración de la red en un semiconductor. Se caracterizan por ser partículas de baja energía (del orden de  $k_B T$ ) y momento  $k$  relativamente alto. El fotón, en cambio, posee un momento muy pequeño en comparación con el momento de la red. En un semiconductor de gap indirecto, como es el caso del c-Si, donde en un diagrama de bandas  $E(k)$  el máximo de la banda de valencia no coincide con el mínimo de la banda de conducción, para conservar el momento en el proceso de excitación de un electrón es necesaria la intervención de un fonón. Este fonón puede ser absorbido o emitido en el proceso.

En el c-Si, el coeficiente de absorción para un fotón que posee una dada energía  $h\nu$ , donde  $h$  es la constante de Planck y  $\nu$  es la frecuencia del fotón, es proporcional a la densidad de estados iniciales ocupados con un electrón y a la densidad de estados finales disponibles integrado sobre todas las posibles combinaciones de estados separadas por  $h\nu \pm E_{fonon}$ . También es proporcional a la probabilidad de interacción con los fonones, que depende de la función  $f(N_{fonon})$  donde  $N_{fonon}$  es el número de fonones con una energía determinada. La expresión para definir el coeficiente de absorción surge de plantear los balances de energía y de momento.



En contraposición al c-Si, el a-Si:H se comporta como un material de gap directo. Debido a la pérdida de orden en el largo alcance el momento  $k$  del cristal deja de ser un número cuántico adecuado para describir la estructura cristalina del material. Por lo tanto, para el caso del a-Si:H, la ley de conservación del momento para la transición banda a banda, se relaja. Una consecuencia directa de esto es la mayor absorción de la luz visible que se da en el a-Si:H en comparación con el c-Si. Como puede observarse en la Figura 1.7, el material amorfo presenta valores del coeficiente de absorción más altos respecto del cristalino para energías mayores a 1,75 eV. En esta figura también se puede observar que el a-Si:H no presenta una transición abrupta en el espectro de absorción como sí lo hace el c-Si, lo que conlleva una dificultad para determinar el valor del gap óptico de este material. Existen numerosos trabajos en los que se proponen distintas definiciones para el gap óptico. La más simple es la que define este parámetro como la energía del fotón para la cual el coeficiente de absorción adquiere un determinado valor, por ejemplo  $\alpha = 2 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ . Este método, si bien es eficiente, da lugar a una gran incertidumbre. Se ha demostrado experimentalmente que las magnitudes del coeficiente de absorción varían con el espesor y la rugosidad de la muestra. Además esta técnica no brinda información sobre la forma de la curva del espectro de absorción.

La definición más utilizada para definir el gap óptico fue presentada por Tauc et al. [35] y se la conoce como el gap de Tauc. Este método se deriva de las transiciones ópticas que tienen lugar entre los estados de la banda de valencia y la de conducción, las cuales se suponen con distribución parabólica y cuyos elementos de matriz de momento se asumen independientes de la energía. El resultado final es la siguiente relación:

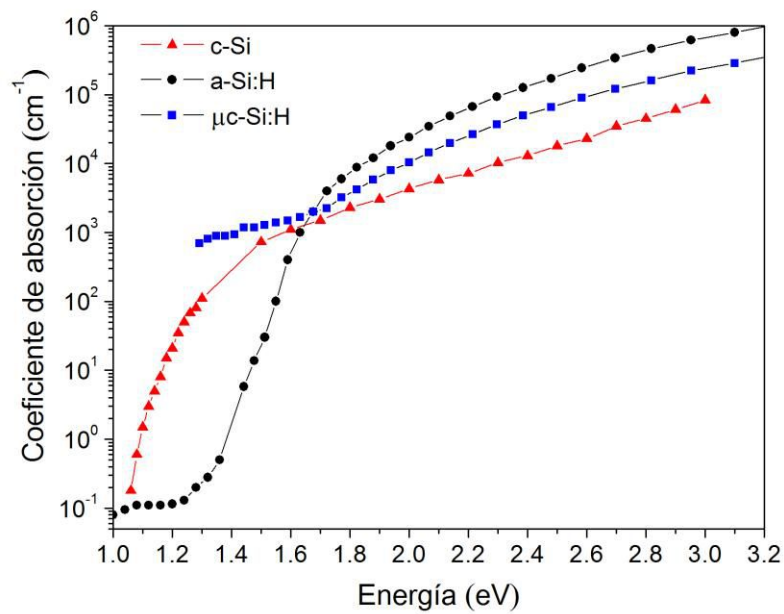
$$(\alpha n h \nu)^{\frac{1}{2}} = C_{Tauc} (h \nu - E_{Tauc}) \quad (1.17)$$

donde  $n$  es el índice de refracción,  $h \nu$  es la energía del fotón,  $C_{Tauc}$  es una constante y  $E_{Tauc}$  es el gap de Tauc. Se suele eliminar el índice de refracción de esta fórmula ya que la variación que éste presenta en el rango de energía de interés es muy pequeña comparada a la de  $\alpha$ . De esta manera se obtiene una extrapolación lineal de  $(\alpha n h \nu)^{1/2}$  vs  $h \nu$ . La desventaja de este método en relación al a-Si:H es que la relación lineal no se mantiene para toda la región de estados extendidos, obteniéndose resultados un poco ambiguos. El valor del gap óptico que se obtiene con este método depende fuertemente de la región de  $(\alpha n h \nu)^{1/2}$  que se usa para la extrapolación [36].

Otra definición alternativa que consigue una buena linealidad en la extrapolación fue propuesta por Cody et al. [37] y verificada por Collins et al. [38]. Esta definición se basa en las transiciones ópticas cuyos elementos de matriz dipolar se asumen independientes de la energía y establece la siguiente relación final:

$$\varepsilon_2^{\frac{1}{2}} = C_{Cody/Collins} (h\nu - E_{Cody/Collins}) \quad (1.18)$$

donde  $\varepsilon_2$  es la parte imaginaria de la función dieléctrica y  $C_{Cody/Collins}$  es una constante. Existe evidencia experimental que respalda este método. El gap óptico del a-Si:H se ubica aproximadamente entre 1,62 eV y 1,7eV. En nuestro código el gap óptico se define como la energía del fotón por debajo de la cual no hay absorción de luz. No es un valor relevante para nuestras simulaciones. En la práctica es común ingresar tablas  $\alpha(\lambda)$  y  $n(\lambda)$  para los coeficientes de absorción e índice de refracción en función de la longitud de onda para energías de fotones tanto por encima como por debajo del gap óptico, a los efectos de incluir las transiciones sub-gap en forma aproximada. De todas maneras, los portadores foto-generados por debajo del gap óptico no dan lugar a una contribución muy significativa de la foto-corriente.



**Figura 1.7:** Coeficiente de absorción para el a-Si:H, μc-Si:H y c-Si.

## Capítulo 2

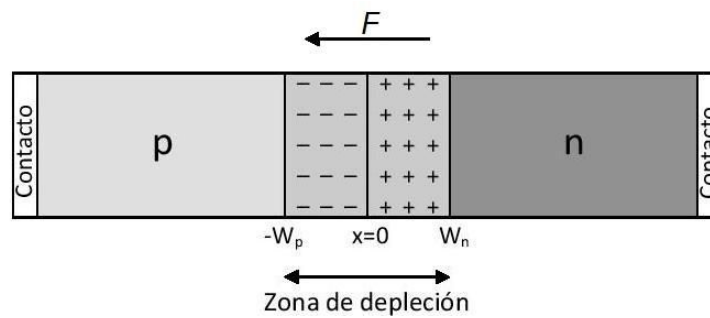
# Modelado de dispositivos y características de las juntas p-i-n

### 2.1 Junta p-i-n

Se han construido celdas solares basadas en c-Si con diferentes estructuras: homojuntas p-n, heterojuntas p-n, barreras Schottky, estructuras MIS con una capa de óxido muy fina ( $\sim 30\text{\AA}$ ) entre el metal y el c-Si, etc. Las estructuras que presentan las mejores eficiencias se basan en las dos primeras configuraciones con el agregado de capas de dopaje elevado en las cercanías de los contactos posterior (back surface field) y anterior (front surface field), que en juntas p-n, disminuyen las pérdidas por difusión de huecos y electrones, respectivamente. Entre los dispositivos de c-Si mencionados las celdas solares más convencionales se producen a partir de juntas p-n, que se forman uniendo una capa de material dopado tipo p y una capa dopada tipo n. Al ponerse en contacto las dos capas los portadores mayoritarios de la capa n, electrones, difunden hacia la capa p donde se recombinan con los huecos. Un proceso análogo tienen lugar con los portadores mayoritarios de la capa p, huecos, que difunden hacia la capa n donde se recombinan con los electrones. El desplazamiento de los portadores libres en las proximidades de la junta da lugar a la aparición de cargas netas a ambos lados de la interfaz que provienen de las impurezas dopantes que están ionizadas a temperatura ambiente, y que al ser inmóviles no pueden ser neutralizadas por las cargas libres que cruzaron la interfaz p/n. Se crea así una zona de depleción en torno a la junta y un campo eléctrico interno  $F$ .

Cuando un haz de luz incide sobre la junta p-n genera pares e-h en todo el dispositivo. Los electrones foto-generados en la zona p se mueven por difusión hasta alcanzar la zona de vaciamiento donde el campo los empuja por un mecanismo de drift hacia el contacto que se encuentra en el extremo posterior de la capa n, mientras que los electrones foto-generados en la

zona n pueden alcanzar el mismo contacto también por difusión. Un proceso similar ocurre con los huecos foto-generados en la zona n que se desplazan por difusión hacia la zona de vaciamiento donde el campo eléctrico los empuja hacia el contacto frontal de la capa p, mientras que los electrones foto-generados en la zona p pueden por difusión viajar hacia el mismo contacto. Los portadores recogidos por los contactos establecen la corriente eléctrica. Simultáneamente algunos electrones y huecos foto-generados en las zonas p y n respectivamente pueden por difusión salir a través de los contactos frontal y posterior y no contribuir a la foto-corriente, dando lugar a pérdidas adicionales a las causadas por recombinación de pares e-h. En la Figura 2.1 se muestra la estructura de un dispositivo p-n.



**Figura 2.1:** Junta p-n donde se esquematiza la zona de depleción y el campo eléctrico interno.

Por lo descrito, en las junturas p-n los portadores foto-generados se transportan mayoritariamente por el mecanismo de difusión, es decir, por la presencia de un gradiente de concentración de portadores. En una primera aproximación la densidad de corriente  $J$  en un dispositivo (que se define como la intensidad de corriente  $I$  sobre el área  $A$  del dispositivo,  $J = I/A$ ), derivada del fenómeno de difusión, se calcula sumando la corriente de difusión de portadores minoritarios presente en los bordes de la zona de vaciamiento: electrones del lado p y huecos del lado n. La misma viene dada por:

$$J \approx J^{dif} = J_n^{dif} + J_p^{dif} , \quad (2.1)$$

con

$$J_n^{dif}(-W_p) = eD_n \left. \frac{dn}{dx} \right|_{x=-W_p} , \quad (2.2-a)$$

$$J_p^{dif}(W_n) = -eD_p \left. \frac{dp}{dx} \right|_{x=W_n} , \quad (2.2-b)$$

donde  $D_n$  y  $D_p$  son los coeficientes de difusión de electrones y huecos, respectivamente, y  $e$  es la carga del electrón. El coeficiente de difusión de electrones (huecos) indica qué tan bien se pueden mover los electrones (huecos) en un semiconductor producto de la presencia de un

gradiente de concentración de los mismos. Es, en algún sentido, un concepto similar al concepto de movilidad presentado en el capítulo anterior, pero relacionado al movimiento por difusión. Estos dos parámetros, la movilidad  $\mu$  y el coeficiente de difusión  $D$ , no son independientes sino que están conectados por la relación de Einstein:

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{kT}{e}. \quad (2.3)$$

La eficiencia de estos dispositivos se ve disminuida por el proceso de recombinación mediante el cual un electrón de la banda de conducción y un hueco de la banda de valencia se combinan antes de llegar a los contactos. La distancia promedio que recorre un portador antes de recombinarse se conoce como longitud de difusión. La longitud de difusión se reduce ante la presencia de estados localizados en el material, los cuales actúan como centros efectivos de recombinación. La evaluación de la corriente  $J$  en la ecuación (2.1) puede hacerse más precisa agregando la recombinación que tiene lugar dentro de la zona de vaciamiento [31].

En comparación con los semiconductores cristalinos, los semiconductores desordenados como el a-Si:H y el  $\mu$ c-Si:H presentan una gran cantidad de estados localizados que disminuyen drásticamente la longitud de difusión de los portadores, sobre todo en las capas dopadas ya que el dopaje que se introduce en estos materiales genera una gran cantidad de DBs adicionales. Una juntura p-n de a-Si:H o  $\mu$ c-Si:H produciría un dispositivo muy ineficiente, ya que al ser la longitud de difusión de los electrones y huecos muy bajas, el ancho del dispositivo debería ser pequeño, no pudiéndose generar una cantidad razonable de pares e-h. Si, por el contrario, se utilizan espesores del orden de la inversa del coeficiente de absorción óptica, la mayoría de los portadores foto-generados se recombinaría antes de llegar a la zona de vaciamiento y de allí a los contactos.

Por esta razón, en la construcción de dispositivos de a-Si:H o  $\mu$ c-Si:H se introduce una capa intrínseca con relativamente baja cantidad de defectos entre las capas p y n, es decir se emplean junturas p-i-n. La estructura p-i-n se parece a la de un capacitor, donde las placas serían las zonas dopadas p- y n- (o más bien los nm de las capas dopadas contiguos a la capa intrínseca) con cargas negativas y positivas creadas por los dopantes ionizados, que al no poder moverse dejan de ser neutralizados por los portadores mayoritarios que abandonaron la región por difusión. La considerablemente menor densidad de defectos existente en el semiconductor intrínseco con respecto a la de las capas dopadas da lugar a la presencia de un campo eléctrico relativamente uniforme a lo largo de la capa intrínseca que no es apantallado en pocos nm como sucede en las capas dopadas p y n de una eventual juntura p-n de a-Si:H, debido a la gran densidad de cargas atrapadas presentes. En una celda solar o en un fotodiodo este campo separa

los portadores foto-generados y los “empuja” hacia los contactos, permitiendo que gran parte de ellos lleguen a los mismos antes de recombinarse. En estos dispositivos el principal mecanismo de transporte no es el de difusión, sino el de deriva o drift. La distancia promedio que recorre un portador antes de recombinarse en la zona intrínseca viene definida por longitud “drift” y no por la longitud de difusión. La longitud drift es proporcional a la intensidad del campo eléctrico y es superior a la longitud de difusión [18]. Las capas dopadas se diseñan con espesores muy finos para minimizar la resistencia eléctrica y evitar que se produzca una absorción significativa de la luz fuera de la capa *i* ya que la elevada densidad de DBs haría que muchos foto-portadores se pierdan por recombinación. En la Sección 2.2.2 se presentan expresiones generales para la densidad de corriente  $J$ .

## 2.2 Modelado de dispositivos y software de simulación D-AMPS

Gran parte de esta tesis se realizó en base al empleo de técnicas de simulaciones numéricas. El código utilizado, D-AMPS, está basado en el software Analysis of Microelectronic and Photonic Structures (AMPS) [11] originariamente desarrollado en Pennsylvania State University por el grupo liderado por el Prof. S. J. Fonash. El programa D-AMPS (New Developments + AMPS), contiene numerosas modificaciones y aportes respecto del software original AMPS, introducidas por el Dr. Francisco A. Rubinelli. Los aportes más significativos consisten en la implementación del modelo de Defect Pool (DPM) [39,17], el tratamiento de “scattering” de la luz en superficies rugosas [40], la incorporación del modelo de Hurkx que combina la recombinación de pares e-h con el proceso de “tunneling” [41] y del modelo de Gu, donde las densidades efectivas de estados son funciones del campo eléctrico [42] entre otros.

La primera etapa en el modelado de dispositivos con métodos numéricos es la calibración del código a partir de datos experimentales. El calibrado consiste en modificar algunos parámetros de entrada del modelo que no son provistos experimentalmente de tal manera de poder reproducir las curvas características de salida de los dispositivos medidas en el laboratorio. El segundo paso consiste en utilizar el código calibrado como herramienta para el estudio de la problemática a abordar, por ejemplo, para analizar la sensibilidad de las curvas características de un dispositivo a parámetros que se pueden controlar durante su fabricación para maximizar su respuesta, o comprobar los rangos de validez de una aproximación, o determinar las limitaciones que determinadas técnicas experimentales tienen para estimar parámetros eléctricos u ópticos, etc.

Los fenómenos de transporte en dispositivos semiconductores están gobernados por tres ecuaciones no-lineales: la ecuación de Poisson, la ecuación de continuidad para huecos y la

ecuación de continuidad para electrones. Para determinar cuantitativamente las características y la performance de los dispositivos, estas tres ecuaciones son resueltas a partir de métodos numéricos sujetos a apropiadas condiciones de contorno. En este apartado se explica el método de resolución del sistema de ecuaciones utilizado en D-AMPS sin profundizar demasiado en los aspectos matemáticos. El objetivo de esta sección es lograr una mejor comprensión de los resultados presentados en los capítulos siguientes.

Una primera característica importante a destacar es que el código está desarrollado para sistemas unidimensionales. En los dispositivos como detectores ópticos o celdas solares de laboratorio (celdas de 1 cm<sup>2</sup> de área) es comúnmente aceptada la hipótesis de la homogeneidad de las propiedades eléctricas y ópticas en los planos paralelos a la superficie sobre la que incide la luz perpendicularmente. Estas propiedades sólo varían en la dirección “de profundidad” del dispositivo que se adopta en esta tesis como la dirección “ $x$ ”. D-AMPS define como  $x = 0$  a la coordenada espacial de la interfaz entre el contacto frontal y la primera capa semiconductor del dispositivo y como  $x = L$  a la interfaz entre el contacto posterior y la última capa semiconductor del dispositivo, o sea  $L$  es la distancia entre ambos contactos.

### 2.2.1 Ecuación de Poisson

La ecuación de Poisson es una de las cuatro leyes de Maxwell y establece la relación entre la densidad de carga  $\rho$  y el campo eléctrico  $F$  presente en el material. En un espacio unidimensional su expresión es la siguiente:

$$\frac{d}{dx} \left[ -\varepsilon(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right] = \rho(x), \quad (2.4)$$

donde  $\varepsilon$  es la permitividad del semiconductor y  $\Psi$  es el potencial eléctrico que ve un electrón o hueco y cuya derivada respecto de la distancia es el campo eléctrico  $F$ . La densidad de carga eléctrica total viene dada por la suma de las componentes de la densidad de carga libre, la densidad de carga atrapada, y la concentración de dopantes ionizados, pudiendo expresarse como:

$$\rho(x) = e[p(x) - n(x) + N_d(x) - N_a(x) + p_t(x) - n_t(x)], \quad (2.5)$$

donde  $e$  es la carga del electrón,  $n(x)$  y  $p(x)$  son la densidades de electrones y huecos libres, respectivamente,  $n_t(x)$  y  $p_t(x)$  son la densidades de electrones y huecos atrapados en los estados localizados del gap y  $N_d(x)$  y  $N_a(x)$  son la densidades de átomos de impurezas ionizadas donoras y aceptoras, respectivamente. Los términos de densidad de carga libre,  $n(x)$  y  $p(x)$ , en condiciones de equilibrio termodinámico, corresponden a los electrones y huecos excitados

térmicamente a la banda de conducción y valencia, respectivamente, y que pueden moverse libremente. Los parámetros  $n$  y  $p$  son función de la variable  $x$ , es decir, adquieren diferentes valores para diferentes posiciones dentro del dispositivo. A continuación, se presentan las ecuaciones que permiten evaluar  $n$  y  $p$  para una posición  $x$  dada.

La concentración  $n(p)$  resulta de integrar el producto entre la densidad efectiva de estados extendidos  $g_{bc}(E_t)$  ( $g_{bv}(E_t)$ ) y la probabilidad de ocupación de los estados respecto a la energía en toda la banda de conducción (valencia). Definiendo  $f_n(E_t)$  como la función de ocupación de electrones y  $1-f_n(E_t)$  como la función de ocupación de huecos,  $n$  y  $p$  pueden expresarse como:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g_c(E_t) f_n(E_t) dE_t, \quad (2.6-a)$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} g_v(E_t) [1 - f_n(E_t)] dE_t. \quad (2.6-b)$$

Las integrales van desde el borde de la banda de conducción  $E_c$  hasta infinito, para la densidad de electrones libres, y desde menos infinito hasta el borde de la banda de valencia  $E_v$ , para la densidad de huecos libres. La probabilidad de ocupación viene dada por la distribución de Fermi-Dirac:

$$f_n(E_t) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E_t - E_f}{kT}\right]}, \quad (2.7)$$

donde  $E_f$  es nivel de Fermi,  $k$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura del dispositivo expresada en Kelvin. Para el rango de operación habitual de los dispositivos de a-Si:H y  $\mu$ c-Si:H estudiados, la distribución de Fermi-Dirac puede aproximarse a la distribución de Boltzmann ya que el nivel de Fermi se encuentra alejado de los bordes de banda en no menos de  $5kT$  (el término  $E_t - E_f$  en la Ecuación (2.7) es mayor a 5 veces  $kT$ ). Esta aproximación simplifica significativamente las expresiones de  $p$  y  $n$ . La aproximación de Boltzmann permite expresar la función de ocupación de electrones como:

$$f_n(E_t) = \exp\left[\frac{-(E_t - E_f)}{kT}\right]. \quad (2.8)$$

Teniendo en cuenta las expresiones para la densidad de estados en las bandas de conducción y valencia presentadas en el capítulo anterior (ver Ecuaciones (1.1) y (1.2)) las Ecuaciones (2.6) se pueden reescribir bajo condiciones de equilibrio térmico como [31]:

$$n_{eq} = N_c \exp\left(\frac{E_f - E_c}{kT}\right), \quad (2.9-a)$$



$$p_{eq} = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_f}{kT}\right), \quad (2.9-b)$$

donde  $N_c$  y  $N_v$  representan la densidades efectivas de estados en las bandas de conducción y valencia. Los parámetros  $N_c$  y  $N_v$  dependen de algunas constantes como la masa efectiva del portador (electrón en el caso de  $N_c$  y hueco para  $N_v$ ) y de la temperatura con un exponente igual a  $3/2$ , pero no son funciones de la energía porque se obtienen como parte del resultado de realizar la integración. En esta tesis se trabajará con la hipótesis ampliamente utilizada en la bibliografía que propone que las densidades efectivas de estado son constantes para un dado material, o sea, en todo el ancho de cada una de las capas del dispositivo. Los parámetros  $N_c$  y  $N_v$  son parámetros eléctricos de entrada para el código D-AMPS.

En sistemas fuera del equilibrio térmico y que han alcanzado un estado estacionario se emplea el concepto de los cuasi-niveles de Fermi, uno para electrones,  $E_{fn}$ , y otro para huecos,  $E_{fp}$ , que reemplazan al único nivel de Fermi correspondiente al escenario de equilibrio termodinámico. Las expresiones de  $n$  y  $p$  derivadas para equilibrio térmico siguen siendo válidas en condiciones de estado estacionario simplemente reemplazando  $E_f$  por  $E_{fn}$  y  $E_{fp}$  según:

$$n = N_c \exp\left(\frac{E_{fn} - E_c}{kT}\right), \quad (2.10-a)$$

$$p = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_{fp}}{kT}\right). \quad (2.10-b)$$

Este escenario se conoce en la literatura de dispositivos como cuasi-equilibrio y supuestamente es válido cuando el sistema no se aparta demasiado del equilibrio. En dispositivos semiconductores, especialmente si son desordenados, un electrón (hueco) que se encuentra en la banda de conducción (valencia) y se mueve hacia uno de los contactos puede ser atrapado por un estado de defecto y permanecer allí un tiempo antes de proseguir con su trayectoria. El atrapamiento de carga por los estados localizados del gap conlleva a la definición de las densidades de electrones y huecos atrapados  $n_t(x)$  y  $p_t(x)$ . Para el cálculo de la carga atrapada se debe integrar en energía el producto entre la densidad de estados dentro del gap y la probabilidad de ocupación de los mismos. Los límites de la integral están definidos por los bordes de banda. Las expresiones de  $n_t$  y  $p_t$  varían según el modelo que se adopte para caracterizar los estados de defectos o DBs.

Para el modelo de estados desacoplados simples (donores y aceptores) las densidades de electrones y huecos atrapados están dadas respectivamente por:

$$n_t = \int_{E_v}^{E_c} g_a(E_t) f_a(E_t) dE_t, \quad (2.11-a)$$

$$p_t = \int_{E_v}^{E_c} g_d(E_t)[1 - f_d(E_t)]dE_t , \quad (2.11-b)$$

donde  $g(E_t)$  representa la distribución de estados dentro del gap y  $f(E_t)$  la función de ocupación de electrones. Los subíndices  $a$  y  $d$  se utilizan para diferenciar las funciones que corresponden a los estados aceptores y donores, respectivamente. En la Sección 2.3.1 se describe el formalismo de Shockly-Read-Hall (SRH) que permite derivar las expresiones correspondientes a  $f_a$  y  $f_d$ .

Dentro del modelo de estados anfotéricos la probabilidad de ocupación de los estados en los DBs viene dada por tres expresiones (en lugar de dos) que describen la probabilidad de ocupación de los estados de defectos por cero, uno o dos electrones. Por lo tanto si  $F^+(E_t)$  describe la probabilidad de que una trampa no contenga electrones (carga positiva),  $F^0(E_t)$  la probabilidad de que contenga un electrón (carga neutra) y  $F^-(E_t)$  la probabilidad de que contenga dos electrones (carga negativa) las densidades de electrones y huecos atrapados vienen expresadas por:

$$n_t = \int_{E_v}^{E_c} g_{DB}(E_t)F^-(E_t)dE_t , \quad (2.12-a)$$

$$p_t = \int_{E_v}^{E_c} g_{DB}(E_t)F^+(E_t)dE_t , \quad (2.12-b)$$

donde  $g_{DB}(E_t)$  es la densidad de DBs en función de la energía dentro del gap. En la Sección 2.3.2 se presentan las expresiones para  $F^+(E_t)$ ,  $F^0(E_t)$  y  $F^-(E_t)$ .

Las densidades de impurezas ionizadas  $N_d(x)$  y  $N_a(x)$  son directamente parámetros de entrada del código, ya que dentro del rango de temperaturas que se utilizarán en esta tesis se pueden asumir como completamente ionizadas.

## 2.2.2 Ecuaciones de continuidad

Las ecuaciones de continuidad describen el flujo de portadores libres junto a la tasas de recombinación y generación de pares e-h que con la ecuación de Poisson completan la descripción del transporte eléctrico de electrones y huecos en las bandas de conducción y valencia, respectivamente. La presente tesis se concentra en dispositivos que operan en el estado estacionario, donde el flujo neto de carga a través de un determinado volumen no cambia con el tiempo. Las ecuaciones de continuidad de electrones y huecos en un espacio unidimensional vienen expresadas por:

$$\frac{1}{e} \left( \frac{dJ_n}{dx} \right) = -G(x) + R(x) , \quad (2.13-a)$$

$$\frac{1}{e} \left( \frac{dJ_p}{dx} \right) = G(x) - R(x), \quad (2.13-b)$$

donde  $J_n$  y  $J_p$  son las densidades de corriente de electrones y de huecos, respectivamente,  $G$  es la velocidad o tasa de generación óptica de pares e-h y  $R$  es la velocidad o tasa de recombinación de pares e-h. Estas ecuaciones corresponden al principio físico de conservación del número de partículas: las derivadas de las corrientes expresan el flujo neto entrante o saliente en un diferencial de volumen  $dV$ , mientras que  $G$  incluye las fuentes y  $R$  los sumideros de portadores dentro del volumen  $dV$ .

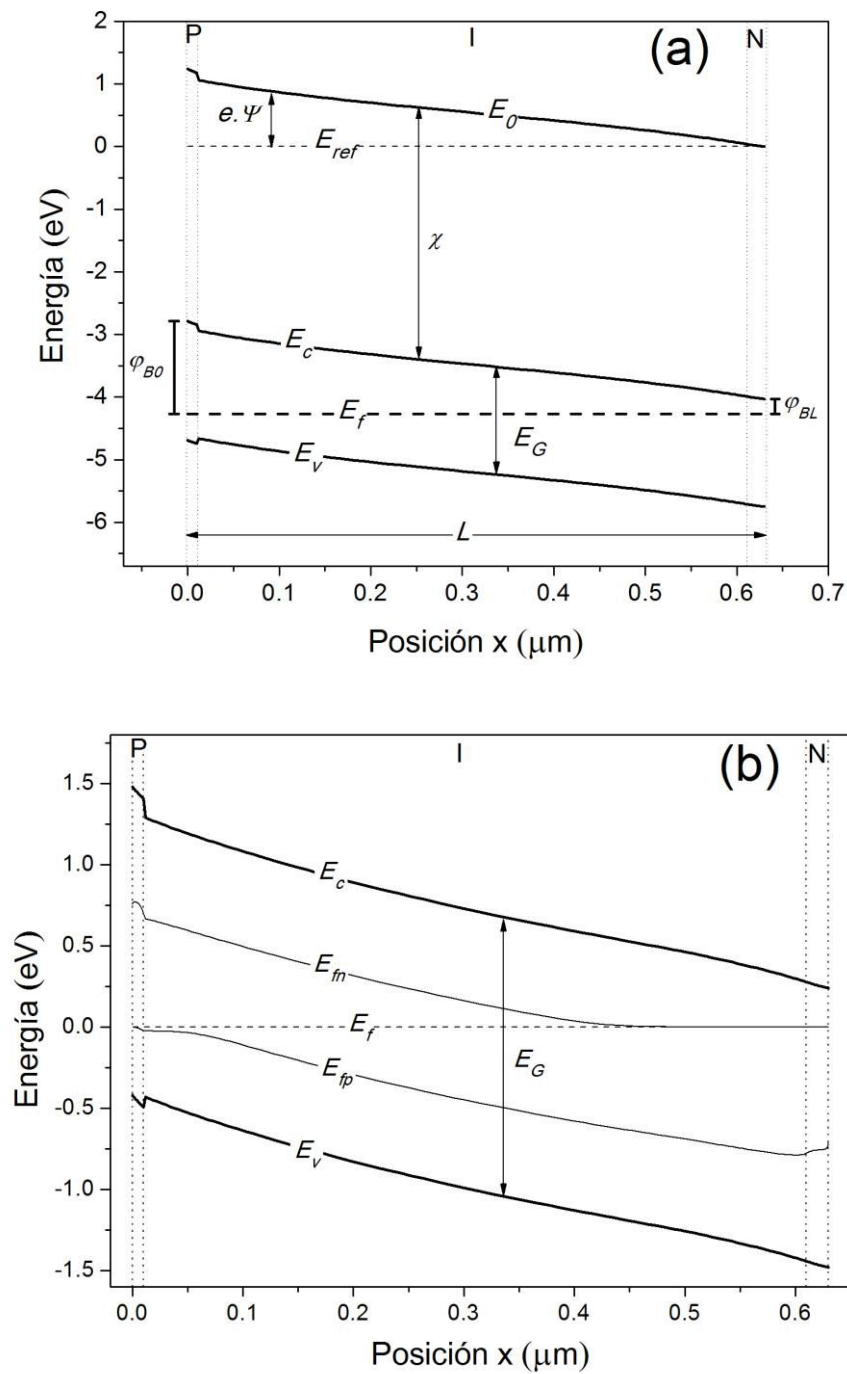
D-AMPS utiliza las siguientes expresiones generales para las densidades de corriente:

$$J_n = e\mu_n n \frac{dE_{fn}}{dx}, \quad (2.14-a)$$

$$J_p = -e\mu_p p \frac{dE_{fp}}{dx}. \quad (2.14-b)$$

En la Figura 2.2(a) se presenta un diagrama de bandas típico de un dispositivo p-i-n de a-Si:H en equilibrio termodinámico. En esta figura se esquematizan los bordes de la banda de valencia y de conducción,  $E_v$  y  $E_c$ , el nivel de Fermi  $E_F$  y el nivel de vacío  $E_0$  cuyos valores de energía están referidos a un nivel denominado como  $E_{ref}$ . En la Figura 2.2(b) se exhibe el diagrama de bandas del mismo dispositivos, pero bajo condiciones de corto circuito e iluminación AM1.5, donde se muestran los cuasi-niveles de Fermi para electrones y huecos. El cero en la escala de energía en la Figura 2.2(b), se adoptó diferente del de la Figura 2.2(a), ubicándose en la posición del nivel de Fermi en  $x = L$ . Los cuasi-niveles de Fermi se definen en D-AMPS según la siguiente convención:  $E_{fn}$  se define como positivo por encima del nivel de referencia y  $E_{fp}$  se define como positivo por debajo del nivel de referencia. La posición del nivel de Fermi en  $x = L$  coincide con la posición del nivel de Fermi en equilibrio. Teniendo en cuenta esta convención se puede decir que los cuasi-niveles se miden como el valor absoluto de la energía con respecto a la referencia adoptada. La afinidad electrónica  $\chi$  es la energía necesaria para promover un electrón desde el fondo de la banda de conducción al nivel de vacío  $E_0$ .

De las Figuras 2.2 se puede deducir que la energía de los bordes de banda pueden expresarse como  $E_c = E_{ref} + e\psi - \chi$  y como  $E_v = E_c - E_G$ . Reemplazando estas igualdades en las Ecuaciones (2.9) y (2.10) se pueden despejar las siguientes expresiones para el nivel de Fermi en equilibrio y para los cuasi-niveles de Fermi fuera del equilibrio:



**Figura 2.2:** Diagrama de bandas de energía de un dispositivo p-i-n de a-Si:H (a) en equilibrio termodinámico y (b) bajo condiciones de corto circuito e iluminación AM1.5. Notar que el cero de la escala de energía en los dos gráficos está en distinta posición. La Figura (b) muestra el desdoblamiento del nivel de Fermi en equilibrio termodinámico en los dos cuasi-niveles de Fermi para condiciones de no equilibrio.

$$E_f = E_{ref} + e\psi - \chi + kT \ln\left(\frac{n_{eq}}{N_c}\right) = E_{ref} + e\psi - \chi - E_G - kT \ln\left(\frac{p_{eq}}{N_v}\right), \quad (2.15-a)$$

$$E_{fn} = E_{ref} + e\psi - \chi + kT \ln\left(\frac{n}{N_c}\right), \quad (2.15-b)$$

$$E_{fp} = E_{ref} + e\psi - \chi - E_G - kT \ln\left(\frac{p}{N_v}\right). \quad (2.15-c)$$

Los últimos términos en la expresión (2.15-a) corresponden a los bordes de las bandas de conducción y valencia,  $E_c$  y  $E_v$ , en equilibrio mientras que sus análogos en las expresiones (2.15-b) y (2.15-c) a sus equivalentes fuera del equilibrio. Reemplazando las expresiones (2.15) en las ecuaciones (2.14) y utilizando la relación de Einstein (Ecuación (2.3)) las densidades de corriente se pueden reescribir como:

$$J_n = eD_n \frac{dn}{dx} + \mu_n n \left( -e \frac{d\psi}{dx} - \frac{d\chi}{dx} - \frac{kT}{N_c} \frac{dN_c}{dx} \right), \quad (2.16-a)$$

$$J_p = -eD_p \frac{dp}{dx} + \mu_p p \left( -e \frac{d\psi}{dx} - \frac{d\chi}{dx} - \frac{dE_G}{dx} + \frac{kT}{N_v} \frac{dN_v}{dx} \right). \quad (2.16-b)$$

El primer término en ambas Ecuaciones (2.16) corresponde a la corriente por difusión inducida por los gradientes de concentraciones mientras que el segundo término representa la corriente de deriva o drift debida a la presencia de un campo eléctrico (primer término de la expresión entre paréntesis). Los siguientes términos (términos restantes de la expresión entre paréntesis) se engloban en una denominación común que se conoce como la corriente producida por un campo eléctrico adicional, denominado campo efectivo. Este campo se origina a partir de la no homogeneidad de algunos parámetros eléctricos del material: la afinidad electrónica, el gap de movilidad y las densidades efectivas de estados. En esta tesis se adoptará la hipótesis ampliamente aceptada en la literatura que considera la afinidad electrónica  $\chi$ , la densidad de estados efectivos  $N_c$  y  $N_v$  y el gap  $E_G$  como constantes en todo el ancho de cada una de las capas del dispositivo. Por lo tanto, estos términos son despreciables salvo en las regiones muy localizadas como las cercanas a las interfaces entre materiales diferentes, siendo no eficientes en las junturas p-i-n de a-Si:H o  $\mu$ c-Si:H tradicionales para la colección de portadores foto-generados. En las junturas p-i-n tradicionales de a-Si:H o  $\mu$ c-Si:H las expresiones para las densidades de corriente pueden reducirse a los dos primeros términos:

$$J_n = eD_n \frac{dn}{dx} + e\mu_n n F, \quad (2.17-a)$$

$$J_p = -eD_p \frac{dp}{dx} + e\mu_p p F. \quad (2.17-b)$$

La derivación rigurosa de la tasa de generación óptica  $G$  no es el objetivo de la presente tesis. A los efectos de dar una ligera idea del método de cálculo utilizado en el código para evaluar la tasa de generación óptica, que es función de los coeficientes de absorción y de los índices de refracción de los materiales incorporados en las diferentes capas del dispositivo, incluimos la siguiente expresión [43]:

$$G(x) = \frac{d}{dx} \left[ \int \Phi_{pos}(\lambda) \exp(-\alpha(\lambda)x) d\lambda + \int \Phi_{neg}(\lambda) \exp(\alpha(\lambda)x) d\lambda \right], \quad (2.18)$$

donde  $\Phi_{pos}$  y  $\Phi_{neg}$  representan, respectivamente, el flujo de fotones que se mueven en los sentidos positivo y negativo respecto de la posición dentro del dispositivo. Las expresiones de  $\Phi_{pos}$  y  $\Phi_{neg}$  contienen una serie de términos que resultan de tener en cuenta las múltiples reflexiones y transmisiones en las interfaces internas de una estructura multicapa junto a las sucesivas absorciones en cada capa del dispositivo. La serie puede ser infinita o finita si se decide tener en cuenta un número de pasos infinito o finito de la luz dentro del dispositivo. El término exponencial contiene el índice de absorción y la posición, contemplando el decaimiento exponencial del flujo de fotones producto de la absorción óptica. El modelo óptico de D-AMPS evalúa la reflexión y la transmisión de la luz en las distintas interfaces, a partir de los índices de refracción y de los coeficientes de extinción de las capas contiguas según las ecuaciones de Fresnel (Ecuaciones (1.14), (1.15) y (1.16)) vistas en el Capítulo 1. Los coeficientes de absorción, refracción y extinción son funciones de la longitud de onda y son parámetros de entrada en el código numérico, que se obtienen a partir de mediciones realizadas en películas delgadas (ver Sección 1.4.1). El tratamiento óptico de D-AMPS sucintamente descrito contempla las pérdidas por absorción y reflexión, no sólo en las capas p-, i- y n- de una estructura p-i-n sino también las que tienen lugar en los contactos frontal y posterior. La Ecuación (1.12) del Capítulo 1 es una simplificación de la (2.18) para el caso especial de que la muestra sea de un único material y de espesor considerable, a los efectos de poder despreciar la reflexión en el contacto posterior.

En el modelo óptico la intensidad  $I$  del haz incidente, se divide en  $N$  sub-haces de intensidades  $I/N$ . Cada haz ve ángulos diferentes en cada interfaz del dispositivo. Nuestro software óptico tiene en cuenta la rugosidad presente en las superficies de cada interfaz por medio de ángulos que “giran” el plano de las interfaces de la posición perpendicular al haz entre un ángulo mínimo y uno máximo, que pueden ser ingresados por el usuario. A mayor valor de ángulo máximo mayor rugosidad estará presente en la interfaz correspondiente. La generación de pares e-h total,  $G(x)$ , se obtiene sumando las contribuciones de cada sub-haz.

El término de recombinación,  $R(x)$ , en las Ecuaciones (2.13) hace referencia al proceso en el cual un electrón de la banda de conducción se aniquila con un hueco de la banda de valencia. Si bien existen diversos mecanismos de recombinación en los semiconductores, en el caso de los

semiconductores amorfos la recombinación a través de una trampa (defecto) situada en la banda prohibida es el mecanismo dominante. Dado que la densidad de estados presenta una distribución continua en estos materiales, para el cálculo de la recombinación se debe considerar la contribución de cada uno de los estados con energía dentro del gap a través de una integral sobre todos los estados presentes. Se define la eficiencia de recombinación,  $\eta_R(E_t)$ , como la recombinación por estado de energía a una energía dada  $E_t$ . Haciendo el producto entre la eficiencia de recombinación y la densidad de estados e integrando en energía entre la banda de valencia,  $E_v$ , y la de conducción,  $E_c$ , la tasa de recombinación  $R$  puede expresarse como:

$$R = \int_{E_v}^{E_c} g_{gap}(E_t) \eta_R(E_t) dE_t, \quad (2.19)$$

donde  $g_{gap}(E_t)$  es la densidad de estados en función de la energía dentro del gap, que varía dependiendo de qué modelo se adopte para caracterizar los estados de los defectos. En la sección 2.3 se deriva una expresión más detallada de la recombinación para los modelos de estados desacoplados y de estados anfotéricos.

### 2.2.3 Método de cálculo y condiciones de contorno

D-AMPS resuelve en forma simultánea las ecuaciones de Poisson y de continuidad, que son las que gobiernan la física de los fenómenos de transporte en un dispositivo. Estas ecuaciones están acopladas entre sí y son altamente no lineales. La solución sin aproximaciones del sistema de tres ecuaciones requiere del uso de técnicas numéricas. El dispositivo se divide en una cantidad  $N$  de puntos de grilla, donde el número  $N$  y la distribución de los puntos en la grilla pueden ser definidos por el usuario. En cada punto se resuelven las tres ecuaciones siendo el potencial  $\Psi(x)$  y los cuasi-niveles de Fermi para electrones y huecos,  $E_{fn}(x)$  y  $E_{fp}(x)$ , las variables independientes o las tres incógnitas del problema. Estas variables se empalman con las soluciones de los puntos adyacentes y definen condiciones de contornos adecuadas en los extremos, que serán analizadas a continuación. D-AMPS utiliza el método de diferencia finita para discretizar las ecuaciones y la técnica Newton-Raphson para encontrar la convergencia. A partir de las tres variables independientes es posible calcular las demás cantidades de interés, como el campo eléctrico, las densidades de corriente para electrones y huecos, la concentración de portadores libres, etc.

D-AMPS define las siguientes condiciones de contorno en los contactos frontal y posterior:

**(a)** Dos para el potencial  $\Psi(x)$ :

$$\Psi(L) = 0, \quad (2.20)$$

$$\Psi(0) = \Psi_{eq}(0) - V. \quad (2.21)$$

El potencial  $\Psi$  en  $x = L$ , o sea  $\Psi(L)$ , se establece igual a cero por convención, mientras que el potencial en  $x = 0$ , o sea  $\Psi(0)$ , viene dado por el valor del potencial en  $x = 0$  en condiciones de equilibrio termodinámico,  $\Psi_{eq}(0)$ , menos la tensión externa aplicada al dispositivo. El potencial  $\Psi_{eq}(0)$  se puede expresar a partir de las barreras del contacto frontal  $\varphi_{B0}$  y del contacto posterior  $\varphi_{BL}$ , según la siguiente ecuación:

$$\Psi_{eq}(0) = \varphi_{B0} - \varphi_{BL} + \chi(x=0) - \chi(x=L). \quad (2.22)$$

El parámetro  $\varphi_{B0}$  ( $\varphi_{BL}$ ) es la barrera de energía que tiene que superar un electrón externo al dispositivo para ingresar por el contacto frontal (posterior). En la Figura 2.2 se esquematizan estos niveles.

**(b)** Dos para la corriente de huecos:

$$J_p(0) = eS_{p0} (p(0) - p_{eq}(0)), \quad (2.23)$$

$$J_p(L) = eS_{pL} (p(L) - p_{eq}(L)). \quad (2.24)$$

**(c)** Dos para la corriente de electrones:

$$J_n(0) = eS_{n0} (n(0) - n_{eq}(0)), \quad (2.25)$$

$$J_n(L) = eS_{nL} (n(L) - n_{eq}(L)). \quad (2.26)$$

Los diferentes parámetros  $S$  son parámetros de entrada en D-AMPS y definen la velocidad efectiva de recombinación superficial de electrones,  $S_n$ , y huecos,  $S_p$ , en los contactos, en  $x = 0$  y en  $x = L$ . Estas cuatro condiciones de contorno permiten que los valores de los cuasi-niveles de Fermi varíen libremente a los efectos de ajustarse a las densidades de corriente de electrones,  $J_n$ , y la de huecos,  $J_p$ , que circulan por los contactos. En otras palabras, las concentraciones de los portadores libres en condiciones de no equilibrio se ajustan a la corriente entrante o saliente que recibe o entrega el dispositivo, de acuerdo a las concentraciones existentes en equilibrio y a los coeficientes de proporcionalidad  $S$  ingresados. Notar que bajo condiciones de equilibrio termodinámico las densidades de corriente neta en los contactos son iguales a cero. En las simulaciones se asumen bandas planas en los contactos para evitar que el valor de la corriente no esté limitado por los mismos.



## 2.3 Modelos de recombinación y funciones de ocupación para estados DB

### 2.3.1 Teoría de Shockley-Read-Hall

La teoría de recombinación en los semiconductores a través de un estado discreto simple (trampa) fue desarrollada por Hall [44,45] y por Shockley y Read [46]. El formalismo de Shockley-Read-Hall (SRH) propone que la recombinación ocurre a través de un cuatro procesos básicos: (1) captura de un electrón desde la banda de conducción, (2) emisión de un electrón hacia la banda de conducción, (3) captura de un hueco desde de la banda de valencia, (4) emisión de un hueco hacia la banda de valencia. Este modelo supone estados desacoplados, es decir, los estados pueden ser o bien aceptores o donores (no ambos simultáneamente) y admiten hasta un solo electrón. En la Figura 2.3 se esquematizan los distintos procesos.

Las tasas, o frecuencias de los procesos que intervienen en la recombinación están dados por:

Estados donores:

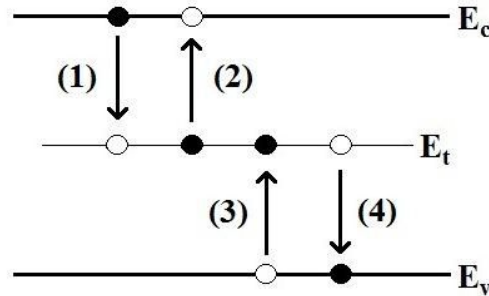
- (1) Captura de un electrón:  $r_1 = nv_{th}\sigma_n^+g_d(1-f_d)$ .
- (2) Emisión de un electrón:  $r_2 = e_n^0g_df_d$ .
- (3) Captura de un hueco:  $r_3 = pv_{th}\sigma_p^0g_df_d$ .
- (4) Emisión de un hueco:  $r_4 = e_p^+g_d(1-f_d)$ .

Estados aceptores:

- (1) Captura de un electrón:  $r_1 = nv_{th}\sigma_n^0g_a(1-f_a)$ .
- (2) Emisión de un electrón:  $r_2 = e_n^-g_af_a$ .
- (3) Captura de un hueco:  $r_3 = pv_{th}\sigma_p^-g_af_a$ .
- (4) Emisión de un hueco:  $r_4 = e_p^0g_a(1-f_a)$ .

donde  $v_{th}$  es la velocidad térmica,  $\sigma_n$  y  $\sigma_p$  las secciones eficaces de captura de electrones y huecos,  $g_d$  y  $g_a$  son la densidades de estados donores y aceptores, respectivamente,  $f$  es la probabilidad de que una trampa esté ocupada por un electrón,  $(1-f)$  es la probabilidad de que una trampa esté ocupada por un hueco (los subíndices  $a$  y  $d$  corresponden a las trampas aceptoras y donoras respectivamente), y  $e_n$  y  $e_p$  son los coeficiente de emisión de electrones y huecos, respectivamente. Las cantidades  $g_d, g_a, f, e_n$  y  $e_p$  son función de la energía  $E_t$  y deben especificarse

a la energía de la trampa. Los superíndices +, 0 y - indican el estado de carga de las trampas antes de atrapar un portador libre (en el caso de las secciones eficaces) o antes de emitir uno (en el caso de los coeficientes de emisión).



**Figura 2.3:** Representación esquemática de los procesos involucrados en el modelo de recombinación de SRH para un estado discreto simple (trampa) de energía  $E_t$ .

En condiciones de equilibrio termodinámico no existe recombinación neta en el material, por lo tanto los procesos inversos de captura y emisión deben ser iguales entre sí por el principio de balance detallado; es decir  $r_1 = r_2$  y  $r_3 = r_4$ . Reemplazando en estas igualdades las tasas de ocurrencia de los procesos, se pueden encontrar las expresiones para los coeficientes de emisión de electrones y de huecos. Utilizando la distribución de Fermi, que define la función de ocupación de electrones en equilibrio para una energía  $E_t$ ,  $f(E_t)$ , y las expresiones para las concentraciones de portadores libres  $n$  y  $p$  expuestas en las Ecuaciones (2.9), se obtienen los coeficientes de emisión de electrones y huecos:

$$e_n(E_t) = v_{th} \sigma_n N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{kT}\right), \quad (2.27-a)$$

$$e_p(E_t) = v_{th} \sigma_p N_v \exp\left(\frac{E_v - E_t}{kT}\right). \quad (2.27-b)$$

Las Ecuaciones (2.27) están expresadas en forma genéricas, sin especificar el estado de carga de las trampas, para que las mismas sean válidas tanto para estados donores como aceptores. Los coeficientes de emisión y las secciones eficaces deberían llevar el superíndice +, 0 o - que indican el estado de carga de las trampas cuando se desea especificar que se trata de estados donores o aceptores. Las Ecuaciones (2.27) indican que la probabilidad de emisión de portadores libres a las bandas disminuye exponencialmente con la profundidad de la trampa.

En condiciones de no equilibrio, pero habiendo alcanzado un estado estacionario, como en el proceso de recombinación intervienen un solo electrón y un solo hueco, la tasa neta de electrones que dejan la banda de conducción ( $r_1 - r_2$ ) es igual a la tasa neta de huecos que dejan la

banda de valencia ( $r_3$ - $r_4$ ). Por lo tanto la tasa de recombinación en un escenario de no equilibrio estacionario puede expresarse como:

$$R = \frac{dn}{dt} = \frac{dp}{dt} = r_1 - r_2 = r_3 - r_4 . \quad (2.28)$$

Reemplazando las frecuencias de los procesos (1-4) en la ecuación anterior, se pueden despejar las expresiones para las funciones de ocupación de electrones y huecos respectivamente, como:

$$f_n = \frac{nv_{th}\sigma_n + e_p}{nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p + e_n + e_p} , \quad (2.29-a)$$

$$f_p = 1 - f_n = \frac{pv_{th}\sigma_p + e_n}{nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p + e_n + e_p} . \quad (2.29-b)$$

La expresión genérica de  $f_n$  se convierte en la función de ocupación de electrones para estados donores o aceptores,  $f_d$  o  $f_a$  respectivamente, utilizando los superíndices correspondientes para las emisiones y las secciones eficaces. Las ecuaciones (2.29) que representan las probabilidades de ocupación de los estados localizados en el gap en un escenario de no equilibrio y estado estacionario se conocen como las funciones de ocupación del formalismo SRH para estados desacoplados. Las mismas son diferentes a las distribuciones de Fermi-Dirac válidas sólo en condiciones de equilibrio termodinámico.

La eficiencia de recombinación,  $\eta_R$ , que expresa la tasa de recombinación por trampa, es decir  $\eta_R(E_t) = R(E_t)/g(E_t)$ , puede obtenerse a partir de la Ecuación (2.28) en forma genérica (sin diferenciar estados donores y aceptores) reemplazando las velocidades de los procesos (1-4) y dividiendo  $R$  por la densidad de estados desacoplados, obteniéndose:

$$\eta_R = v_{th}^2 \sigma_n \sigma_p \frac{np - n_i^2}{nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p + e_n + e_p} , \quad (2.30)$$

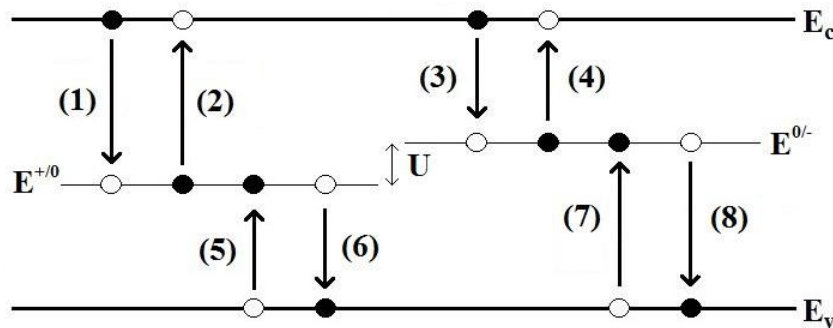
donde  $n_i$  es la concentración intrínseca de portadores libres del material.

Para el cálculo total de la tasa de recombinación total a través de todos los estados presentes en el gap se deben sumar las contribuciones de los estados donores y aceptores e integrar con respecto a la energía desde el borde de banda de valencia hasta el borde de banda de conducción. Utilizando la notación  $\eta_R^d$  y  $\eta_R^a$  para la eficiencia de recombinación en los estados donores y aceptores respectivamente, la tasa de recombinación puede expresarse como:

$$R = \int_{E_v}^{E_c} [g_d(E_t)\eta_R^d(E_t) + g_a(E_t)\eta_R^a(E_t)] dE_t . \quad (2.31)$$

### 2.3.2 Teoría de estados anfotéricos

Los estados asociados a los DBs presentan carácter anfotérico, es decir se pueden comportar tanto como donores o aceptores y pueden aceptar hasta dos electrones. Presentan tres estados de carga: positivo, neutro y negativo cuando están ocupados por 0, 1 o 2 electrones respectivamente. La teoría de estados multivalentes fue desarrollada por Sah y Shockley [47]. En la Figura 2.4 se esquematizan los procesos de emisión y captura para un estado anfotérico que se describe con dos niveles de transición:  $E^{+/0}$ , para transiciones entre estados desocupados y el estados simplemente ocupados, y  $E^{0/-}$  para transiciones entre estados simplemente ocupados y estados doblemente ocupados.



**Figura 2.4:** Representación esquemática de los procesos de captura y emisión para trampas anfotéricas.

Las tasas o frecuencia de los procesos presentados en la Figura 2.4 son:

- |     |  |                                      |
|-----|--|--------------------------------------|
| (1) | Captura de un electrón por estado desocupado:          | $r_1 = nv_{th}\sigma_n^+g_{DB}F^+$ . |
| (2) | Emisión de un electrón por estado simplemente ocupado: | $r_2 = e_n^0g_{DB}F^0$ .             |
| (3) | Captura de un electrón por estado simplemente ocupado: | $r_3 = nv_{th}\sigma_n^0g_{DB}F^0$ . |
| (4) | Emisión de un electrón por estado doblemente ocupado:  | $r_4 = e_n^-g_{DB}F^-$ .             |
| (5) | Captura de un hueco por estado simplemente ocupado:    | $r_5 = pv_{th}\sigma_p^0g_{DB}F^0$ . |
| (6) | Emisión de un hueco por estado desocupado:             | $r_6 = e_p^+g_{DB}F^+$ .             |
| (7) | Captura de un hueco por estado doblemente ocupado:     | $r_7 = pv_{th}\sigma_p^-g_{DB}F^-$ . |
| (8) | Emisión de un hueco por estado simplemente ocupado:    | $r_8 = e_p^0g_{DB}F^0$ .             |

En condiciones de equilibrio termodinámico las funciones de ocupación correspondientes a los tres estados de carga posible,  $F_{eq^-}$ ,  $F_{eq^0}$  y  $F_{eq^+}$ , cumplen la condición de que

la sumatoria es igual a uno y sus expresiones que han sido derivadas en numerosos trabajos [48,49] están dadas por:

$$F_{eq}^+(E_t) = \frac{1}{1 + 2\exp\left(\frac{E^{+/0} - E_f}{kT}\right) + \exp\left(\frac{E^{+/0} + E^{0/-} - 2E_f}{kT}\right)} = \frac{1}{1 + 2\exp\left(\frac{E_t - E_f}{kT}\right) + \exp\left(\frac{2E_t + U - 2E_f}{kT}\right)}, \quad (2.32-a)$$

$$F_{eq}^0(E_t) = \frac{2\exp\left(\frac{E_f - E^{+/0}}{kT}\right)}{1 + 2\exp\left(\frac{E^{+/0} - E_f}{kT}\right) + \exp\left(\frac{E^{+/0} + E^{0/-} - 2E_f}{kT}\right)} = \frac{2\exp\left(\frac{E_f - E_t}{kT}\right)}{1 + 2\exp\left(\frac{E_t - E_f}{kT}\right) + \exp\left(\frac{2E_t + U - 2E_f}{kT}\right)}, \quad (2.32-b)$$

$$F_{eq}^-(E_t) = \frac{\exp\left(\frac{2E_f - E^{+/0} - E^{0/-}}{kT}\right)}{1 + 2\exp\left(\frac{E^{+/0} - E_f}{kT}\right) + \exp\left(\frac{E^{+/0} + E^{0/-} - 2E_f}{kT}\right)} = \frac{\exp\left(\frac{2E_f - 2E_t - U}{kT}\right)}{1 + 2\exp\left(\frac{E_t - E_f}{kT}\right) + \exp\left(\frac{2E_t + U - 2E_f}{kT}\right)}, \quad (2.32-c)$$

donde se tuvo en cuenta que los dos niveles de energía del estado anfotérico corresponden a  $E^{+/0} = E_t$  y  $E^{0/-} = E_t + U$ , siendo  $U$  la denominada energía de correlación necesaria para colocar el segundo electrón en el DB. De manera análoga a lo deducido en estados desacoplados se pueden determinar los coeficientes de emisión igualando las tasas de captura y emisión en condiciones de equilibrio termodinámico, obteniendo:

$$e_n^0 = v_{th} \sigma_n^+ n_{eq} \frac{F_{eq}^+}{F_{eq}^0} = \frac{1}{2} v_{th} \sigma_n^+ N_c \exp\left(\frac{E^{+/0} - E_c}{kT}\right), \quad (2.33-a)$$

$$e_n^- = v_{th} \sigma_n^0 n_{eq} \frac{F_{eq}^0}{F_{eq}^-} = 2v_{th} \sigma_n^0 N_c \exp\left(\frac{E^{0/-} - E_c}{kT}\right), \quad (2.33-b)$$

$$e_p^+ = v_{th} \sigma_p^0 p_{eq} \frac{F_{eq}^0}{F_{eq}^+} = 2v_{th} \sigma_p^0 N_v \exp\left(\frac{E_v - E^{+/0}}{kT}\right), \quad (2.33-c)$$

$$e_p^0 = v_{th} \sigma_p^- p_{eq} \frac{F_{eq}^-}{F_{eq}^0} = \frac{1}{2} v_{th} \sigma_p^- N_v \exp\left(\frac{E_v - E^{0/-}}{kT}\right). \quad (2.33-d)$$

Para obtener estas expresiones se utilizaron las expresiones de las densidades de portadores libres dadas en las Ecuaciones (2.9).

En condiciones de no equilibrio y estado estacionario, existe una tasa neta de recombinación o generación, por lo que las igualdades (2.33) dejan de ser válidas. Las funciones de ocupación de las trampas fuera del equilibrio,  $F^-$ ,  $F^0$  y  $F^+$ , pueden obtenerse igualando a cero las derivadas temporales de  $F^-$  y  $F^+$ , en combinación con la condición de que la suma de las probabilidades de ocupación  $F^-$ ,  $F^0$  y  $F^+$ , tiene que ser igual a la unidad. Las derivadas de las funciones  $F^-$  y  $F^+$ , pueden expresarse como la suma de los procesos de captura y emisión (1) a (8)

(ver Figura 2.4) que contribuyan a aumentar o disminuir la ocupación por huecos o por electrones según:

$$\frac{dF^+}{dt} = -r_1 + r_2 + r_5 - r_6 = -nv_{th}\sigma_n^+ F^+ + e_n^0 F^0 + pv_{th}\sigma_p^0 F^0 - e_p^+ F^+ = 0, \quad (2.34-a)$$

$$\frac{dF^-}{dt} = r_3 - r_4 - r_7 + r_8 = nv_{th}\sigma_n^0 F^0 - e_n^- F^- - pv_{th}\sigma_p^- F^- + e_p^0 F^0 = 0, \quad (2.34-b)$$

$$F^+ + F^0 + F^- = 1. \quad (2.34-c)$$

En las expresiones anteriores la densidad de estados  $g_{DB}$  no figura porque es factor común en todos los términos. Las derivadas temporales de las funciones  $F$  y  $F^t$ , deben ser nulas en estado estacionario. Operando se obtiene:

$$F^+ = \frac{p^0 p^-}{N^+ p^- + p^0 p^- + N^+ N^0}, \quad (2.35-a)$$

$$F^0 = \frac{N^+ p^-}{N^+ p^- + p^0 p^- + N^+ N^0}, \quad (2.35-b)$$

$$F^- = \frac{N^+ N^0}{N^+ p^- + p^0 p^- + N^+ N^0}, \quad (2.35-c)$$

donde

$$N^+ = nv_{th}\sigma_n^+ + e_p^+,$$

$$N^0 = nv_{th}\sigma_n^0 + e_p^0,$$

$$P^- = pv_{th}\sigma_p^- + e_n^-,$$

$$P^0 = pv_{th}\sigma_p^0 + e_n^0.$$

Para calcular la eficiencia de recombinación,  $\eta_R$ , en estados anfotéricos se plantea nuevamente la diferencia entre el ritmo de captura y el ritmo de emisión de electrones (huecos) desde y hacia la banda de conducción (valencia), respectivamente. En este caso se definieron para cada trampa dos ritmos de captura,  $r_1$  y  $r_3$  ( $r_5$  y  $r_7$ ) y dos de emisión  $r_2$  y  $r_4$  ( $r_6$  y  $r_8$ ), correspondientes a los dos niveles de energía de posible transición. La eficiencia de recombinación para estados anfotéricos puede expresarse como:

$$\eta_R^{anf} = r_1 + r_3 - r_2 - r_4 = r_5 + r_7 - r_6 - r_8 \quad (2.36)$$

Conociendo las expresiones para la función de ocupación y los coeficientes de emisión, se obtiene:

$$\eta_R^{anf} = v_{th}^2 (np - n_i^2) \frac{\sigma_n^+ \sigma_p^0 P^- + \sigma_n^0 \sigma_p^- N^+}{N^+ p^- + p^0 p^- + N^+ N^0} \quad (2.37)$$

Por último, la recombinación  $R$  para estados anfotéricos se obtiene según:

$$R = \int_{E_v}^{E_c} g_{DB}(E_t) \eta_R^{anf}(E_t) dE_t \quad (2.38)$$

## 2.4 Curvas características de dispositivos p-i-n de a-Si:H y $\mu$ c-Si:H

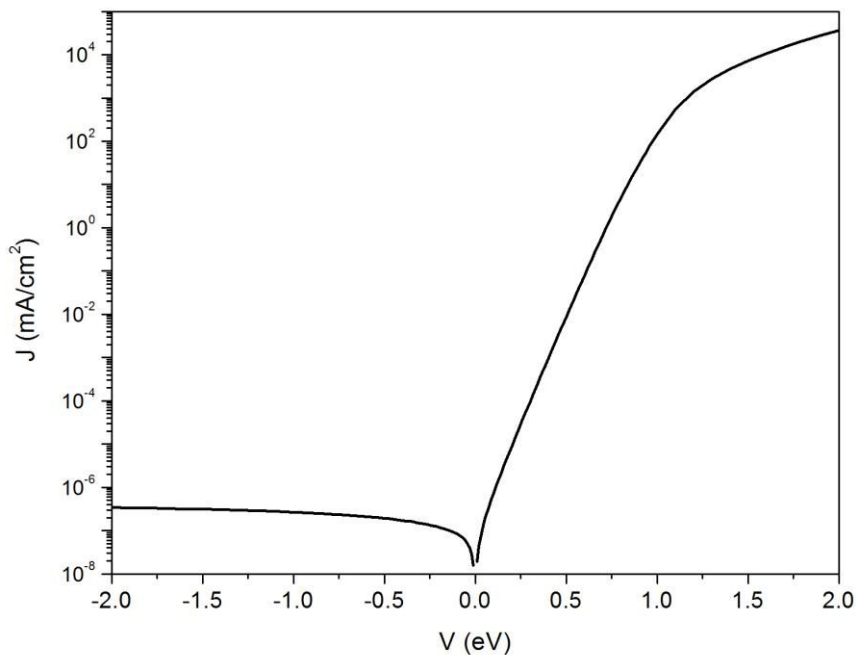
Entre las curvas características fundamentales de dispositivos opto-electrónicos como foto-transistores, celdas solares y detectores ópticos se encuentra la curva corriente-tensión (I-V), que corresponde a la corriente de salida que arroja el dispositivo en función del voltaje externo aplicado. Cuanto mayor sea el área del dispositivo mayor será la corriente. Para definir la característica I-V como independiente del área del dispositivo se utiliza el concepto de densidad de corriente,  $J$ , que es la intensidad de corriente  $I$  por unidad de área  $A$ , es decir, se analiza la curva J-V en lugar de la I-V. Las curvas J-V se miden tanto en condiciones de oscuridad como bajo iluminación. La respuesta espectral (SR) es otra curva característica importante que se utiliza para caracterizar algunos dispositivos opto-electrónicos. La curva SR es la relación entre la corriente eléctrica generada y el flujo de fotones correspondiente a la luz incidente monocromática de longitud de onda variable, o sea, como su nombre lo indica, cuantifica la respuesta del dispositivo a distintas zonas del espectro, ya sea UV, visible o IR. A continuación se hará una descripción general de las curvas características mencionadas.

### 2.4.1 Curva corriente-tensión a oscuras

Como se discutió en la Sección 2.2.2, en el transporte de portadores intervienen dos corrientes que usualmente tienen sentido opuesto: la corriente drift (producto de la presencia de un campo eléctrico) y la corriente por difusión (producto de la presencia de un gradiente de concentraciones). Bajo condiciones de equilibrio termodinámico, es decir, sin la aplicación de un campo eléctrico externo y sin presencia de luz, la corriente neta a través del dispositivo es cero, lo que implica que ambas corrientes se compensan.

En una juntura p-i-n en condiciones de oscuridad y sometida a una tensión directa el transporte de portadores se da a partir de cinco mecanismos que actúan en forma simultánea: la inyección de huecos desde el contacto frontal, la inyección de electrones desde el contacto posterior, el movimiento de huecos a través del dispositivo, el movimiento de los electrones a través del dispositivo y la recombinación entre electrones y huecos [50]. Estos mecanismos actúan en serie y por lo general uno de ellos es el que limita la corriente. En las curvas de J-V a oscuras para tensiones de polarización directa, se pueden diferenciar dos regiones con distinto

comportamiento: una región para tensiones bajas ( $V < 0,9$  V para a-Si:H y  $V < 0,6$  V para  $\mu\text{c-Si:H}$ , aproximadamente), donde la densidad de corriente  $J$  tiene una relación exponencial creciente con la tensión aplicada  $V$ , y la otra para tensiones altas ( $V > 1,1$  V para a-Si:H y  $V > 0,7$  V para  $\mu\text{c-Si:H}$ , aproximadamente), en la cual  $J$  crece más lentamente cuando aumenta  $V$ , con una región de transición (ver Figura 2.5).



**Figura 2.5:** Típica curva J-V bajo condiciones de oscuridad de un dispositivo p-i-n de a-Si:H.

En el primer caso el movimiento de los electrones y huecos desde los contactos hacia el seno del dispositivo se da por difusión, ya que la tensión aplicada reduce el valor del campo eléctrico interno efectivo. En las capas dopadas y en los contactos hay una concentración mayor de portadores que en el seno de la capa intrínseca, existiendo un gradiente de concentración para huecos y otro para electrones. Para tensiones directas bajas la corriente está limitada por el proceso de recombinación de pares e-h en la capa intrínseca [19,51]. Para tensiones directas altas, por encima de la condición de bandas planas, el campo interno se invierte y la corriente de difusión y la corriente drift tienen el mismo signo. En estas condiciones el mecanismo que regula el transporte de cargas en dispositivos p-i-n de a-Si:H es la corriente de electrones limitada por una barrera de potencial que se forma cerca de la interfaz i/n producto del atrapamiento de electrones y huecos en los estados del gap [19]. Esta barrera se conoce con el nombre de cátodo virtual y el régimen de corriente asociado a este fenómeno se denomina corriente limitada por carga espacial o SCLC (space charge limited current) [19,52]. Cerca de la interfaz p/i se produce un fenómeno similar, pero de menor intensidad que da lugar a la formación de un ánodo virtual.



En dispositivos p-i-n de  $\mu\text{-Si:H}$  la corriente está limitada por la resistencia serie de la capa intrínseca. En esta sección se asume que los contactos de los dispositivos p-i-n han sido optimizados de forma tal que no limiten la corriente inyectada, o sea que no presentan una barrera que pueda limitar el ingreso de huecos a través del contacto frontal y de electrones a través del contacto posterior.

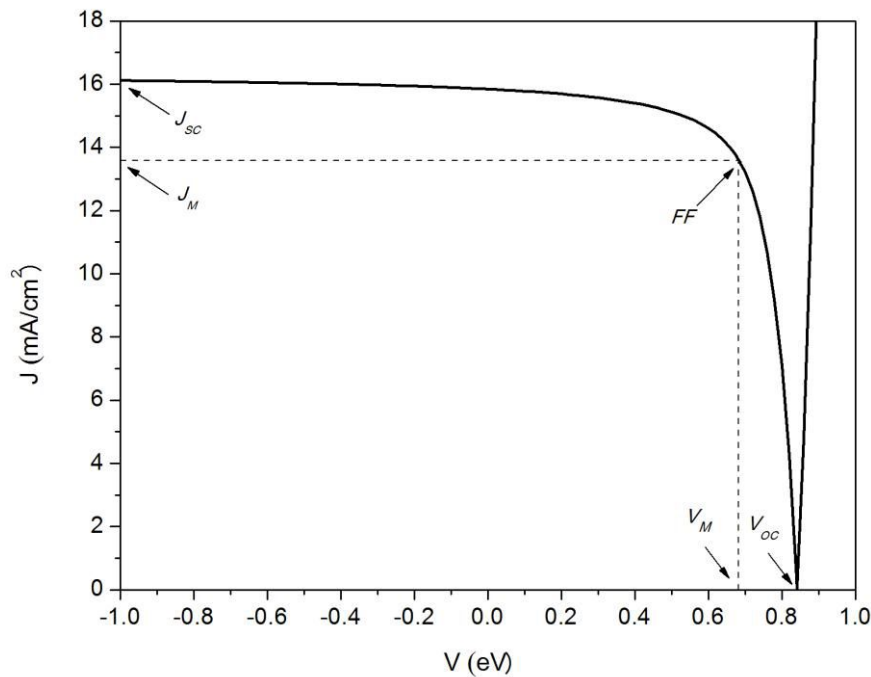
Bajo condiciones de oscuridad, pero para tensiones inversas, los mecanismos de transporte son también cinco, similares a los descritos para tensiones directas bajas, pero cambian de sentido. El proceso de recombinación se convierte en generación térmica de pares e-h que tienen lugar mayormente dentro de la capa intrínseca, los electrones se desplazan desde el seno de la capa intrínseca hacia el contacto posterior, los huecos se desplazan desde el seno de la capa intrínseca hacia el contacto frontal y, finalmente, el proceso se completa con la eyección de electrones y huecos a través de los contactos posterior y frontal, respectivamente. La corriente inversa se genera a partir de la creación de pares e-h producto de la excitación térmica desde los estados localizados del gap. La re-inyección de portadores que ya salieron del dispositivo desde los contactos hacia el interior de la juntura p-i-n se ve bloqueada por la alta barrera de potencial con la que se encuentran tanto los electrones para introducirse al dispositivo por el contacto frontal (ver  $\phi_{B0}$  Figura 2.2), como la que encuentran los huecos para inyectarse por el contacto posterior (ver  $E_G - \phi_{BL}$  en Figura 2.2). Por esta razón, el proceso que limita la corriente para tensiones inversas es el de generación térmica.

#### 2.4.2 Curva corriente-tensión bajo condiciones de iluminación

La curva J-V bajo condiciones de iluminación define en gran medida la performance de un dispositivo opto-electrónico. En particular, en el caso de las celdas solares sus características se cuantifican por tres parámetros: la densidad de corriente de corto circuito ( $J_{sc}$ ), que se define como la densidad de corriente cuando la tensión externa aplicada es cero, el voltaje de circuito abierto ( $V_{oc}$ ) que es el valor de tensión para el cual la corriente es igual a cero, y el factor de llenado o *fill factor* ( $FF$ ), que se define como:

$$FF = \frac{J_{MP} V_{MP}}{J_{sc} V_{oc}}, \quad (2.39)$$

donde  $J_{MP}$  y  $V_{MP}$  son la densidad de corriente y el voltaje en el punto donde la celda solar entrega la máxima potencia, respectivamente. El  $FF$  define en qué proporción la curva se aleja del rectángulo de lados  $J_{sc}$  y  $V_{oc}$ , cuyo producto sería la máxima potencia que en el límite entregaría la celda solar. En la Figura 2.6 se ilustra un ejemplo de la curva J-V de una juntura p-i-n bajo iluminación y se indican los parámetros mencionados.



**Figura 2.6:** Típica curva J-V bajo iluminación AM1.5 de un dispositivo p-i-n de a-Si:H. Los valores de la densidad de corriente  $J$  se grafican en valor absoluto. Se muestran los parámetros característicos  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$  y  $FF$  de la curva J-V mencionados.

La densidad de corriente de corto circuito se puede evaluar como la integral con respecto a la longitud de onda  $\lambda$ , del producto entre el flujo de fotones incidentes sobre el dispositivo para una determinada longitud de onda  $\Phi^0(\lambda)$  y la eficiencia cuántica para esa longitud de onda  $\eta(\lambda)$ :

$$J_{sc} = e \int_0^{\infty} \eta(\lambda) \Phi^0(\lambda) d\lambda. \quad (2.40)$$

La relación entre el  $V_{oc}$  y las propiedades de los compuestos de la juntura no ha sido establecida aún totalmente, aunque existe una fuerte correlación entre  $V_{oc}$  y el valor del gap de la capa intrínseca, la temperatura y otros parámetros [31]. Algo similar ocurre con el factor de llenado ( $FF$ ). Si bien no se puede establecer la relación exacta de  $FF$  con las características de los materiales, se conoce que la densidad de estados presente en el gap de la capa intrínseca influye significativamente en este valor. Se pueden encontrar también numerosas contribuciones que dan cuenta de una mejora significativa en el valor del  $FF$  al introducir una capa buffer en la interfaz p/i [53,54,55].

Para tensiones directas por debajo del  $V_{oc}$  la corriente en un dispositivo p-i-n de a-Si:H iluminado viene dada por la diferencia entre la foto-corriente generada por los pares e-h que se forman a partir de la incidencia de la luz en la juntura, las pérdidas por recombinación tanto en las capas dopadas como en la capa intrínseca y las corrientes de difusión de electrones y huecos

en los contactos frontal y posterior, respectivamente. Sin embargo, en las junturas p-i-n utilizadas en conversión fotovoltaica o en detección, el gap de la capa p es mayor al de la capa intrínseca, lo que hace que la pérdida por difusión de electrones en el contacto frontal sea pequeña debido a la barrera de potencial que tienen que atravesar los electrones de la capa i para poder ingresar a la capa p. Las pérdidas por difusión de huecos en el contacto posterior son despreciables. Es decir, el  $V_{oc}$  está limitado por las pérdidas por recombinación que tienen lugar en las capas de la celda solar, especialmente en la intrínseca. Para tensiones por encima del  $V_{oc}$  la limitación de la corriente está relacionada también con el mecanismo SCLC. En este caso, debido a que los portadores libres no se inyectan por los contactos como en condiciones de oscuridad sino que son foto-generados en todo el dispositivo (aunque de manera no homogénea), el cátodo y el ánodo virtual presentan una altura de barrera menor porque tanto los electrones como los huecos pueden alcanzar sin dificultad las interfaces p/i e i/n.

### 2.4.3 Respuesta espectral

La respuesta espectral (SR) de un dispositivo se define como el cociente:

$$SR(\lambda) = \frac{J(\lambda)}{e\Phi(\lambda)}, \quad (2.41)$$

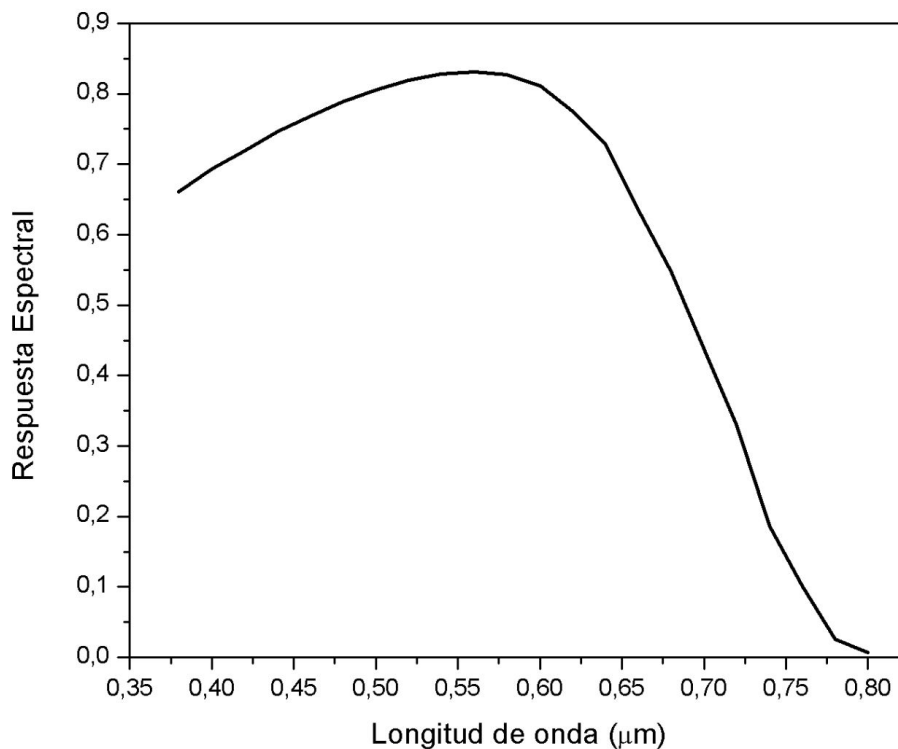
donde  $J$  es la densidad de corriente colectada y generada por un flujo de luz monocromática  $\phi(\lambda)$  que incide sobre el dispositivo. La respuesta espectral,  $SR(\lambda)$ , se obtiene midiendo la corriente  $J(\lambda_i)$  y el flujo  $\Phi(\lambda_i)$ , y haciendo el respectivo cociente para diferentes longitudes de onda  $\lambda$ . La separación  $\Delta \lambda = \lambda_i - \lambda_{i-1}$  entre las longitudes de onda sucesivas define la resolución de la medición realizada para cuantificar la  $SR(\lambda)$ .

Experimentalmente la SR se determina haciendo incidir un haz de luz monocromática, que se denomina haz de prueba, sobre el dispositivo correspondiente y midiendo la corriente eléctrica con un amplificador. La intensidad o flujo  $\Phi(\lambda)$  del haz monocromático se mide con un sensor calibrado para las longitudes de onda de interés. En general el haz de luz monocromático se hace pasar por un "chopper" óptico, a los efectos de producir una luz pulsante o alterna, y la corriente se mide con un amplificador "lock-in" a la frecuencia del "chopper". Esta técnica se conoce como  $SR_{AC}$  mientras que en la  $SR_{DC}$  las mediciones se hacen sobre una señal continua sin emplear un "chopper" óptico. Sin embargo, la técnica  $SR_{AC}$  permite obtener una mejor relación señal/ruido, siendo aconsejable su uso. Como gran ventaja adicional esta técnica posibilita medir SR tanto sin luz auxiliar de polarización (condiciones de oscuridad) como con una luz continua auxiliar que polariza ópticamente el dispositivo (condiciones de iluminación), permitiendo medir SR en condiciones similares a las de su funcionamiento real. La medición de  $SR_{DC}$  es también posible cuando hay una luz auxiliar, pero deben restarse las corrientes obtenidas con y sin luz

monocromática para poder obtener el numerador de la Ecuación (2.41). En particular, en el caso de celdas solares puede utilizarse como luz auxiliar una fuente AM1.5. En el caso de  $SR_{AC}$ , el “lock-in” no detecta la luz continua ya que está sintonizado a la frecuencia del “chopper” que debe atravesar la luz monocromática.

En un dispositivo p-i-n, como los analizadas en la presente tesis, dentro del espectro de interés que va desde unos 350 nm hasta 800 nm en a-Si:H y hasta 1000 nm en  $\mu\text{-Si:H}$ , la luz incidente con longitud de onda más corta o pequeña (luz azul) es absorbida mayormente en la capa p y en la región de capa intrínseca cercana a la interface p/i. Para estas longitudes de onda, la SR está limitada por las pérdidas por recombinación que se dan en la capa p y por la difusión de electrones hacia el contactos frontal. La luz con longitud de ondas correspondiente a luz verde, es absorbida casi en su totalidad en la capa intrínseca, aunque de manera no uniforme, produciéndose una absorción preferencial en la zona más cercana a la interfaz p/i. En este caso las pérdidas provienen de la recombinación que tiene lugar en la capa intrínseca y en menor medida en la capa p, aunque para estas longitudes de onda los valores de la SR son relativamente altos (ver Figura 2.7). Para longitudes de onda correspondiente a la luz roja, la absorción es más uniforme en toda la capa i, y en mucho menor medida en las capas dopadas. La SR en este caso, está limitada por la recombinación en la capa i, en la capa n y por la capacidad de absorción del material. Aumentando el espesor de la capa intrínseca aumenta también la absorción de fotones para este rango de longitudes de onda, pero al mismo tiempo se introduce una disminución en el campo eléctrico interno del dispositivo que provoca a su vez un aumento de la recombinación de pares e-h. Para maximizar la SR se debe buscar una solución de compromiso entre estos dos factores.

Siendo la SR la relación entre la corriente eléctrica generada y el flujo de fotones correspondiente a la luz incidente, no resulta intuitivo pensar a priori en la posibilidad de obtener SR mayores a uno, ya que la corriente medida es generada por el haz monocromático de prueba y cada fotón genera un par e-h (se desprecia la posible generación de más de un par e-h para longitudes de ondas cortas porque es despreciable en a-Si:H y  $\mu\text{-Si:H}$ ). Sin embargo,  $SR > 1$  son posibles cuando se realizan las mediciones en determinadas condiciones específicas que corresponden al uso una fuente de luz auxiliar con un acotado rango de longitudes de onda. Este fenómeno fue denominado como efecto photogating por el Dr. Fonash y se produce en dispositivos que contienen materiales desordenados como el a-Si:H y el  $\mu\text{-Si:H}$ , es decir, en materiales con defectos apreciables en el gap. Cuando la luz auxiliar es azul, las SR mayores a uno se pueden observar en la zona del espectro correspondiente al color rojo y al IR. El efecto opuesto, conocido como efecto photogating complementario, se produce cuando se utiliza luz auxiliar roja, pudiéndose observar SR mayores a uno en la zona azul del espectro.



**Figura 2.7:** Respuesta espectral típica de un dispositivo p-i-n de a-Si:H en condiciones de cortocircuito y bajo condiciones de iluminación AM1.5.

Cuando el dispositivo es iluminado con una luz auxiliar la SR puede evaluarse reescribiendo la Ecuación (2.41) como:

$$SR(\lambda) = \frac{J_{BL+ML}(\lambda) - J_{BL}(\lambda)}{e\Phi_{ML}(\lambda)}, \quad (2.42)$$

donde  $J_{BL+ML}(\lambda)$  es la densidad de corriente generada en forma conjunta por la fracción correspondiente a la longitud de onda,  $\lambda$ , de la luz de polarización o auxiliar que identificaremos con los siglas "BL" (Bias Light) y el haz de prueba monocromático que identificaremos con los siglas "ML" (Monochromatic Light),  $J_{BL}(\lambda)$  es la densidad de corriente generada sólo por la fracción correspondiente a la longitud de onda  $\lambda$  de luz auxiliar y  $\Phi_{ML}(\lambda)$  es el flujo de fotones del haz de prueba correspondiente a la longitud de onda  $\lambda$ .

El efecto photogating es posible si las pérdidas por recombinación que tienen lugar en el dispositivo cuando ambas luces (BL y ML) inciden en forma conjunta son menores a las que existen cuando sólo incide la luz auxiliar BL. En el Capítulo 6 se describe con más detalle el efecto photogating y se hace un estudio de las condiciones necesarias para observar el efecto photogating complementario en estructuras p-i-n de  $\mu\text{-Si:H}$  y nano-c-Si:H.



## Capítulo 3

# Modelado de curvas características de dispositivos opto-electrónicos utilizando la aproximación de Simmons-Taylor

La performance de los dispositivos opto-electrónicos de a-Si:H y  $\mu\text{-Si:H}$  es altamente dependiente de la densidad de estados presente en el gap. El campo eléctrico que separa los portadores libres foto-generados en la capa intrínseca de estructuras Schottky o p-i-n, en un dispositivo que está siendo iluminado, es alterado por la presencia de la fuente luminosa que modifica la ocupación de las trampas y por lo tanto la carga atrapada. Esto se debe a que estos materiales presentan una densidad de estados cuasi-continua en el gap. La alteración del campo eléctrico impacta directamente en la tasa de recombinación, la cual repercute a su vez en la densidad final de carga atrapada. Estos procesos que se retroalimentan entre sí dejan de manifiesto que es esencial una evaluación precisa de la densidad de carga atrapada, la tasa de recombinación y el campo eléctrico dentro de los dispositivos, en pos de alcanzar un modelo que reproduzca de la mejor manera posible su comportamiento real.

En semiconductores desordenados la evaluación de la densidad de carga atrapada y la recombinación requiere de una operación de integración sobre todos los estados del gap localizados entre los bordes de banda, según se mostró en el capítulo anterior. La función a integrar es el producto de la densidad de estados con la carga electrónica y la función de ocupación para obtener la densidad de carga, y con la eficiencia de recombinación para obtener la tasa de recombinación. El cálculo puede realizarse por medio del formalismo de Shockley-Read-Hall (SRH) que utiliza el concepto de trampa simple y que fue descrito en la Sección 2.3.1 (ver Ecuaciones (2.27) a (2.31)). Simmons y Taylor derivaron una aproximación [56] al formalismo de SRH que simplifica considerablemente las ecuaciones para el cálculo de la carga atrapada y de la tasa de recombinación, permitiendo una interpretación más sencilla e intuitiva

de la física del transporte de cargas. Incluso en la aproximación conocida como “0 K” el formalismo de SRH se puede convertir en ocasiones en un modelo de resolución analítica.

En la primera parte de este capítulo se presentará la derivación de las aproximaciones de Simmons y Taylor (AST) y Simmons Taylor 0 K (AST0K), junto a un recuento de los trabajos que se han realizado en torno a la validez de estas aproximaciones. Como punto central del capítulo se analizarán los errores en que se incurre cuando se utilizan estas aproximaciones en el cálculo de las curvas características de dispositivos opto-electrónicos. Incorporando en nuestro código numérico D-AMPS las expresiones publicadas por Simmons-Taylor se evaluará el error cometido por las aproximaciones tomando como casos de referencia los resultados obtenidos con el formalismo SRH. Estas comparaciones se realizarán para distintos escenarios y condiciones de funcionamiento de los dispositivos, como así también para distintos valores de algunos parámetros eléctricos claves.

## 3.1 Aproximaciones de Simmons-Taylor

### 3.1.1 Aproximación Simmons-Taylor - AST

Simmons y Taylor derivaron una aproximación del formalismo de SRH que ha sido ampliamente utilizada para la interpretación de resultados obtenidos en física de materiales cristalinos y de sus dispositivos asociados. Tanto el formalismo de SRH como la aproximación AST pueden fácilmente generalizarse para dispositivos de semiconductores desordenados donde existe una distribución continua de estados dentro del gap, como en los dispositivos de a-Si:H y de  $\mu\text{c-Si:H}$ . La aproximación se basa en que, dada la dependencia exponencial de los coeficientes de emisión de electrones y huecos con respecto a la energía de la trampa, existe un rango amplio de energías dentro del gap donde un coeficiente de emisión es mucho mayor que el otro pudiéndose desprejarse uno de ellos en el cálculo de la función de ocupación de las trampas. Así se simplifican significativamente los cálculos de la tasa de recombinación y la densidad de carga atrapada.

Los autores definen el parámetro  $R$  como la relación entre las secciones eficaces de captura de electrones y de huecos:  $R = \sigma_n(E) / \sigma_p(E)$  y presentan el concepto de “especies de trampa” como el conjunto de trampas que tienen el mismo valor de  $R$ . La deducción de la aproximación se desarrolla suponiendo la existencia de una sola “especie” de trampa. Sin embargo, es posible generalizar fácilmente la aproximación para sistemas que contienen varias especies de trampas, cada una caracterizada con un valor de  $R$  diferente pero constante, o sea, independiente de la energía. Simplemente se debe tratar cada especie individualmente y sumar



todas las contribuciones para obtener la tasa de recombinación y la densidad de carga atrapada total.

En las Ecuaciones (2.27) del capítulo anterior se definieron los coeficientes de emisión para electrones y huecos en su forma genérica, sin especificar el estado de carga de las trampas, para que las mismas sean válidas tanto para estados donores como aceptores. Estas expresiones, funciones de la energía de las trampas  $E_t$ , se repiten aquí para facilitar la lectura:

$$e_n(E_t) = v_{th} \sigma_n N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{kT}\right), \quad (3.1-a)$$

$$e_p(E_t) = v_{th} \sigma_p N_v \exp\left(\frac{E_v - E_t}{kT}\right). \quad (3.1-b)$$

En las Ecuaciones (3.1),  $e_n$  y  $e_p$  son los coeficiente de emisión de electrones y huecos, respectivamente, expresados en unidades de tiempo recíprocos,  $v_{th}$  es la velocidad térmica de los portadores,  $\sigma_n$  y  $\sigma_p$  la sección eficaz de captura de electrones y huecos, respectivamente, y  $N_c$  y  $N_v$  las densidades efectivas de estados extendidos.

La energía de la trampa o estado se mide con respecto al borde de banda de valencia  $E_v$ , o bien con respecto a una energía de referencia que se ubica por debajo de  $E_v$ . El sentido positivo o creciente de la energía se adopta desde  $E_v$  hacia  $E_c$ .

En la siguiente derivación tampoco se especifican las cargas de las secciones eficaces ni las de los coeficientes de emisión para que las ecuaciones sean válidas tanto para estados donores como aceptores. Como puede deducirse en las Ecuaciones (3.1) la probabilidad o coeficiente de emisión de electrones (huecos) es máxima en el borde de banda de conducción (valencia) y decrecen exponencialmente a medida que la trampa se aleja de ese borde de banda. Existe un nivel de energía cercano al medio del gap, que se denomina nivel de trampa intrínseco,  $E_{T0}$ , en el cual los coeficientes de emisión de electrones y huecos resultan iguales, es decir,  $e_n = e_p$ . Los coeficientes de emisión de electrones y huecos y el nivel  $E_{T0}$  se grafican en la Figura 3.1. A partir de las Ecuaciones (3.1) puede deducirse para el nivel  $E_{T0}$  la siguiente expresión:

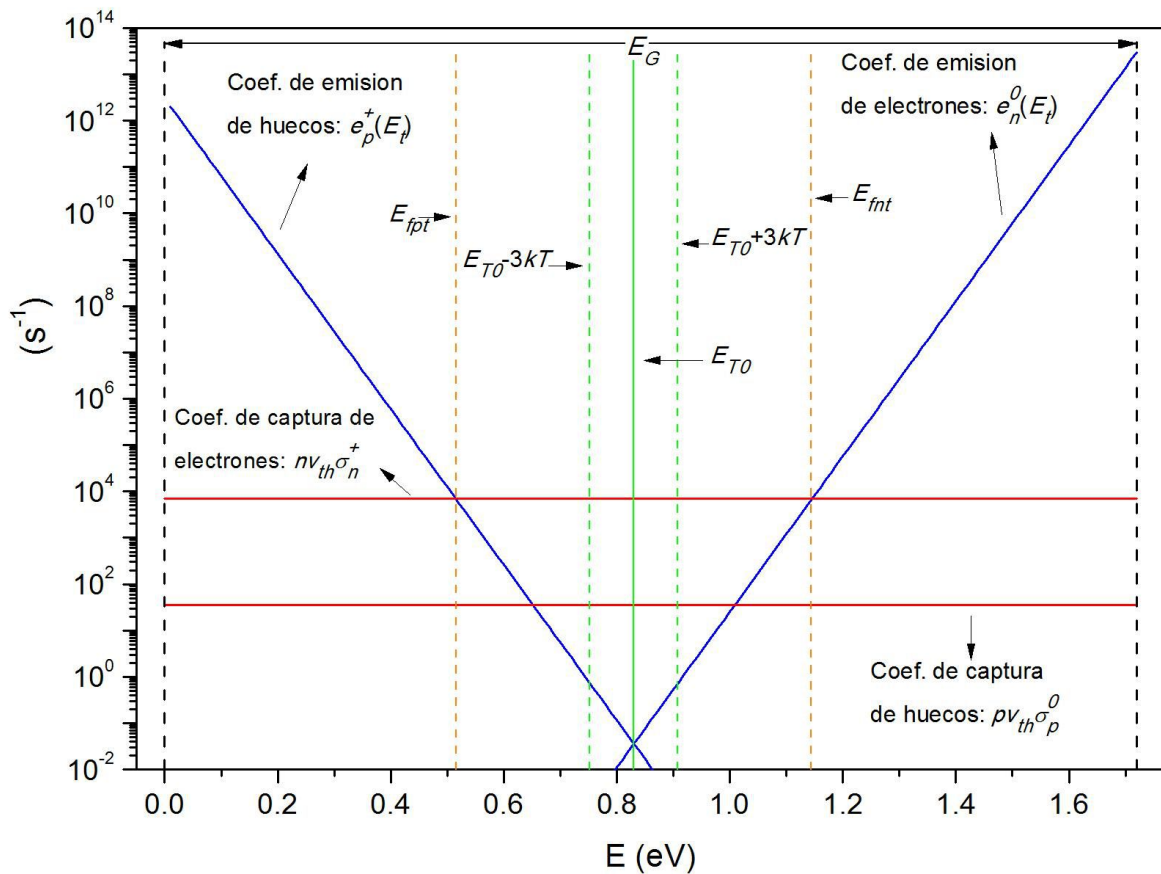
$$E_{T0} = \frac{E_v + E_c}{2} - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{\sigma_n N_c}{\sigma_p N_v}\right). \quad (3.2)$$

El nivel  $E_{T0}$  está ubicado cerca del nivel de Fermi intrínseco (donde se cumple  $n_{eq} = p_{eq}$ ), y la separación entre ellos está determinada por la relación entre las secciones eficaces de captura. En el formalismo de SRH las expresiones para las funciones de ocupación de electrones y huecos respectivamente fueron derivadas en las Ecuaciones (2.29) del capítulo anterior y se reiteran a continuación por cuestiones de claridad:

$$f_n(E_t) = \frac{nv_{th}\sigma_n + e_p(E_t)}{nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p + e_n(E_t) + e_p(E_t)} \quad (3.3-a)$$

$$1 - f_n(E_t) = \frac{pv_{th}\sigma_p + e_n}{nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p + e_n(E_t) + e_p(E_t)} \quad (3.3-b)$$

Para energías  $E_t$  por encima (debajo) de algunos  $kT$  del nivel  $E_{T0}$ , el coeficiente de emisión de huecos (electrones) es mucho menor que el coeficiente de emisión de electrones (huecos) y que los términos correspondientes a los coeficientes o las probabilidades de captura en la Ecuación (3.3-a) (Ecuación (3.3-b)), y por lo tanto puede despreciarse. Esto se puede observar gráficamente en la Figura 3.1, donde se muestran los términos de las Ecuaciones (3.3), para trampas donoras, es decir, los coeficientes de emisión y captura tanto para electrones como para huecos dentro de la capa intrínseca de una juntura p-i-n de a-Si:H. Las curvas fueron calculadas a partir de los ajustes presentados en la siguiente Sección.



**Figura 3.1:** Coeficientes de emisión y captura de electrones y huecos en función de la energía obtenidos con D-AMPS según el formalismo de SRH en el centro de la capa intrínseca una juntura p-i-n bajo condiciones de oscuridad y tensión aplicada  $V = 0,5$  eV.

De esta manera las funciones de ocupación pueden aproximarse como:

$$f_n(E_t) = \frac{nv_{th}\sigma_n}{nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p + e_n(E_t)}, \quad (3.3-a)$$

$$f_p(E_t) = 1 - f_n(E_t) = \frac{pv_{th}\sigma_p}{nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p + e_p(E_t)}. \quad (3.3-b)$$

Reordenando los términos en las Ecuaciones (3.3) se puede obtener:

$$f_n(E_t) = \frac{n\sigma_n}{n\sigma_n + p\sigma_p} \left[ 1 + \frac{e_n(E_t)}{nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p} \right]^{-1}, \quad (3.4-a)$$

$$f_p(E_t) = 1 - f_n(E_t) = \frac{p\sigma_p}{n\sigma_n + p\sigma_p} \left[ 1 + \frac{e_p(E_t)}{nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p} \right]^{-1}, \quad (3.4-b)$$

donde los términos entre corchetes tienen la forma de la función de Fermi-Dirac (como resultará evidente en las Ecuaciones (3.6)) ya que los coeficientes de emisiones  $e_n$  y  $e_p$  dependen exponencialmente de los niveles de energía de las trampas  $E_t$  (ver Ecuaciones (3.1)).

Igualando el numerador y el denominador de la fracción que se encuentra dentro de los corchetes en la Ecuación (3.4-a), es decir haciendo  $e_n(E_t) = nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p$ , se obtiene el valor de energía para el cual la probabilidad de emisión de un electrón es igual a la suma de las probabilidades de captura de un electrón y de un hueco, y su posterior recombinación. Este nivel de energía se conoce con el nombre de “cuasi-nivel de Fermi para electrones atrapados”,  $E_{fnt}$ , y corresponde a la energía en la cual la función de ocupación de SRH tiene su punto de inflexión, es decir, donde vale la mitad entre los valores que presenta cerca de la banda de conducción y alrededor del medio del gap. Análogamente, utilizando la Ecuación (3.4-b) y teniendo en cuenta la expresión  $e_p(E_t) = nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p$ , se obtiene el valor de energía conocido como “cuasi-nivel de Fermi para huecos atrapados”,  $E_{fpt}$ , que corresponde a la energía de la trampa para la cual las probabilidades de emisión de hueco es igual a la suma de las probabilidades de captura de un electrón y de un hueco, y su posterior recombinación. Este otro nivel de energía corresponde al punto en el cual la función de ocupación de SRH presenta su otro punto de inflexión, es decir donde vale la mitad entre los valores que presenta cerca de la banda de valencia y alrededor del medio del gap. En la Figura 3.1 se muestran los niveles  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ . (Notar que el coeficiente de captura de huecos es unas 200 veces menor que el de electrones, por eso en la Figura 3.1  $nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p \approx nv_{th}\sigma_n$ ). Como puede observarse en la Figura 3.1 para tensiones directas y bajo condiciones de oscuridad se cumple que  $E_{fnt} > E_{fpt}$ , como sucede con los cuasi-niveles de Fermi,  $E_{fn}$  y  $E_{fp}$ , de los portadores libres. El mismo escenario se presenta bajo condiciones de iluminación para tensiones directas y para tensiones inversas siempre que el nivel de

iluminación no sea muy bajo en este último caso (ver Sección 3.3.1 y Figura 3.7). Los cuasi-niveles de Fermi para portadores atrapados, están asociados a las energías donde se producen los cambios más significativos en la tasa de recombinación y de la densidad de carga atrapada. Teniendo en cuenta las expresiones (3.1) y las relaciones  $e_n(E_t) = nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p$  y  $e_p(E_t) = nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p$ , se pueden despejar las siguientes expresiones para  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ :

$$E_{fnt} = E_c + kT \ln \left( \frac{n\sigma_n + p\sigma_p}{N_c\sigma_n} \right), \quad (3.5-a)$$

$$E_{fpt} = E_v - kT \ln \left( \frac{n\sigma_n + p\sigma_p}{N_v\sigma_p} \right). \quad (3.5-b)$$

Sustituyendo las Ecuaciones (3.5) y (3.1) en las Ecuaciones (3.4), las funciones de ocupación para electrones y huecos según la Aproximación de Simmons-Taylor resultan:

$$f_n(E_t) = \frac{n\sigma_n}{n\sigma_n + p\sigma_p} \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_t - E_{fnt}}{kT} \right) \right]^{-1} \quad E_t > E_{T0}, \quad (3.6-a)$$

$$f_p(E_t) = 1 - f_n(E_t) = \frac{p\sigma_p}{n\sigma_n + p\sigma_p} \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_{fpt} - E_t}{kT} \right) \right]^{-1} \quad E_t < E_{T0}, \quad (3.6-b)$$

donde pueden apreciarse claramente las expresiones de la funciones de Fermi-Dirac ya mencionadas, afectadas por dos diferentes factores de escala. Las funciones de Fermi-Dirac de no equilibrio, donde el nivel de Fermi fue reemplazado por los cuasi-niveles de Fermi de los portadores atrapados, análogamente a la de función de Fermi-Dirac de equilibrio, valen  $\frac{1}{2}$  para el nivel de energía correspondiente a los cuasi-niveles de Fermi. En la Figura 3.2 se grafica la función de ocupación de electrones en función de la energía  $E_t$  evaluada con D-AMPS y resultante de la Ecuación (3.6-a) correspondiente a estados de defectos aceptores localizados en el medio de la capa intrínseca de 600 nm de espesor de una juntura p-i-n de a-Si:H bajo condiciones de oscuridad y con una tensión directa aplicada de 0,5 V. También se grafica la ocupación de electrones en función de la energía que arroja el formalismo SRH, los cuasi-niveles de Fermi para portadores atrapados,  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ , y el nivel  $E_{T0}$  para estas condiciones. La curva del formalismo SRH permanece siempre superpuesta con la curva de la AST (la diferencia entre ambos valores aparecen recién en la quinta cifra significativa) evidenciando la precisión que muestra la aproximación bajo estas condiciones de operación.

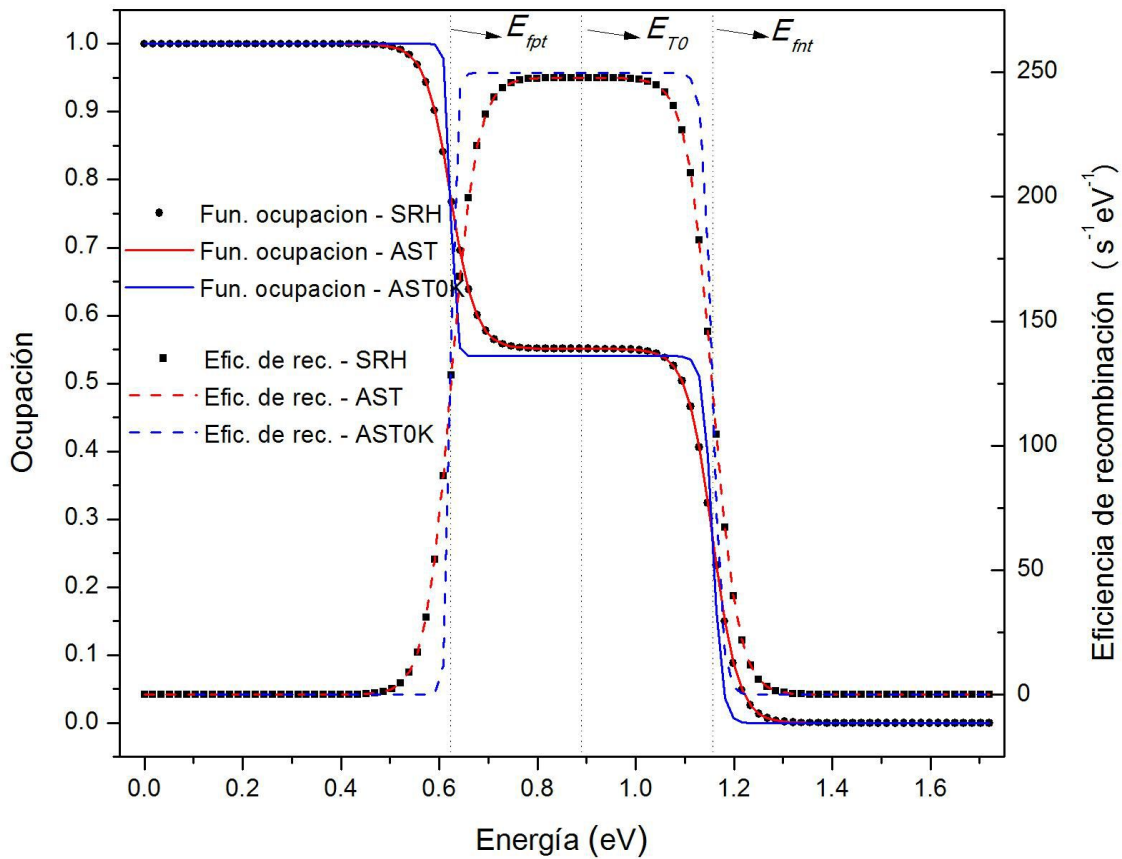
Las funciones de ocupación  $f_n(E_t)$  o  $1-f_n(E_t)$  de las Ecuaciones (3.6), correspondientes a la AST en condiciones de no equilibrio y en estado estacionario, son funciones escalonadas y muestran transiciones suaves alrededor de los cuasi-nivel de Fermi para portadores atrapados. En el caso de la función de ocupación de electrones (huecos), los valores de la función cambian

de 1 (0) al pre factor de la Ecuación (3.6-a) (Ecuación (3.6-b)) en el torno al nivel de energía  $E_{fpt}$ , y desde ese pre factor a 0 (1) en el entorno del nivel  $E_{fnt}$ , manteniéndose constante entre estos dos niveles.

A partir de esta nueva expresión de las funciones de ocupación la eficiencia de recombinación  $\eta_R$  definida en el capítulo anterior (ver Ecuaciones 2.30), puede expresarse como:

$$\eta_R(E_t) = v_{th} \frac{\sigma_p \sigma_n np}{n\sigma_n + p\sigma_p} \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_t - E_{fnt}}{kT}\right) \right]^{-1} E_t > E_{T0}, \quad (3.7-a)$$

$$\eta_R(E_t) = v_{th} \frac{\sigma_p \sigma_n np}{n\sigma_n + p\sigma_p} \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_{fpt} - E_t}{kT}\right) \right]^{-1} E_t < E_{T0}. \quad (3.7-b)$$



**Figura 3.2:** Dependencia de la función de ocupación de electrones y de la tasa de recombinación con respecto a la energía para trampas aceptoras obtenidas con D-AMPS para el formalismo de SRH y las aproximaciones de Simmons-Taylor (AST) y de Simmons-Taylor 0 K (AST0K) en el centro de la capa intrínseca una juntura p-i-n bajo condiciones de oscuridad y una tensión aplicada  $V = 0,5$  eV. Las curvas fueron calculadas a partir de los ajustes presentados en la siguiente Sección.

De las Ecuaciones 3.7 se puede concluir que las trampas ubicadas entre los cuasi niveles de Fermi para portadores atrapados son las que contribuyen efectivamente a la recombinación, y que la eficiencia de recombinación entre esos niveles es aproximadamente constante. En la Figura 3.2 se grafica la eficiencia de recombinación  $\eta_R(E_t)$  para las trampas aceptoras en función de la energía calculadas con D-AMPS utilizando el formalismo de SRH y las aproximaciones AST y ASTOK. Nuevamente la superposición de las curvas de SRH y AST demuestra la exactitud de la aproximación para estas condiciones. Las secciones eficaces y las densidades de portadores corresponden a los valores resultantes de los ajustes de las curvas J-V de las estructuras p-i-n de a-Si:H que se mostraran en la Sección 3.2.

### 3.1.2 Aproximación Simmons-Taylor 0K – ASTOK

En la aproximación 0 K de Simmons-Taylor se realiza una significativa simplificación adicional: la función de ocupación de electrones  $f_n$  se adopta igual a 0 para energías  $E_t > E_{fnt}$ , igual a 1 para energías  $E_t < E_{fpt}$ , e igual al pre-factor de la ecuación (3.6-a) para energías  $E_{fpt} < E_t < E_{fnt}$ . De manera análoga la función de ocupación de huecos  $1 - f_n$ , se adopta igual a 1 para energías  $E_t > E_{fnt}$ , igual a 0 para energías  $E_t < E_{fpt}$  e igual al pre-factor de la ecuación (3.6-b) para energías  $E_{fpt} < E_t < E_{fnt}$ . La eficiencia de recombinación se adopta 0 por fuera de los cuasi-niveles de Fermi de portadores atrapados e igual al pre-factor de las Ecuaciones (3.7) entre los cuasi-niveles de Fermi de portadores atrapados. De esta manera ambas funciones de ocupación  $f_n$ ,  $1-f_n$  y la eficiencia de recombinación  $\eta_R$  muestran una transición abrupta en los cuasi niveles de Fermi para portadores atrapados convirtiéndose en funciones de doble escalón:

$$f(E_t) = \begin{cases} 1 & \text{para } E_v < E_t < E_{fpt} \\ \frac{n\sigma_n}{n\sigma_n + p\sigma_p} & \text{para } E_{fpt} < E_t < E_{fnt} \\ 0 & \text{para } E_{fnt} < E_t < E_c \end{cases}, \quad (3.8)$$

$$\eta_R(E_t) = \begin{cases} 0 & \text{para } E_v < E_t < E_{fpt} \\ v_{th} \frac{np\sigma_n\sigma_p}{n\sigma_n + p\sigma_p} & \text{para } E_{fpt} < E_t < E_{fnt} \\ 0 & \text{para } E_{fnt} < E_t < E_c \end{cases}. \quad (3.9)$$

Así, la tasa de recombinación total resulta:

$$R = \int_{E_v}^{E_c} g_{gap}(E) \eta_R(E) dE = v_{th} \frac{np\sigma_p\sigma_n}{n\sigma_n + p\sigma_p} \int_{E_{fpt}}^{E_{fnt}} g_{gap}(E) dE. \quad (3.10)$$

De esta manera, se simplifica significativamente la evaluación de la corriente que fluye a través de un dispositivo y los cálculos en general.

Utilizando las Ecuaciones (2.11) definidas en el capítulo anterior, las concentraciones de electrones y huecos atrapados, respectivamente, pueden expresarse con esta aproximación de la siguiente manera:

$$n_t = \int_{E_v}^{E_c} g_a(E) f_a(E) dE = \int_{E_v}^{E_{fpt}} g_a(E) dE + \frac{n\sigma_n}{n\sigma_n + p\sigma_p} \int_{E_{fpt}}^{E_{fnt}} g_a(E) dE, \quad (3.11-a)$$

$$p_t = \int_{E_v}^{E_c} g_d(E) [1 - f_d(E)] dE = \frac{p\sigma_p}{n\sigma_n + p\sigma_p} \int_{E_{fpt}}^{E_{fnt}} g_d(E) dE + \int_{E_{fnt}}^{E_c} g_d(E) dE. \quad (3.11-b)$$

La aproximación 0 K no puede aplicarse en forma directa al código numérico debido a que los saltos abruptos en los valores de  $f$  y  $\eta_R$  provocan problemas de convergencia. Por esta razón, se incluyeron en el código las expresiones matemáticas de filtros “pasa altos” y “pasa bajos” de Butterworth, que se reconocerán en adelante como BPA y BPB respectivamente, utilizados comúnmente en procesamiento de señales e imágenes [57]. Los mismos presentan la siguiente dependencia:

$$BPB(E_t) = \frac{1}{1 + (E_t/E_{ref})^{2n}}, \quad (3.12-a)$$

$$BPA(E_t) = \frac{1}{1 + (E_{ref}/E_t)^{2n}}, \quad (3.12-b)$$

donde  $E_{ref}$  es la energía alrededor de la cual se realiza la transición (los cuasi-niveles de portadores atrapados en nuestro caso) de 1 a 0 (0 a 1) para energías crecientes en la primera (segunda) ecuación correspondiente al filtro pasa bajo (alto). Notar que los filtros Butterworth están normalizados a la unidad. Se multiplica la función de ocupación (Ecuación (3.8)) y la eficiencia de recombinación (Ecuación (3.9)) por el producto  $BPB(E_i) \times BPA(E_i)$ . De esta manera el producto entre ambos filtros provoca, debido a la acción del filtro pasa bajo (alto), una atenuación gradual a la derecha (izquierda) de  $E_{ref}$  del valor que la función tiene a la izquierda (derecha) de  $E_{ref}$ . Así, se logra una transición no abrupta entre los valores que las funciones de ocupación y la eficiencia de recombinación tienen a ambos lados de  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ .

El parámetro  $n$ , que en D-AMPS es escogido por el usuario, define la magnitud con que se “relaja” el salto de escalón. Teniendo en cuenta que este parámetro no tiene relación con la física del formalismo AST0K, para la implementación de esta aproximación, se probaron distintos valores sucesivamente crecientes de  $n$  hasta lograr que los resultados se volvieran independientes o insensibles al valor de ese parámetro. En la Figura 3.2 se grafican la función de ocupación de electrones y la recombinación en función de la energía aplicando la aproximación Simon-Taylor 0K con los filtros de Butterworth mencionados. Se puede apreciar que los saltos en torno a los cuasi niveles de Fermi para cargas atrapadas no son enteramente abruptos, pero

las pendientes de la función de ocupación y tasa de recombinación se aproximan a una vertical. En la Figura 3.2 se adopto un valor de  $n=40$ .

### 3.1.3 Antecedentes y motivación

Hack y Shur [58] modificaron ligeramente la expresión (3.7) y (3.9) de AST y AST0K para extender su validez a situaciones cercanas al equilibrio termodinámico (es decir para tensiones muy bajas cercanas a cero y bajo condiciones de oscuridad) reemplazando el producto  $np$  por  $np-n_i^2$ . Una dificultad que traería aparejada la AST y AST0K sin esta modificación sería la sobreestimación de la generación térmica de pares e-h cuando la concentración de electrones y huecos libres es mucho menor que la concentración intrínseca de portadores libres [59].

En relación a la AST0K, Hack y Shur afirman que cuando se aplica esta aproximación la subestimación de los portadores atrapados en los estados de las colas de banda es despreciable cuando las pendientes de las colas son mayores a  $kT$ . Por su parte, tanto Gray [10] como Block [60] acuerdan en que para valores de pendientes de colas cercanos a  $kT$  (no solo mayores), esta aproximación no es adecuada ya que subestima considerablemente la carga atrapada. Willemen [25], realiza un análisis cuantitativo de este error y concluye que cuando las pendientes de las colas son iguales a  $2kT$  la subestimación en la carga atrapada y en la tasa de recombinación que arroja la AST0K es aproximadamente de un factor de 2, y que para pendientes menores a  $2kT$  el error crece rápidamente.

Las conclusiones mencionadas se basan en estudios realizados sobre materiales para los cuales se asume una extensión infinita, o sea se ignoran los efectos de bordes de los contactos. No existe, según nuestro conocimiento, información en la bibliografía sobre la bondad o exactitud de las aproximaciones AST y AST0K cuando son aplicadas directamente a la simulación de dispositivos con técnicas numéricas. Como se expuso anteriormente, al calcular en forma aproximada la densidad de carga atrapada y la tasa de recombinación dentro de un dispositivo, se verán afectadas las concentraciones de portadores libres resultantes. A su vez, esto impactará en los valores finales de la densidad de carga atrapada y de la tasa de recombinación y, por consiguiente, en el campo eléctrico presente en el dispositivo, estableciéndose un efecto de retroalimentación. Este efecto de retroalimentación está presente o activo sólo en el modelado de dispositivos y no en el modelado de materiales. Por lo tanto la única forma de examinar el comportamiento y la aceptabilidad de las aproximaciones AST y AST0K en dispositivos optoelectrónicos es incorporando las mismas en algún código numérico y analizando las predicciones obtenidas en cada situación.



## 3.2 Ajuste de curvas experimentales

Con el objeto de trabajar con parámetros eléctricos y ópticos de materiales que sean realistas se colectaron, en primer término, una serie de datos experimentales medidos con técnicas de caracterización de materiales (ver Capítulo 1). Otros datos se extrajeron de la literatura, y, finalmente, se calibraron los parámetros restantes ajustando curvas corriente-tensión (J-V) de estructuras p-i-n basadas en el a-Si:H con diferentes espesores de capa intrínseca.

Los dispositivos que se escogieron para el ajuste de curvas J-V son dos estructuras p-i-n de a-Si:H que encuentran aplicación como celdas solares y que fueron depositadas en el Department of Photovoltaic Materials and Devices de la Delft University of Technology en Holanda. La estructura de ambos dispositivos es: TCO/p a-Si:H/i a-Si:H/n a-Si:H/Al con una capa buffer entre las capas p e i de 5 nm de espesor de a-SiC:H. Las muestras fueron crecidas en un equipo multi-cámara RF-PECVD (deposición química de vapor asistida por plasma de radiofrecuencia) que contiene cuatro cámaras de procesamiento y un bloqueo de carga que permiten la deposición de capas diferentes en distintas cámaras, para evitar la contaminación de las interfaces. Los gases de proceso utilizados fueron SiH<sub>4</sub> para la capa intrínseca, una mezcla de B<sub>2</sub>H<sub>6</sub> y CH<sub>4</sub> para la capa p y PH<sub>3</sub> para la capa n. Las películas se depositaron a una temperatura de 180 °C, a una presión de 0,6 mbar (capa n) o de 0,7 mbar (capas intrínseca y p) y con una densidad de potencia de radio frecuencia de 25 mW/cm<sup>2</sup>. Las velocidades de deposición fueron 0,2 nm/s para las capas intrínseca y p, y 0,1 nm/s para la capa n. La capa buffer fue depositada con una alta dilución de hidrógeno a una presión de 2,5 mbar y con una densidad de potencia de 40 mW/cm<sup>2</sup>. Los contactos frontales para las dos celdas son un substrato tipo Asahi U-(SnO<sub>2</sub>:F) con superficie rugosa y los contactos posteriores de aluminio tienen 300 nm de ancho en ambos casos. En las dos muestras las capas p y n son de 10 nm y 20 nm de espesor respectivamente, y la capa i posee un ancho de 200 nm en un caso y de 600 nm en el otro.

Los parámetros ópticos se obtuvieron midiendo la reflexión y la transmisión sobre una película delgada de a-Si:H. La densidad de estados total y la cola de Urbach (cola de banda de valencia) se extrajeron utilizando la técnica DBP en muestras co-planares de a-Si:H. La energía de correlación  $U$  se asumió igual a 0,2 eV [28] [29] [61]. En las capas p y n la densidad de dopaje se ajustó en pos de reproducir las energías de activación experimentales. Los demás parámetros eléctricos de entrada se ajustaron para poder reproducir las curvas características J-V medidas experimentalmente. Los parámetros más significativos que resultaron de los ajustes se muestran en la Tabla 3.1.

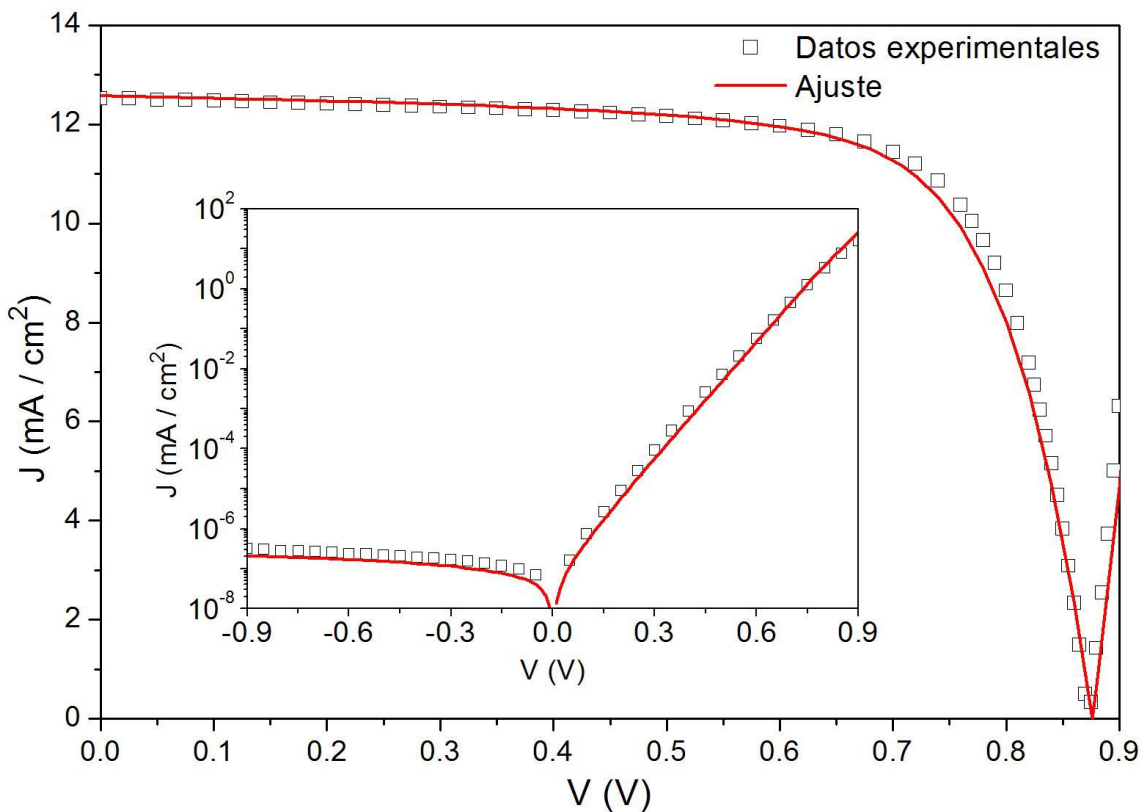
**Tabla 3.1:** Lista de parámetros eléctricos de entrada más relevantes en cada capa del dispositivo, resultantes de los ajustes de las curvas características de junturas p-i-n de a-Si:H. El significado de los símbolos es siguiente:  $W$  es el espesor de la capa,  $E_G$  es el gap de movilidad,  $N_c$  y  $N_v$  son la densidad efectiva de estados en las bandas de conducción y de valencia respectivamente,  $\mu_n$  y  $\mu_p$  son las movilidades de electrones y huecos,  $E_D$  y  $E_A$  son las pendientes de las colas de valencia y de conducción,  $t_n$  y  $t_p$  las sección eficaces de captura de electrones y huecos en las colas,  $D^-$ ,  $D^0$  y  $D^+$  las densidades de estados encerradas en las tres gaussianas,  $E_{PG^-}$ ,  $E_{PG^0}$  y  $E_{PG^+}$  las posiciones(en energía) de los picos de las distribuciones gaussianas,  $\sigma_D$  son las desviaciones estándar de las gaussianas,  $\sigma_n$  and  $\sigma_p$  las secciones eficaces para electrones y huecos en los estados DB. Los superíndices +, 0 and - indican el estado de carga de las trampas.

Parámetro	p	i	N
$W$ (nm)	10	200 / 600	20
$E_G$ (eV)	1,9	1,72	1,72
$N_c, N_v$ (cm <sup>-3</sup> )	3x10 <sup>20</sup>	2,5x10 <sup>20</sup>	3x10 <sup>20</sup>
$\mu_n$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	5	30	5
$\mu_p$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	1	3.5	1
$E_D$ (meV)	80	45	50
$E_A$ (meV)	30	25	30
$t_n^+ t_p^-$ (cm <sup>2</sup> )	1x10 <sup>-15</sup>	1x10 <sup>-15</sup>	1x10 <sup>-15</sup>
$t_n^0 t_p^0$ (cm <sup>2</sup> )	1x10 <sup>-17</sup>	1x10 <sup>-17</sup>	1x10 <sup>-17</sup>
$D^-$ (cm <sup>-3</sup> )	3,04x10 <sup>12</sup>	2x10 <sup>15</sup>	6,78x10 <sup>18</sup>
$D^0$ (cm <sup>-3</sup> )	2x10 <sup>16</sup>	1x10 <sup>15</sup>	1,6x10 <sup>15</sup>
$D^+$ (cm <sup>-3</sup> )	5,25x10 <sup>18</sup>	2x10 <sup>15</sup>	1,51x10 <sup>12</sup>
$E_{PG^-}$ (eV)	0,7	0,55	0,6
$E_{PG^0}$ (eV)	1,0	0,85	0,9
$E_{PG^+}$ (eV)	1,3	1,15	1,2
$\sigma_D$ (eV)	0,13	0,13	0,13
$\sigma_n^+ \sigma_p^-$ (cm <sup>2</sup> )	1x10 <sup>-14</sup>	3x10 <sup>-14</sup> / 1,2x10 <sup>-14</sup>	1x10 <sup>-14</sup>
$\sigma_n^0 \sigma_p^0$ (cm <sup>2</sup> )	2x10 <sup>-16</sup>	3x10 <sup>-15</sup> / 1,2x10 <sup>-15</sup>	2x10 <sup>-16</sup>

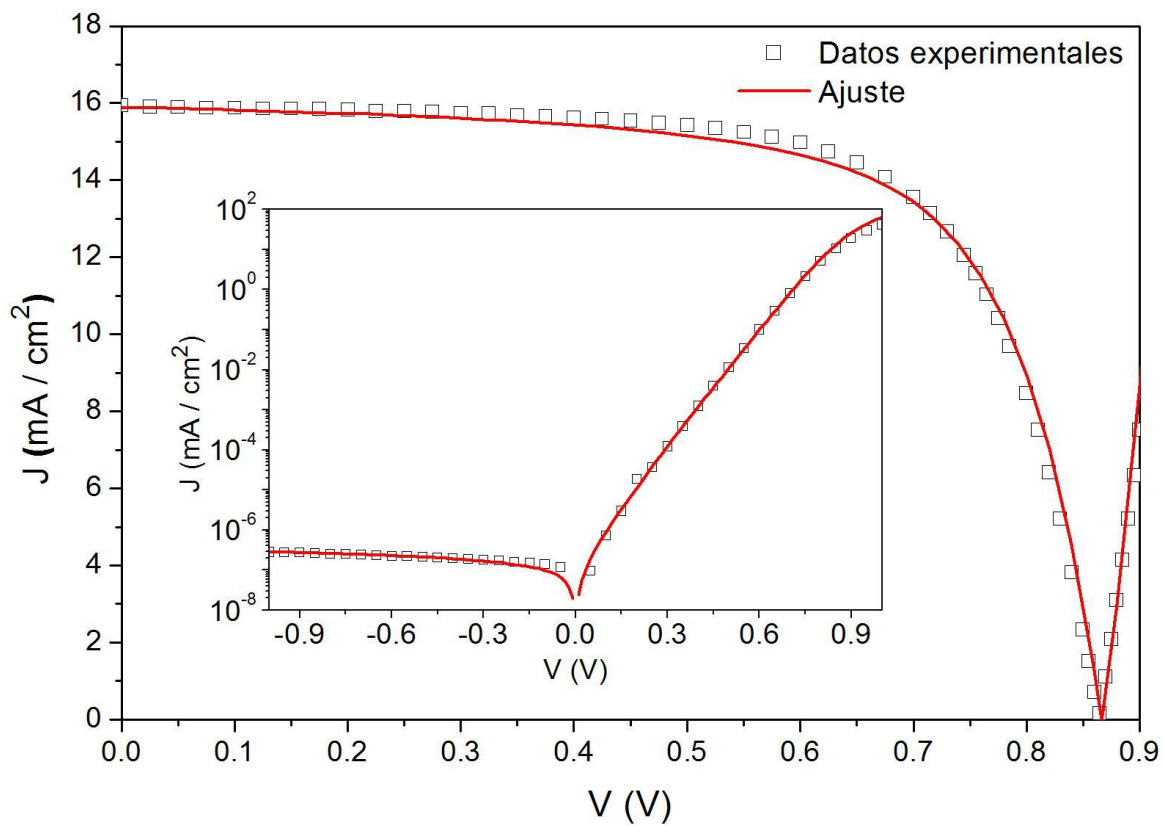
Las Figuras 3.3 y 3.4 muestran el ajuste de las curvas J-V a oscuras y bajo iluminación AM1.5 de las estructuras p-i-n descritas para espesores de capa intrínseca de 200 nm y 600 nm, respectivamente. Las curvas J-V a oscuras fueron medidas a una temperatura de 40 °C. Se utilizó un electrómetro Keithley 6517A para barrer un rango de voltajes entre -2,5 V y 1 V, y una rutina

de computadora para asegurar que la corriente estuviera estabilizada antes de grabar la medición. Las curvas J-V bajo condiciones de iluminación se obtuvieron utilizando un Simulador Solar Oriel, el cual aproxima el espectro AM1.5 con una densidad de potencia integrada de  $100\text{nW}/\text{cm}^2$ . La corriente de salida para distintas tensiones aplicadas sobre la muestra se midió con un analizador "Hewlett Packard 4145B Semiconductor Parameter Analyzer". Las muestras fueron iluminadas por breves períodos de tiempo para evitar el calentamiento de las mismas. De hecho, no se observó ninguna tendencia en las curvas obtenidas que indique un cambio de temperatura en el transcurso de la medición.

Los ajustes se realizaron utilizando el formalismo de SRH y asumiendo que la densidad de es defectos uniforme en todas las capas del dispositivo.



**Figura 3.3:** Ajuste de datos experimentales de las curvas J-V a oscuras y bajo iluminación AM1.5 de una juntura p-i-n de a-Si:H con un espesor de capa intrínseca de 200 nm. Los ajustes se realizaron con el formalismo de SRH asumiendo una densidad de defectos uniforme en cada capa del dispositivo.



**Figura 3.4:** Ajuste de datos experimentales de las curvas J-V a oscuras y bajo iluminación AM1.5 de una juntura p-i-n de a-Si:H con un espesor de capa intrínseca de 600 nm. Los ajustes se realizaron con el formalismo de SRH asumiendo una densidad de defectos uniforme en cada capa del dispositivo.

Para determinar los parámetros eléctricos y ópticos de una juntura de  $\mu$ c-Si:H se utilizó como referencia un estudio similar realizado previamente en el año 2006 sobre estructuras p-i-n de cuatro espesores diferentes de capa intrínseca, en la colaboración con la Universidad de Utrecht, también de Holanda, por Strengers, Rubinelli, Rath y Schropp [62]. Las muestras fueron crecidas con la técnica de HWCVD (Hot Wire Chemical Vapor Deposition) y las principales características de los dispositivos se pueden encontrar en la publicación mencionada. Partiendo de los parámetros utilizados en ese trabajo se logró un mejor ajuste de las curvas experimentales, el cual abarca un rango de tensiones más amplio. Los parámetros más relevantes de los ajustes de curvas J-V y SR para las junturas de  $\mu$ c-Si:H se listan en la Tabla 3.2.

**Tabla 3.2:** Lista de parámetros eléctricos de entrada más relevantes para cada una de las capas del dispositivo que se obtuvieron a partir del ajuste de las curvas características de junturas p-i-n de  $\mu\text{c-Si:H}$ .

Parámetro	p	i	N
$W$ (nm)	25	3000	50
$E_G$ (eV)	1.2	1,25	1,2
$N_c, N_v$ (cm <sup>-3</sup> )	$3 \times 10^{19}$	$3 \times 10^{19}$	$3 \times 10^{19}$
$\mu_N$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	60	60	60
$\mu_P$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	30	30	30
$E_D$ (meV)	35	35	35
$E_A$ (meV)	25	25	25
$t_{N^+}t_{P^-}$ (cm <sup>2</sup> )	$1 \times 10^{-14}$	$1 \times 10^{-14}$	$1 \times 10^{-14}$
$t_{N^0}t_{P^0}$ (cm <sup>2</sup> )	$1 \times 10^{-16}$	$1 \times 10^{-16}$	$1 \times 10^{-16}$
$D^-$ (cm <sup>-3</sup> )	$2 \times 10^{18}$	$1 \times 10^{15}$	$2 \times 10^{18}$
$D^0$ (cm <sup>-3</sup> )	$1 \times 10^{18}$	$5 \times 10^{14}$	$1 \times 10^{18}$
$D^+$ (cm <sup>-3</sup> )	$2 \times 10^{18}$	$1 \times 10^{15}$	$2 \times 10^{18}$
$E_{PG^-}$ (eV)	0,2	0,225	0,2
$E_{PG^0}$ (eV)	0,5	0,525	0,5
$E_{PG^+}$ (eV)	0,8	0,825	0,8
$\sigma_D$ (eV)	0,1	0,1	0,1
$\sigma_{N^+}\sigma_{P^-}$ (cm <sup>2</sup> )	$1 \times 10^{-14}$	$5 \times 10^{-15}$	$5 \times 10^{-14}$
$\sigma_{N^0}\sigma_{P^0}$ (cm <sup>2</sup> )	$1 \times 10^{-15}$	$5 \times 10^{-16}$	$5 \times 10^{-15}$

### 3.3 Resultados de la implementación de las aproximaciones

#### 3.3.1 Aproximación Simmons-Taylor - AST

La AST se desarrolló para dispositivos que operan bajo condiciones de oscuridad y con tensiones directas aplicadas y/o bajo condiciones de iluminación tanto para tensiones directas o inversas aplicadas, situaciones en las cuales el cuasi-nivel de Fermi para electrones atrapados se encuentra ubicado por encima del cuasi-nivel de Fermi para huecos atrapados. Es decir, la AST está diseñada para utilizarse en escenarios donde los procesos de emisión de electrones y huecos presentan una probabilidad o frecuencia de ocurrencia menor a los procesos de captura de los portadores y su posterior recombinación en el rango de energía comprendido entre los

cuasi-niveles de Fermi de portadores atrapados, escenario típico de dispositivos como celdas solares y sensores ópticos en condiciones de funcionamiento normales. A pesar de ello, se testeó la performance de la aproximación también para dispositivos que operan en condiciones de oscuridad o iluminados bajo intensidades de luz muy débiles y sometidos a tensiones inversas con el fin de evaluar también la posible aplicabilidad de la AST para el modelado sensores de ópticos utilizados en la detección de señales muy débiles.

Una vez que los parámetros de D-AMPS fueron calibrados con el formalismo de SRH y asumiendo una densidad de defectos uniforme (UDM) se evaluaron distintos escenarios y configuraciones para testear la performance de la aproximación AST en distintas condiciones de operación del dispositivo. Se analizaron diferentes temperaturas en el rango entre 250 K y 400 K, distintas intensidades de iluminación incidentes y diferentes valores de parámetros eléctricos claves. También se estudiaron junturas p-i-n con diferentes espesores de capa intrínseca, entre 200 nm y 3000 nm, y se modelaron dispositivos con capas intrínsecas de distinto gaps de movilidades con valores entre 1,25 eV (que corresponde al gap del  $\mu\text{-Si:H}$ ) y 1,72 eV (gap del a-Si:H). Además, utilizando los mismos parámetros de los ajustes presentados anteriormente se estudiaron estructuras de inyección simple como p-i-p y n-i-n. Las curvas J-V de los distintos dispositivos bajo las diversas condiciones de funcionamiento fueron evaluadas para el rango de tensiones comprendido entre -1 V y 1 V.

Para poder cuantificar el error que introduce la aplicación de la AST en el cálculo de curvas características J-V de dispositivos, se definió el error relativo  $\varepsilon_{SRH-AST}$ , que viene dado por la diferencia relativa entre los valores de densidad de corriente  $J$  que arrojan la aproximación AST y el formalismo SRH para cada valor de tensión  $V$  aplicada al dispositivo:

$$\varepsilon_{SRH-AST} = 100 \frac{J_{SRH} - J_{AST}}{J_{SRH}}. \quad (3.13)$$

Es importante resaltar que nuestra metodología consiste en cuantificar los errores introducidos por AST y AST0K mediante el cálculo del error relativo que resulta de las desviaciones obtenidas en la evaluación de la densidad de corriente predichas por las aproximaciones con respecto a las densidades de corriente obtenidas con el formalismo SRH que utilizamos como referencia. Las densidades de corriente de la ecuación (3.13) se evalúan con D-AMPS con exactamente los mismos parámetros eléctricos y ópticos cuando se invocan los formalismos AST, AST0K o SRH.

Los estudios realizados en dispositivos p-i-n de a-Si:H arrojaron excelentes resultados: las curvas SR, J-V a oscuras para tensiones directas y J-V bajo iluminación AM1.5 calculadas por los formalismos SRH y AST son muy similares, incluso en escenarios sin luz y a tensiones

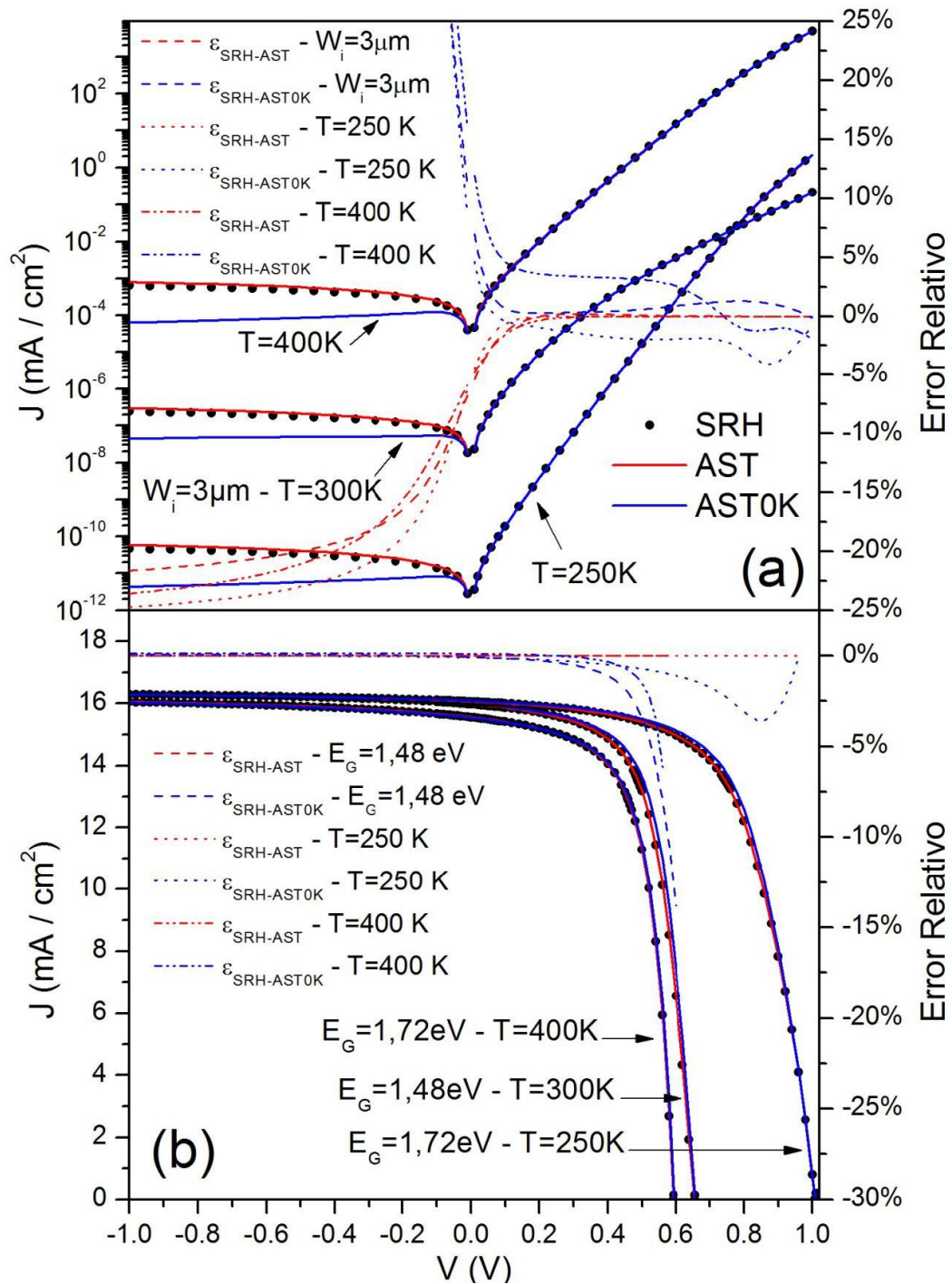
directas bajas cercanas al equilibrio termodinámico, donde se esperaría un comportamiento más errático de la aproximación. En la Figura 3.5 se comparan las curvas J-V de distintas junturas p-i-n calculadas con el formalismo de SRH, la AST y la ASTOK (la ASTOK se analizará en el siguiente apartado). La Figura 3.5(a) muestra las curvas obtenidas a oscuras para dos junturas de a-Si:H con distinto espesor de capa intrínseca: una de 600 nm y otra de 3000 nm. Para el primer caso se muestran las curvas a dos temperaturas distintas, 250 K y 400 K, mientras que para el segundo caso se incluye sólo la curva correspondiente a una temperatura de 300 K. En la Figura 3.5(b) se muestran las curvas J-V bajo iluminación AM1.5 de la juntura de a-Si:H para un espesor de capa intrínseca de 600 nm (también para dos temperaturas: 250 K y 400 K), y la de una estructura p-i-n de a-SiGe:H cuyo gap de movilidad es de 1,45 eV (a temperatura de 300 K). En las Figuras 3.5 se incluyen, además, los errores relativos que se cometen con las aproximaciones para cada valor de tensión  $V$  aplicada.

Para condiciones de oscuridad y tensión directa el error relativo  $\varepsilon_{SRH-AST}$  no superó el 6% en los distintos escenarios y configuraciones propuestos en este trabajo. Como se puede observar en la Figura 3.5(a), el error máximo entre ambos modelos se da para tensiones cercanas a  $V = 0$  V, mientras que para tensiones mayores a 0,2 V los valores de  $\varepsilon_{SRH-AST}$  se tornan totalmente despreciables manteniéndose siempre menores al 0,1%. Este comportamiento se repite en todos los casos analizados, lo cual era de esperarse, ya que la AST fue desarrollada para aproximar la densidad de carga atrapada y la tasa de recombinación cuando los cuasi-niveles de Fermi para los portadores atrapados,  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ , se alejan al menos unos pocos  $kT$  del nivel  $E_{T0}$  (y por lo tanto se acercan a los bordes de bandas correspondientes), ya sea por la generación de pares e-h al iluminar el dispositivo, o por la inyección de portadores a través de los contactos cuando se aplica una tensión directa.

Muy cerca del equilibrio la suposición de despreciar el coeficiente de emisión de electrones con respecto al de huecos o viceversa se vuelve cuestionable. A partir de las Ecuaciones (3.2) y (3.5) se obtiene la siguiente igualdad:

$$\frac{E_{fnt} + E_{fpt}}{2} = \frac{E_c + kT \ln\left(\frac{n\sigma_n + p\sigma_p}{N_c\sigma_n}\right) + E_v - kT \ln\left(\frac{n\sigma_n + p\sigma_p}{N_v\sigma_p}\right)}{2} = \frac{E_c + E_v}{2} - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_c\sigma_n}{N_v\sigma_p}\right) = E_{t0}, \quad (3.14)$$

que establece que los cuasi-niveles de portadores atrapados se ubican simétricamente respecto del nivel  $E_{T0}$ . En condiciones de equilibrio, debido a que las probabilidades de los procesos de emisión deben ser iguales a los de captura en equilibrio (ver derivación de las Ecuaciones (3.5)) las Ecuaciones (3.5) pueden describirse como:



**Figura 3.5:** Curvas J-V obtenidas con D-AMPS para (a) dos junturas p-i-n de a-Si:H con espesores de capa intrínseca de 600 nm y 3000 nm que operan en condiciones de oscuridad, y (b) dos junturas p-i-n, una de a-Si:H (gap de movilidad de 1.72 eV) y otra de a-SiGe:H (gap de movilidad de 1.48 eV) ambas con un espesor de capa intrínseca de 600 nm que operan bajo iluminación AM1.5. Las curvas J-V y los errores relativos se muestran para dos temperaturas 250 K y 400 K en la estructura de a-Si:H y para 300 K en la estructura de a-SiGe:H.



$$E_{fnt} = E_c + kT \ln \left( \frac{n\sigma_n}{N_c\sigma_n} \right) = E_c + kT \ln \left( \frac{n}{N_c} \right), \quad (3.15-a)$$

$$E_{fpt} = E_v - kT \ln \left( \frac{p\sigma_p}{N_v\sigma_p} \right) = E_v - kT \ln \left( \frac{p}{N_v} \right). \quad (3.15-b)$$

Haciendo la diferencia entre las Ecuaciones (3.15-a) y (3.15-b), se obtiene:

$$E_{fnt} - E_{fpt} = E_c - E_v + kT \ln \left( \frac{np}{N_c N_v} \right) = E_G + kT \ln \left( \frac{N_c N_v \exp \left( -\frac{E_G}{kT} \right)}{N_c N_v} \right) = 0. \quad (3.16)$$

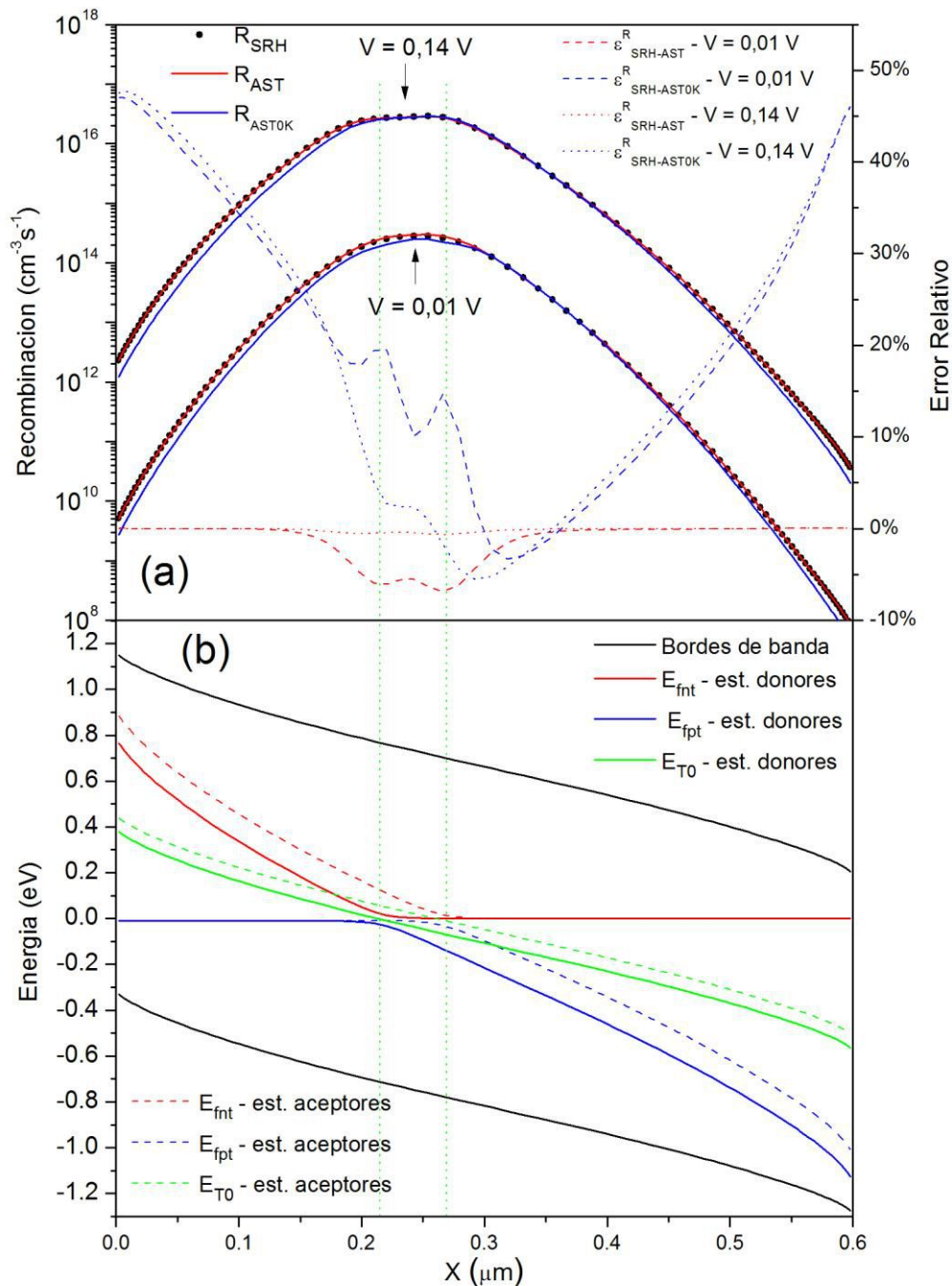
Por lo tanto, cuando nos acercamos al equilibrio los cuasi-niveles de Fermi convergen hacia el nivel  $E_{T0}$ , provocando que las energías en las cuales las curvas  $f_n(E_t)$  y  $f_p(E_t)$  (Ecuaciones (3.4)) tienen sus puntos de inflexión se ubiquen muy cerca de ese nivel. En estas circunstancias, los cálculos para conocer la ocupación de las trampas que se ubican próximas a ese nivel de energía  $E_{T0}$  y la recombinación que se produce a través de estas trampas son ahora sensibles a la suposición de despreciar el coeficiente de emisión de electrones (huecos) por debajo (encima) del nivel  $E_{T0}$ . Además se debe considerar que cerca del equilibrio el error relativo se hace mayor porque los valores de la densidad de corriente disminuyen lo que hace que el error relativo definido según la Ecuación (3.13) se torne aún mayor.

Entre los cinco mecanismos que participan en el transporte de portadores de una juntura p-i-n sometida a tensiones directas bajas y en condiciones de oscuridad: inyección de huecos y de electrones en el contacto frontal y posterior respectivamente, difusión de huecos y de electrones hacia el seno de la capa intrínseca y recombinación de pares e-h, la recombinación es el proceso que limita la densidad de corriente. En la Figura 3.6(a) se comparan los perfiles de la tasa de recombinación  $R(x)$  en función de la posición en la capa intrínseca para dos tensiones directas de valor reducido: 0,01 V y 0,14 V en la juntura p-i-n con un gap de movilidad de 1,48 eV, que corresponde al a-SiGe:H, (uno de los casos mostrados en la Figura 3.5). En cada punto  $x$  de la capa intrínseca  $R(x)$  resulta de integrar el producto entre la eficiencia de recombinación  $\eta(E_t)$ , definida en la Ecuación 3.7, y la densidad de estados dentro del gap,  $g_{gap}(E_t)$ , según la ecuación:

$$R = \int_{E_v}^{E_c} \eta(E_t) * g_{gap}(E_t) dE_t. \quad (3.17)$$

También se grafican los errores relativos para la tasa de recombinación  $\varepsilon_{SRH-AST}^R$  que se define en forma similar al error relativo de la Ecuación (3.13) utilizado para la densidad de corriente:

$$\varepsilon_{SRH-AST}^R = 100 \frac{R_{SRH} - R_{AST}}{R_{SRH}}. \quad (3.18)$$



**Figura 3.6:** (a) Perfiles de la tasa de recombinación en función de la posición,  $R(x)$ , según los formalismos de SRH, AST y ASTOK, y errores relativos introducidos en la evaluación de la tasa de recombinación, dentro de la capa intrínseca con un gap de movilidad de 1,48 eV en una juntura p-i-n de a-SiGe:H que opera en condiciones de oscuridad para tensiones directas de 0,01 V y 0,14 V. (b) Diagrama de bandas de la misma juntura p-i-n operando en condiciones de oscuridad para una tensión directa de 0,01 V, donde se incluyen los cuasi niveles de Fermi de portadores atrapados y los niveles  $E_{T0}$ , tanto para estados de defectos donores como aceptores. Las secciones eficaces utilizadas corresponden a las de la Tabla 3.1.

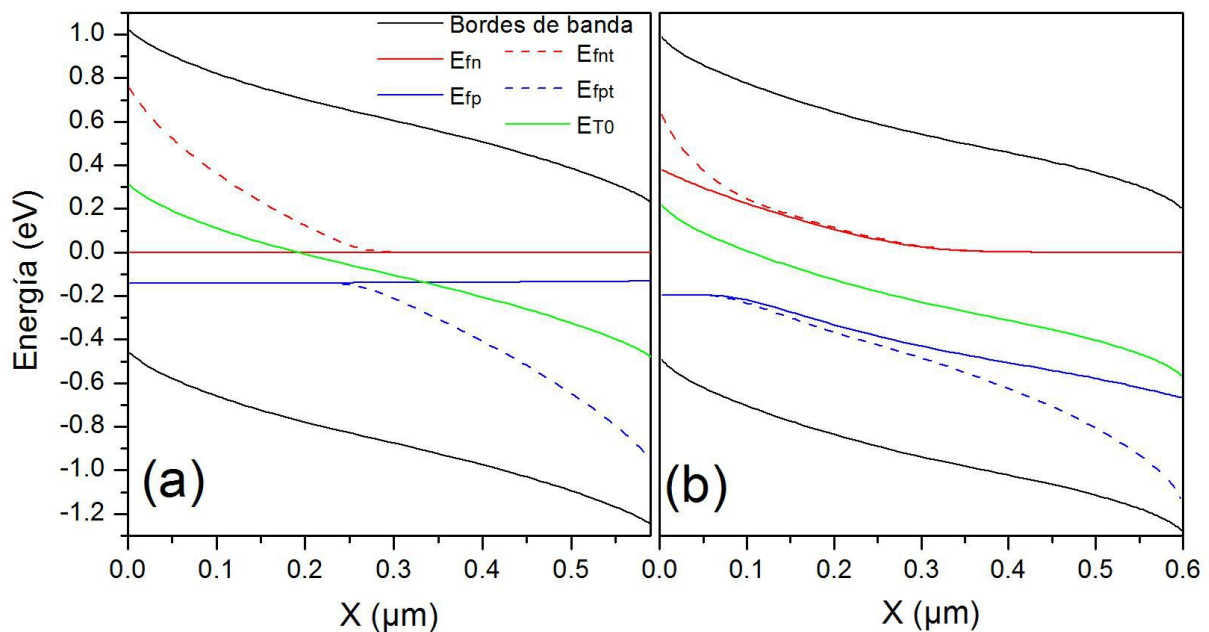
Se escogió la juntura p-i-n con una capa intrínseca de a-SiGe:H para evaluar el error introducido por aproximación AST debido a que su menor gap de movilidad hace que las tasas de recombinación sean mayores a las presentes en una capa intrínseca de una juntura p-i-n de a-Si:H y por lo tanto los errores sean potencialmente mayores. Es decir, es un buen caso para testear la solidez de la AST. En la Figura 3.6(b) se presenta el diagrama de bandas de la juntura p-i-n con la capa intrínseca de a-SiGe:H ( $E_G = 1.48$  eV) que opera en condiciones de oscuridad cuando se le aplica una tensión directa de 0,01 V. En el diagrama se muestran los bordes de bandas  $E_c$  y  $E_v$ , los cuasi-niveles de portadores atrapados  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  y el nivel de trampa intrínseco  $E_{T0}$  tanto para los estados de defectos donores como aceptores. En la Figura 3.7(a) se muestra el mismo diagrama de bandas para una tensión directa de 0,14 V también en condiciones de oscuridad.

Para una tensión aplicada de 0,01 V el  $\varepsilon_{SRH-AST}^R$  alcanza valores absolutos de entre 5% y 8%, lo cual se corresponde con las diferencias encontradas entre estos dos formalismos en el cálculo de la densidad de corriente a tensiones directas bajas y en condiciones de oscuridad. Como se puede observar, los valores máximos del  $\varepsilon_{SRH-AST}^R$  se dan cerca del centro del dispositivo, donde ambos cuasi-niveles de Fermi para portadores atrapados quedan muy próximos al valor de  $E_{T0}$ . Por lo tanto, en esta región de la capa intrínseca, el rango de energía del gap en el cual los coeficientes de captura son mayores a los coeficientes de emisión se torna muy pequeño. Como consecuencia, los coeficientes de emisión (que aumentan a medida que se alejan del nivel  $E_{T0}$ ) pasan a ser mayores a los coeficientes de captura a energías de gap muy cercanas al nivel  $E_{T0}$  cuando aún sus valores son comparables entre sí. Al despreciar uno de estos coeficientes de emisión (el de huecos para energías mayores a  $E_{T0}$  y el de electrones para energías menores a  $E_{T0}$ ) la AST calcula una mayor recombinación. Incluso se puede observar que los dos picos que presenta la curva de error relativo coinciden con la posición en donde menor es la energía que separa los niveles  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  tanto para los estados de defectos donores como aceptores (ver línea de puntos Figura 3.6). Esto mismo ocurre en todos los casos estudiados, lo cual respalda la hipótesis de que la AST posee una mejor performance cuando los cuasi-niveles de Fermi para portadores atrapados se alejan del nivel  $E_{T0}$ .

Cuando la tensión directa aplicada se eleva a  $V = 0,14$  V los máximos valores del  $\varepsilon_{SRH-AST}^R$  quedan por debajo de 0,6% en todos los dispositivos simulados. La tensión aplicada “abre” los niveles de portadores atrapados aumentando el rango de energía dentro del gap donde los coeficientes de capturas son mayores que los de emisión. Así, cuando los coeficientes de emisión pasan a ser mayores que los de captura, la distancia que los separa del nivel  $E_{T0}$  es ahora de varios  $kT$ s y por lo tanto el coeficiente de emisión de huecos se vuelve despreciable respecto del de electrones para valores de energía por encima de  $E_{T0}$  y viceversa para valores de energía por

debajo de  $E_{T0}$ , favoreciendo la similitud entre las predicciones arrojadas por los formalismos AST y SRH.

Para condiciones de iluminación AM1.5, como era de esperarse, la aproximación AST reproduce con mucha precisión la curva J-V que arroja el formalismo de SRH tanto para tensiones directas como inversas, con un error relativo que en todos los casos estudiados se mantiene siempre por debajo del 0,1% (ver Figura 3.5(b)). Cuanto mayor es la intensidad de luz, o mayor la tensión aplicada, el rango de energía en que los valores de los coeficientes de emisión permanecen por debajo de los de captura es mayor, y en consecuencia menor es la diferencia entre ambos formalismos. En la Figura 3.7 se muestran los diagramas de bandas del dispositivo p-i-n analizado en la Figura 3.6 para una tensión directa aplicada de 0,14 V tanto para condiciones de oscuridad como para iluminación AM1.5 donde se puede apreciar, comparando con la Figura 3.6(b), cómo los niveles  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  se apartan del nivel  $E_{T0}$ .

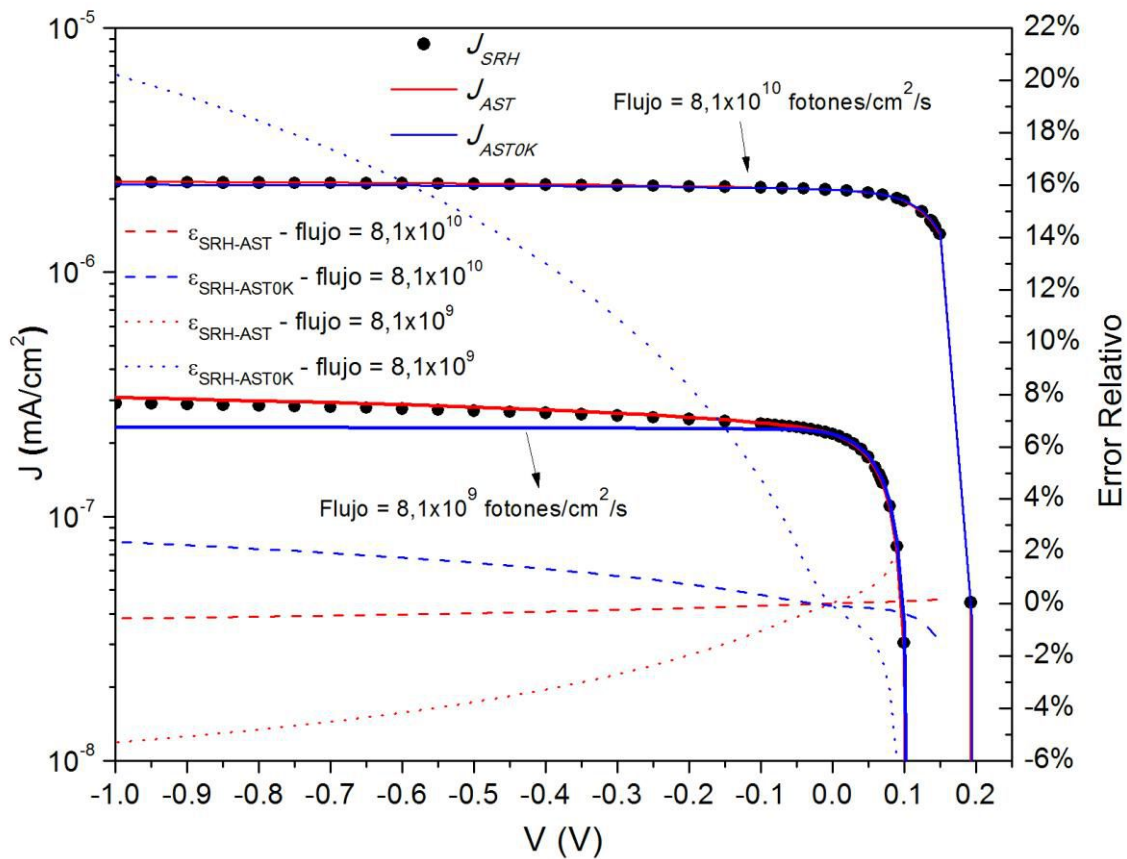


**Figura 3.7:** Diagrama de bandas de la juntura p-i-n de a-SiGe:H (a) a oscuras y (b) bajo iluminación AM1.5 cuando se le aplica una tensión directa de 0,14 V. Se incluyen los cuasi niveles de Fermi para portadores atrapados y los niveles el nivel  $E_{T0}$ , únicamente para trampas de estados de defectos donores.

Para estudiar el error introducido por la AST para diferentes condiciones de iluminación se compararon los resultados obtenidos por ambos formalismos al utilizarse distintas intensidades de luz. Se escogió para estas simulaciones una luz roja (que contiene longitudes de ondas solo mayores a 680 nm) a los efectos de garantizar una absorción uniforme dentro de la

capa intrínseca. Dado que nos interesa investigar si la aproximación AST es confiable para la evaluación de la densidad de corriente detectada por sensores que operan bajo iluminación de intensidad muy débil, el análisis se realizó mayormente para tensiones inversas. Como se puede observar en la Figura 3.8 para intensidades de flujo de  $8,1 \times 10^{10}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s la densidad de corriente calculada con la aproximación AST se ajusta casi perfectamente al formalismo SRH, encontrándose errores relativos máximos del 0,5% en valor absoluto. Para valores de flujo por debajo de  $8,1 \times 10^9$  fotones/cm<sup>2</sup>/s la AST comienza a apartarse del modelo de referencia, tendiendo a un comportamiento similar al hallado en condiciones de oscuridad.

Además se exploraron los errores introducidos por la aproximación AST cuando la muestra es iluminada por fuentes de luz con diferentes contenidos espectrales como UV, azul, verde, etc., obteniéndose resultados similares a los mencionados en el párrafo anterior.



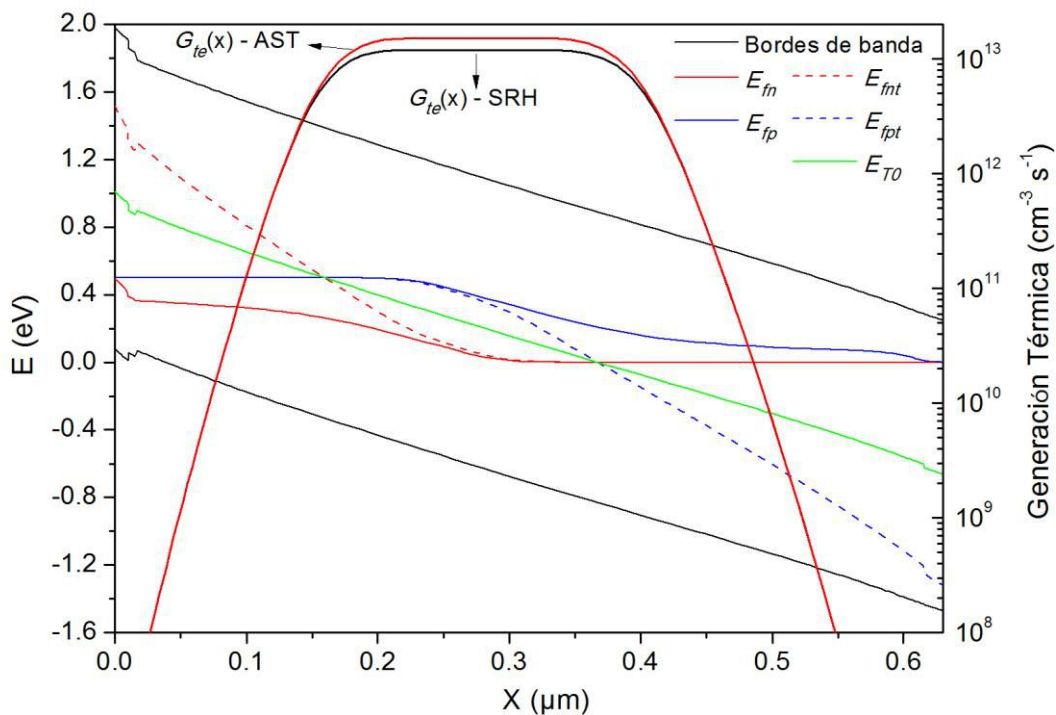
**Figura 3.8:** Curvas características J-V de una juntura p-i-n de a-Si:H iluminada con luz roja (longitudes de ondas mayores a 680 nm) obtenidas con los formalismos de SRH, AST y AST0K, y los errores relativos correspondientes para dos intensidades de flujo de iluminación:  $8,1 \times 10^{10}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s y  $8,1 \times 10^9$  fotones/cm<sup>2</sup>/s.

Si bien la aproximación AST fue desarrollada únicamente para tensiones directas cuando el dispositivo no está expuesto a iluminación, resulta interesante evaluar el comportamiento de la aproximación cuando los dispositivos son sometidos a tensiones inversas. Sorprendentemente, la AST es todavía capaz de reproducir satisfactoriamente la forma de la curva J-V a oscuras para tensiones inversas. En la Figura 3.5 se muestran los resultados solo para tensiones aplicadas de entre -1 V y 0 V, pero para tensiones inversas más elevadas se obtienen resultados cualitativamente similares con errores relativos que tienden a estabilizarse. La aproximación AST introduce una sobreestimación de la densidad de corriente en mayor proporción a medida que crece la tensión inversa aplicada. En los distintos dispositivos y escenarios estudiados, la sobreestimación de la densidad de corriente alcanza un máximo, en valor absoluto, de entre un 20% y un 25%, dependiendo del caso, cuando la tensión aplicada es  $V = -1$  V (ver Figura 3.5(a)). Para tensiones inversas mayores (hasta  $V = -10$  V) la curva J-V que predice la aproximación AST mantiene un comportamiento semejante a la curva obtenida con el formalismo SRH y en ninguno de los dispositivos y escenarios estudiados el error relativo supera, en valor absoluto, el 30% para estas tensiones elevadas o para cualquier otra.

Bajo condiciones de oscuridad y con una tensión directa aplicada, o bajo condiciones de iluminación, el cuasi nivel de Fermi para electrones,  $E_{fn}$ , se ubica por encima del cuasi nivel de Fermi para huecos,  $E_{fp}$  (ver Figura 3.7). En cambio, bajo condiciones de oscuridad y con una tensión inversa aplicada la corriente es debida y está limitada por el proceso de generación térmica de pares e-h que se caracteriza por la inversión de estos niveles, es decir,  $E_{fn}$  se ubica energéticamente por debajo de  $E_{fp}$ . En la Figura 3.9 se muestra el diagrama de bandas de una juntura p-i-n de a-Si:H, con una capa intrínseca de 600 nm de espesor, a oscuras y con una tensión inversa aplicada de 0,5 V donde se puede observar la inversión de los cuasi-niveles de Fermi. Resulta interesante observar en la Figura 3.9 que los cuasi niveles de Fermi de portadores atrapados se invierten, pero únicamente en la región de la capa i donde la generación térmica de pares e-h alcanza valores significativos y no en todo el dispositivo como lo hacen los cuasi-niveles de Fermi. En esta región de la capa intrínseca los coeficientes de emisión son mayores a los de captura. Como se puede observar en la Figura 3.9 el nivel  $E_{T0}$  atraviesa la región donde  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  están invertidos. Al desprejarse un coeficiente de emisión (el de huecos por encima del nivel  $E_{T0}$  y el de electrones por debajo del mismo) la ocupación de las trampas localizadas entre los niveles  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  invertidos se ve modificada (ver Ecuaciones 3.6). La AST sobreestima la ocupación de las trampas con electrones por debajo del nivel  $E_{T0}$  debido a que para energías menores a ese nivel la emisión de electrones hacia la banda de conducción no está permitida. Simultáneamente la ocupación de trampas con electrones por encima del nivel  $E_{T0}$  es subestimada por la aproximación AST, ya que para energías mayores a ese nivel la emisión de

huecos hacia la banda de valencia no está permitida. El resultado final es que más electrones en las trampas por encima de  $E_{T0}$  y más huecos en las trampas por debajo de ese valor, son promovidos hacia las bandas de conducción y valencia respectivamente por la AST, lo que da lugar a una sobreestimación de la generación térmica ( $G_{te}$ ) respecto del formalismo de SRH (ver Figura 3.9). Esta sobreestimación de la generación térmica origina la diferencia en las densidades de corrientes predichas por los dos modelos cuando la juntura se encuentra bajo condiciones de oscuridad y con una tensión inversa aplicada (ver Figura 3.5(a)). El error relativo en la evaluación de la generación térmica introducido por la AST,  $\varepsilon_{SRH-AST}^G$ , alcanza valores de entre el 20% y 30% en concordancia con el error relativo entre ambos modelos para la densidad de corriente bajo estas condiciones. Es interesante destacar que aunque la AST no fue diseñada para escenarios donde los niveles  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  se invierten, aún así es capaz de reproducir correctamente la dependencia de la densidad de corriente con la tensión.

Con el objetivo de analizar cuán generales son nuestros resultados sobre las bondades y deficiencias de la aproximación AST, se estudiaron estructuras alternativas de juntura tipo p-i-n y condiciones de funcionamiento diferentes de las discutidas hasta ahora.



**Figura 3.9:** Comparación de la dependencia de la Generación Térmica con respecto a la posición  $G_{te}(x)$  obtenida con los formalismos de SRH y AST y diagrama de bandas para trampas donoras de una juntura p-i-n de a-Si:H con una capa intrínseca de 600 nm bajo condiciones de oscuridad y con una tensión inversa aplicada de 0,5 V.

Tanto en los dispositivos p-i-n con bajo gap de movilidad en la capa intrínseca, como en las juntas de a-SiGe:H (1,48 eV) y  $\mu\text{c-Si:H}$  (1,25 eV), la AST muestra una excelente performance dentro del rango de gap de movilidad cubierto en nuestro estudio (1,25 eV a 1,72 eV) tanto para condiciones de iluminación AM1.5 con tensiones directas e inversas aplicadas, como para condiciones de oscuridad y una tensión directa aplicada. Bajo condiciones de oscuridad y tensiones inversas aplicadas la sobrestimación de la corriente es del mismo orden relativo al ya obtenido en todos estos dispositivos y la AST reproduce correctamente la dependencia de la densidad de corriente con la tensión aplicada.

Cuando las juntas p-i-n operan a temperaturas diferentes (a la de medio ambiente) se observa que a altas temperaturas se incrementan las pérdidas predichas por recombinación por la aproximación AST con respecto al formalismo SRH. Cuanto mayor es el valor de  $kT$  respecto del gap de movilidad mayor es el rango de energía alrededor del nivel  $E_{T0}$  donde la AST se vuelve cuestionable [25]. Sin embargo, nuevamente la AST muestra una buena performance para los rangos de temperaturas (250 K – 400 K) aquí estudiados, tanto para condiciones de iluminación AM1.5 bajo tensiones aplicadas directas e inversas, como para condiciones de oscuridad y bajo tensiones aplicadas directas (ver Figuras 3.5).

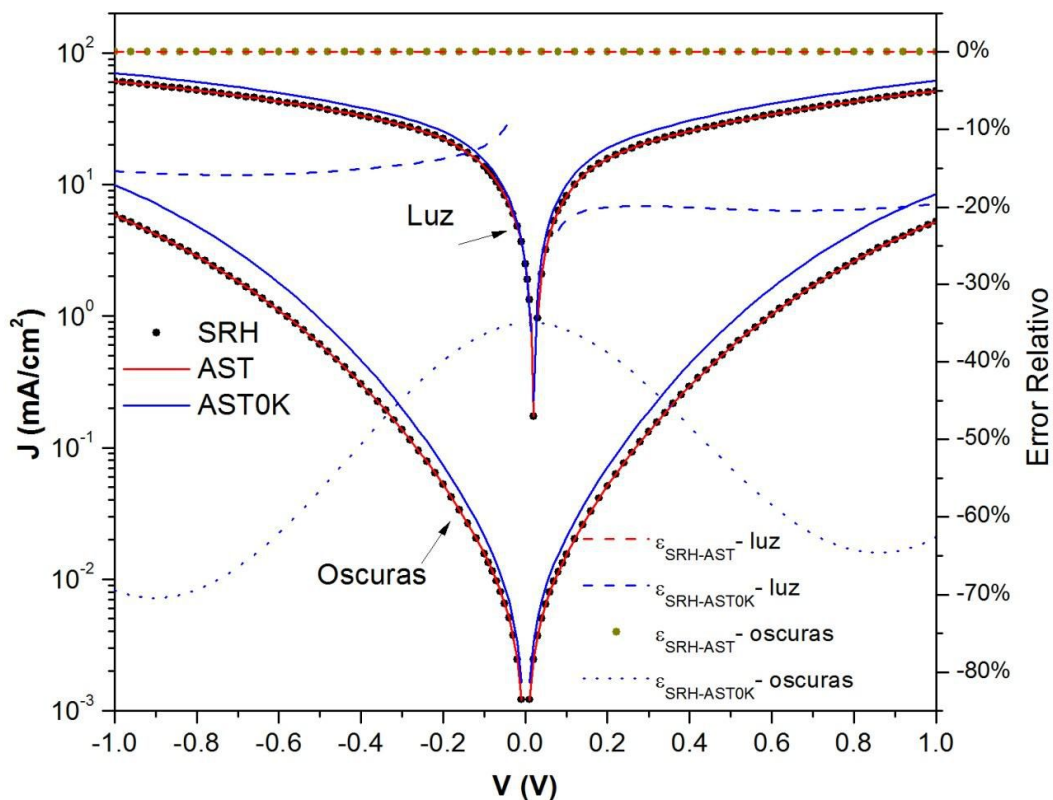
En las juntas p-i-n de  $\mu\text{c-Si:H}$ , que presenta en la capa intrínseca el menor gap de movilidad (1,25 eV) analizado en este capítulo, las conclusiones fueron enteramente similares a las ya obtenidas en juntas p-i-n de a-Si:H. El error introducido por la AST es ligeramente mayor para temperaturas elevadas debido al menor valor del gap de movilidad pero se mantiene dentro de valores aceptables.

Se analizó también la performance de la aproximación AST en dispositivos de inyección simple donde bajo condiciones de oscuridad la recombinación es despreciable y los posibles apartamientos entre las curvas J-V predichas por SRH y AST son sensibles únicamente a la carga atrapada, que impactan sobre la forma final del perfil del campo eléctrico dentro de la capa intrínseca. En particular en las estructuras n-i-n o p-i-p, que forman parte de la familia de dispositivos de inyección simple, para cualquier voltaje externo aplicado, una junta resulta polarizada con una tensión directa mientras que la otra es polarizada con una tensión inversa. A pesar de que la AST introduce un error no despreciable en el cálculo de la densidad de corriente  $J$  cuando un dispositivo p-i-n es polarizado inversamente (debido a la inversión de los cuasi-niveles de portadores libres y atrapados) la curva J-V a oscuras de dispositivos n-i-n y p-i-p es predicha correctamente por la AST, como se puede observar en la Figura 3.10. Para tensiones aplicadas entre -1 V y 1 V los errores relativos se mantienen siempre por debajo del 0,1%. Resultados similares se obtienen para tensiones mayores. La aproximación AST reproduce muy bien también las curvas J-V bajo iluminación de estructuras n-i-n y p-i-p debido a que la luz



incidente utilizada en la medición abre los cuasi niveles de Fermi garantizando que cerca del nivel  $E_{T0}$  la recombinación prevalezca sobre la emisión. Resultados muy satisfactorios y enteramente similares se obtuvieron en dispositivos de simple inyección del tipo Schottky como metal-i-n, metal-i-p, etc.

La AST también reproduce de manera muy exacta la SR de dispositivos cuando se utiliza una luz de polarización o sin ella, debido, nuevamente, a que la luz incidente, sea de polarización o de prueba, utilizada en la medición abre los cuasi niveles de Fermi.



**Figura 3.10:** Curvas J-V a oscuras y bajo iluminación AM1.5 obtenidas con D-AMPS para los formalismos SRH, AST y AST0K de una juntura p-i-p de a-Si:H con espesor de capa intrínseca de 600 nm. Se incluyen también los errores relativos de las aproximaciones AST y AST0K.

### 3.3.2 Aproximación Simmons-Taylor 0 K – AST0K

La AST0K asume transiciones escalonadas abruptas en los cuasi niveles de Fermi de portadores atrapados. Las considerables simplificaciones que se obtienen en los cálculos e interpretación de las curvas J-V [25] son acompañadas por un mayor riesgo de introducir errores significativos en la simulaciones [58,63].

Nuestros resultados indican que la AST0K aproxima de manera aceptable las curvas J-V en condiciones de oscuridad y tensión directa, para dispositivos p-i-n de a-Si:H (ver Figura 3.5(a)) tomando como referencia las curvas J-V obtenidas con el formalismo SRH. Los errores más importantes, como era de esperarse, se producen para tensiones pequeñas cercanas al equilibrio termodinámico. Es interesante observar que bajo estas condiciones la AST sobreestima la densidad de corriente ( $\varepsilon_{SRH-AST} < 0$ ) mientras que la AST0K la subestima, con valores de  $\varepsilon_{SRH-AST0K}$  positivos de entre un 5% y 12% según el caso. Este comportamiento es producto de las transiciones abruptas que propone la AST0K a partir de las cuales no se contabiliza la recombinación que se produce por fuera los cuasi niveles de Fermi de portadores atrapados (ver Ecuación (3.9)). Como se muestra en la Figura 3.6(b) para condiciones cercanas al equilibrio termodinámico los niveles  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  están muy cerca uno de otro reduciendo significativamente el rango de energía en el cual la AST0K contabiliza las recombinaciones, subestimándola, y por consiguiente subestimando también la densidad de corriente.

Para condiciones de iluminación AM1.5 la AST0K sobreestima, respecto del formalismo SRH, levemente la densidad de corriente a tensiones directas bajas en dispositivos p-i-n, producto de una subestimación de la tasa de recombinación. Cerca de las condiciones de corto circuito el error relativo  $\varepsilon_{SRH-AST0K}$  es muy pequeño, pero adquiere valores no despreciables cerca del punto de máxima potencia, principalmente en dispositivos p-i-n donde la capa intrínseca posee un gap de movilidad menor al del a-Si:H. A medida que aumenta la tensión directa aplicada se debilita el campo eléctrico interno dentro de la capa intrínseca (las bandas se aplanan), lo cual incrementa el tiempo que los portadores foto-generados permanecen en el dispositivo antes de ser colectados en los contactos.

En este escenario la recombinación que tiene lugar en los estados del gap que se encuentran apenas por fuera de los niveles  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  deja de ser despreciable en relación a la recombinación que se produce entre esos niveles de energía, como sí ocurre cuando el campo eléctrico interno es mayor. La AST0K ignora la contribución de estos estados a la tasa de recombinación total (ver Ecuación (3.10)) y por lo tanto la subestima. Este error se profundiza en los semiconductores con gap de movilidad bajos, ya que en ellos la energía que separa el borde de la banda de conducción del nivel  $E_{fpt}$  es menor que en materiales de gap más alto, y por lo tanto los estados ubicados por debajo de  $E_{fpt}$  tienen mayor probabilidad de capturar un electrón de la banda de conducción y aportar significativamente a la recombinación. Análogamente, pero con menor peso, los estados ubicados por encima del nivel  $E_{fnt}$  son capaces de capturar un hueco de la banda de valencia y aportar también así a la recombinación. Nuestros resultados muestran que para dispositivos p-i-n con gap de movilidad de capa intrínseca iguales

o mayores a 1,72 eV el error relativo no supera el 7%, mientras que para dispositivos con gap menores, el error alcanza valores de hasta el 14% (ver Figura 3.5).

Bajo condiciones de oscuridad y tensiones inversas, la ASTOK en rigor pierde validez y tanto la función de ocupación como la eficiencia de recombinación no deberían ser calculadas a partir de las Ecuaciones (3.8) y (3.9), ya que esas expresiones dejan de ser adecuadas cuando los cuasi niveles de Fermi portadores atrapados se invierten. Sin embargo podemos observar que para tensiones inversas bajas la ASTOK es capaz de reproducir la forma de la curva J-V (ver Figura 3.5(a)). En el Capítulo 5 se discutirá en detalle la problemática que presenta la ASTOK cuando se intenta aplicarla bajo condiciones de oscuridad en un dispositivo que esta polarizado con una tensión inversa y se propone una nueva formulación que reemplaza a la ASTOK para estas condiciones.

En la Figura 3.8 se observa que para intensidades de iluminación iguales o mayores a  $8,1 \times 10^{10}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s la ASTOK muestra una buena performance para predecir la curva J-V con  $\varepsilon_{SRH-ASTOK}$  que no superan el 4% en ninguno de los dispositivos y escenarios estudiados, mientras que para intensidades menores a  $8,1 \times 10^9$  fotones/cm<sup>2</sup>/s la aproximación pierde exactitud adquiriendo valores de  $\varepsilon_{SRH-ASTOK}$  que rondan el 20%.

### 3.4 Conclusiones

La aproximación de Simmons-Taylor (AST) puede ser utilizada para simplificar la descripción del transporte eléctrico en celdas solares y sensores ópticos sin perder mucha precisión en el cálculo de las curvas características de corriente-tensión y respuesta espectral de dispositivos de película delgada. Las curvas J-V y SR obtenidas con el formalismo de SRH son reproducidas con muy buena exactitud por la AST, bajo condiciones de iluminación para cualquier voltaje externo aplicado y bajo condiciones de oscuridad sólo para tensiones directas. La AST mantiene su exactitud con un margen de error bajo para un amplio rango de temperaturas (250 K – 400 K,  $\varepsilon_{SRH-AST} < 4,5\%$ ), espesores de capas intrínsecas (200 nm – 3000 nm,  $\varepsilon_{SRH-AST} < 5\%$ ) y gaps de movilidades (1,25 eV – 1,72 eV,  $\varepsilon_{SRH-AST} < 4,7\%$ ), alcanzando un  $\varepsilon_{SRH-AST}$  cercano al 6% en el escenario más desfavorable. Los errores introducidos por la AST son mayores para altas temperaturas, bajos gaps de movilidades y no presenta una tendencia definida con respecto al espesor de la capa intrínseca. En todos los casos los valores más altos de errores relativos se dan en condiciones de oscuridad y para tensiones cercanas a cero, quedando el  $\varepsilon_{SRH-AST}$  por debajo del 1% en todos los escenarios analizados si se excluye el rango de tensiones de 0 V a 0,15 V. Bajo condiciones de oscuridad y tensiones inversas la aproximación

sobreestima la corriente en no más de un 20%, pero reproduce adecuadamente la forma de la curva J-V. Para condiciones de baja intensidad de iluminación, escenarios de funcionamiento de detectores ópticos, este error decrece a medida que aumenta la intensidad de iluminación volviéndose despreciables para intensidades mayores a  $10^{10}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s. La AST también reproduce con mucha exactitud las curvas características de dispositivos de inyección simple bajo condiciones de oscuridad y de iluminación, tanto para tensiones aplicadas directas como inversas.

La aproximación de Simmons-Taylor "0K" (AST0K) también puede ser utilizada en el modelado de dispositivos bajo restricciones similares a las de la AST, pero con algunas limitaciones extras. La AST0K tiende a sobreestimar el factor de llenado en el modelado de celdas solares, especialmente en aquellas que poseen un bajo gap de movilidad en la capa intrínseca. Esta aproximación también arroja errores importantes en la evaluación de dispositivos de inyección simple. Para intensidades de iluminación menores a  $10^{11}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s o cuando el dispositivo opera en condiciones de oscuridad y bajo tensiones inversas aplicadas la AST0K se vuelve inaceptable.

## Capítulo 4

# Modelado de curvas características utilizando la aproximación de Simmons-Taylor y el modelo de Defect Pool

En el capítulo anterior, las curvas características de los dispositivos de a-Si:H y  $\mu$ c-Si:H fueron modeladas utilizando tres formalismos diferentes: el de Shockley-Read-Hall (SRH), la aproximación de Simmons-Taylor (AST) y la de Simmons-Taylor 0K (AST0K). En todos los casos las densidades de defectos o DB se asumieron uniformes, es decir con un valor constante, a lo largo del ancho de las capas del dispositivo (modelo UDM) y los estados asociados a los defectos se representaron mediante la AED. En este capítulo, las aproximaciones AST y AST0K serán testeadas en los dispositivos de a-Si:H cuando la densidad de DBs se evalúa con el modelo de Defect Pool. Este modelo predice una densidad de defectos no uniforme dentro de las capas de dispositivos donde las bandas no son planas. Este escenario se presenta en la capa intrínseca de una juntura p-i-n donde, debido a la presencia de un campo eléctrico interno sostenido por las cargas ubicadas en las capas dopadas, las bandas no son planas. Como ya se describió en el Capítulo 1, el DPM se basa en un elaborado modelo termodinámico donde la creación de defectos se describe mediante un proceso de equilibrio químico a través de una reacción que involucra distintos tipos de enlaces presentes en el seno del material. Esta reacción tiene lugar a la temperatura de deposición de la muestra dentro de la cámara de plasma, la cual es más elevada que la temperatura ambiente. Una vez depositada la muestra, se enfría hasta alcanzar la temperatura ambiente. La densidad de defectos queda congelada por debajo de cierta temperatura  $T^*$  que se conoce con el nombre de temperatura de equilibración o congelamiento (freezing en inglés) y que es del orden de 460K – 500K. Si bien los ajustes de las curvas características corriente-tensión y respuesta espectral pueden lograrse tanto con UDM como con DPM, una parte de la comunidad científica prefiere modelar dispositivos basados en a-Si:H con DPM mientras que la otra lo hace con el UDM. En la actualidad, se conoce que en ciertos casos el

UDM puede dar lugar a predicciones que contradicen las tendencias halladas experimentalmente mientras que el DPM es capaz de reproducirlas, lo que conlleva a que éste último sea el modelo más frecuentemente utilizado en la literatura [64,30,65].

En la derivación de la expresión para el cálculo de la densidad de DB,  $g_{DB}$ , que en el modelo DPM resulta no uniforme con la posición “x” dentro de la capa intrínseca de los dispositivos de a-Si:H (es decir  $g_{DB} = g_{DB}(x,E)$ ), los autores del modelo [29] asumen que los DBs poseen un carácter anfotérico, a los efectos de describir los tres posibles estados de carga de los enlaces Si-Si. La derivación y evaluación de  $g_{DB}(x,E)$  se identifica en este trabajo con la sigla DPM-1. El número 1 indica el primer paso propuesto en la formulación del DPM. La densidad de carga atrapada  $\rho$  se obtiene integrando el producto de la densidad de estados  $g_{DB}(x,E)$  con las funciones de ocupación descritas en la Sección 2.3.2 sobre los estados del gap de movilidad. De forma análoga se evalúa la tasa de recombinación  $R$  integrando el producto de  $g_{DB}(x,E)$  con la eficiencia de recombinación que resulta de los procesos de emisión y captura de estados anfotéricos también descritos en la Sección 2.3.2. Al cálculo de  $\rho$  y  $R$  a partir de  $g_{DB}(x,E)$  y a la física de estados anfotéricos las identificamos con las siglas DPM-2. El número 2 indica el segundo paso propuesto en la formulación del DPM. El primer paso DPM-1 corresponde a la evaluación de la densidad de defectos a la temperatura  $T^*$  mientras que el segundo paso DPM-2 corresponde a la evaluación de la densidad de carga y tasa de recombinación a la temperatura  $T$  a la cual el dispositivo opera. La densidad de defectos  $g_{DB}(x,E)$  obtenida a  $T^*$  es idéntica a la utilizada a la temperatura  $T$  porque  $g_{DB}(x,E)$  queda “congelada”, según el modelo DPM, a la distribución obtenida a  $T^*$ .

En la Sección 3.1.1 del capítulo anterior se describió la aproximación AST, que fue derivada por sus autores [56] para estados donores y aceptores, los cuales admiten hasta un electrón por estado (single-occupied states). Por su parte, los estados anfotéricos pueden albergar hasta dos electrones, lo que implica que para poder aplicar la aproximación AST cuando se emplea el formalismo de DPM es necesario, en primer lugar, aplicar la aproximación de estados desacoplados (AED) a los estados anfotéricos utilizados en el modelo DPM para poder describir la física de los DBs. Como explicaremos en detalle en la Sección 4.2 la AED se aplicará sólo al modelo DPM-2 por las razones que se darán a conocer. En consecuencia las expresiones para el cálculo de la concentración de carga atrapada y la velocidad de recombinación que se presentan en el DPM para estados anfotéricos deben ser primero adaptadas (re-derivadas) para estados desacoplados, a los efectos de poder después aplicar las aproximaciones de Simmons-Taylor. Para evaluar el comportamiento de la AST y la AST0K en dispositivos de a-Si:H modelados con DPM es necesario, entonces, testear dos aproximaciones simultáneamente: en primer lugar la aproximación de estados desacoplados en una densidad de estados no uniforme

de DBs como la predicha por el modelo DPM, y, en segundo lugar, las aproximaciones AST y AST0K una vez que la AED fue aplicada en las ecuaciones del modelo de DPM.

M. Kron and R. van Swaaij [65] estudiaron en detalle el factor de diodo “n” (Ideality Factor) de las curvas J-V a oscuras de diodos p-i-n de a-Si:H modelando la densidad de DBs con el formalismo de DPM. En sus contribuciones utilizaron la AST0K, que permite una simplificación considerable en la interpretación de los resultados [65]. Si bien sus trabajos presentan interesantes conclusiones, usan la AST0K dentro del formalismo de DPM sin justificar su validez. Según nuestro conocimiento, no existe en la literatura una publicación que justifique la aplicación de la AST0K en dispositivos de a-Si:H cuando se emplea el modelo de DPM para evaluar la densidad de carga y la tasa de recombinación y en consecuencia las curvas J-V. Este capítulo es un intento de llenar este vacío en la literatura.

## 4.1 Implementación de la Aproximación de Simmons-Taylor en el modelo de DPM

### 4.1.1 Adaptación del Modelo de Defect Pool a la aproximación de estados desacoplados- AED

El Modelo de Defect Pool (DPM) describe la creación de defectos como un proceso de equilibrio químico de diferentes configuraciones de enlaces. La densidad de DBs surge de minimizar la energía libre del sistema compuesto por los enlaces débiles Si-Si, los enlaces colgantes y los enlaces H-Si [28]. El equilibrio final también depende del estado de carga que adquiere el DB después de la rotura del enlace Si-Si, y lo tanto la posición del nivel de Fermi en el gap influye en la densidad de DBs final. Por esta razón la densidad de DBs obtenida con la aplicación del formalismo de DPM resulta espacialmente no uniforme dentro de la capa intrínseca en un dispositivo p-i-n de a-Si:H. En la Sección 1.2.2.b del Capítulo 1 se discutió el modelo DPM, y en la Figura 1.3(a) puede apreciarse la densidad de DBs en función de la posición en un dispositivo p-i-n de a-Si:H.

Para facilitar la lectura del capítulo y el análisis posterior, se repiten las expresiones obtenidas con el modelo de DPM (ver Sección 1.2.2.b) [26]. Powell y Deane derivaron la siguiente expresión para distribución de DBs:

$$g_{DB}(E_t) = \gamma \left[ \frac{2}{F_{eq}^0(E_t)} \right]^{kT/2E_D} P \left( E_t + \frac{\sigma_{DP}^2}{2E_D} \right), \quad (4.1-a)$$

donde el coeficiente  $\gamma$  viene dado por:

$$\gamma = g_{v0} \left[ \frac{H}{N_{Si-Si}} \right]^{kT/4E_D} \left( \frac{2E_D^2}{2E_D - kT} \right) \exp \left( -\frac{1}{2E_D} \left[ E_{DP} - E_v - \frac{\sigma_{DP}^2}{4E_D} \right] \right), \quad (4.1-b)$$

y la función de  $P(E_t)$ , que define la probabilidad de formación de un DB en el nivel de energía  $E_t$  por:

$$P(E_t) = (2\pi\sigma_{DP}^2)^{-1/2} \exp \left[ -\frac{(E_t - E_{DP})^2}{2\sigma_{DP}^2} \right]. \quad (4.1-c)$$

$F_{eq}^0(E_t)$  es la probabilidad de ocupación de un estado anfotérico por un electrón, dada por la Ecuación (2.32-b) en condiciones de equilibrio que también repetimos aquí:

$$F_{eq}^0(E_t) = \frac{2 \exp \left( \frac{E_f - E_t}{kT} \right)}{1 + 2 \exp \left( \frac{E_t - E_f}{kT} \right) + \exp \left( \frac{2E_t + U - 2E_f}{kT} \right)} \quad (4.1-d)$$

En la Ecuación (4.1-a),  $E_D$  representa la pendiente de la cola de valencia y  $\sigma_{DP}$  es el ancho del “pool” de energías disponibles. En la (4.1-b),  $g_{v0}$  representan la DOS en los bordes de banda de valencia,  $H$  la concentración de hidrógeno,  $N_{Si-Si}$  la concentración de enlaces Si-Si,  $E_v$  la energía del borde de la banda de valencia y  $E_{DP}$  la energía más probable disponible para la formación de un DB entre los sitios disponibles para la formación de defectos. Por último, en la Ecuación (4.1-d),  $E_f$  es el nivel de Fermi en condiciones de equilibrio termodinámico y  $U$  el valor de la energía de correlación.

En el modelo UDM la separación entre la Gaussiana  $D^-$ , doblemente ocupada, y la  $D^+$ , desocupada o simplemente ocupada, se designa con el símbolo  $\Delta_{DP}$ . El equivalente en DPM está relacionado con el ancho del “pool”  $\sigma_{DP}$  a través de la relación:

$$\Delta_{DP} = \frac{\sigma_{DP}^2}{E_D} - U, \quad (4.1-e)$$

donde  $U$  es la energía de correlación necesaria para colocar el segundo electrón en el DB. En nuestro código  $\Delta$  es un parámetro ingresado por el usuario. La Ecuación (4.1-e) define el valor de  $\sigma_{DP}$ . Como la pendiente de la cola de valencia  $E_D$  se ingresa en nuestro código D-AMPS como dato a la temperatura de funcionamiento del dispositivo, a los efectos de poder evaluar la densidad de DBs a la temperatura de freezing  $T^*$ , el valor de la pendiente de la cola de banda de valencia es corregida por la temperatura según la relación:

$$E_D^2(T) = E_D^2(T = 0K) + (kT)^2. \quad (4.1-f)$$



Ya que la densidad de defectos se evalúa a la temperatura de “freezing”, las Ecuaciones (4.1) constituyen lo que se denomina en la introducción de este capítulo como DPM-1.

Por otra parte, en la Sección 2.3.2 del Capítulo 2 se desarrolló el modelo de Sah y Shockley [47] para el cálculo de la recombinación y la función de ocupación para estados anfotéricos. También con el objeto de facilitar la lectura se repiten las expresiones presentadas en el Capítulo 2. En el modelo de estados anfotéricos las funciones de ocupación de las trampas fuera del equilibrio  $F$ ,  $F^+$ , vienen dadas por:

$$F^+ = \frac{P^0 P^-}{N^+ P^- + P^0 P^- + N^+ N^0}, \quad (4.2-a)$$

$$F^- = \frac{N^+ N^0}{N^+ P^- + P^0 P^- + N^+ N^0}, \quad (4.2-c)$$

donde

$$N^+ = n v_{th} \sigma_n^+ + e_p^+, \quad (4.2-d)$$

$$N^0 = n v_{th} \sigma_n^0 + e_p^0, \quad (4.2-e)$$

$$P^- = p v_{th} \sigma_p^- + e_n^-, \quad (4.2-f)$$

$$P^0 = p v_{th} \sigma_p^0 + e_n^0, \quad (4.2-g)$$

A su vez, la eficiencia de recombinación  $\eta$  y la carga promedio  $Q$  en los estados de defectos de un DB a una energía  $E_t$ , se pueden calcular con las siguientes expresiones:

$$\eta_R^{anf}(E_t) = v_{th}^2 (np - n_i^2) \frac{\sigma_n^+ \sigma_p^0 P^- + \sigma_n^0 \sigma_p^- N^+}{N^+ P^- + P^0 P^- + N^+ N^0}, \quad (4.3)$$

$$Q(E_t) = q(F^+ - F^-). \quad (4.4)$$

La velocidad o tasa de recombinación,  $R$ , y densidad de carga espacial,  $\rho$ , se evalúan integrando la eficiencia de recombinación y la carga promedio sobre todos los estados del gap situados entre la banda de valencia y la banda de conducción,  $E_v$  y  $E_c$ , con las ecuaciones:

$$R = \int_{E_v}^{E_c} g_{DB}(E_t) \eta_R(E_t) dE_t, \quad (4.5)$$

$$\rho = \int_{E_v}^{E_c} g_{DB}(E_t) Q(E_t) dE_t. \quad (4.6)$$

Las expresiones (4.2) a (4.6) constituyen lo que denominamos en este capítulo como DPM-2.

Dado que la AST fue derivada únicamente para estados desacoplados, para poder aplicarla es necesario primero implementar la AED reemplazando las Ecuaciones (4.3), (4.4), (4.5) y (4.6) por las correspondientes a las de estados desacoplados. Para ello, las funciones de ocupación fuera de equilibrio,  $F$  y  $F^*$  (Ecuaciones (4.2)), correspondientes a estados anfotéricos cargados deben reemplazarse por las funciones de ocupación de electrones y huecos,  $f_n$  y  $1-f_n$ , propuestas por el formalismo de SRH para estados simples donores y aceptores (Ecuaciones (2.29)). Las expresiones para la eficiencia de recombinación  $\eta$  y la carga promedio  $Q$  expuestas en las Ecuaciones (4.3) y (4.4) correspondientes a la aplicación de la AED son las siguientes [46]:

$$\eta_R^d(E_t) = v_{th}^2 \sigma_n^+ \sigma_p^0 \frac{np - n_i^2}{n\sigma_n^+ + p\sigma_p^0 + e_n^0 + e_p^+}, \quad (4.7-a)$$

$$\eta_R^a(E_t) = v_{th}^2 \sigma_n^0 \sigma_p^- \frac{np - n_i^2}{n\sigma_n^0 + p\sigma_p^- + e_n^- + e_p^0}, \quad (4.7-b)$$

$$Q_d(E_t) = q(1 - f_d), \quad (4.8-a)$$

$$Q_a(E_t) = qf_a, \quad (4.8-b)$$

$$Q(E_t) = Q_d(E_t) - Q_a(E_t), \quad (4.8-c)$$

donde el sub-índice  $d$  y  $a$  corresponden a los estados donores y aceptores respectivamente. La implementación de la AED en el modelo de DPM requiere, además, que la densidad de DBs,  $g_{DB}$ , deducida para estados anfotéricos (Ecuación (4.1)) sea reemplazada por dos réplicas de la misma, pero desplazadas en el eje de energía: una para estados donores  $g_d$  y otra para estados aceptores  $g_a$ . Como se expuso en el Capítulo 1,  $g_d$  es una copia de  $g_{DB}$  desplazada hacia energías menores en una cantidad  $kT\ln(2)$ , mientras que la  $g_a$  es otra copia de  $g_{DB}$ , desplazada hacia energías mayores en una cantidad  $U+kT\ln(2)$ . Así, las Ecuaciones (4.5) y (4.6) pueden reescribirse como:

$$R = \int_{E_v}^{E_c} [g^d(E_t)\eta_R^d(E_t) + g^a(E_t)\eta_R^a(E_t)] dE_t, \quad (4.9)$$

$$\rho = \int_{E_v}^{E_c} [g_d(E_t)Q_d(E_t) + g_a(E_t)Q_a(E_t)] dE_t. \quad (4.10)$$

Resulta importante aclarar que la función de ocupación  $F^{0_{eq}}$  en la Ecuación (4.1) es parte de la expresión derivada por Powel y Deanne para la densidad de DBs a la temperatura de congelamiento. La función  $F^{0_{eq}}$  impacta sólo en la densidad de DBs predicha por el modelo de

DPM (que permanece inalterada para  $T < T^*$ ) y no en la densidad de carga alojada en los mismos o en la tasa de recombinación a través de los mismos, que sí afectan la corriente generada por el dispositivo. Por esta razón no se reemplazó  $F_{eq}^0$  por las dos funciones de ocupación correspondiente a estados donores ocupados y aceptores desocupados, es decir, se consideró que la densidad de DBs calculada es intrínseca al modelo de DPM y por lo tanto no modificable.

Como se observa en la Ecuación (4.9) la velocidad de recombinación en AED está dada por la suma de los procesos de recombinación que tienen lugar a través de los estados donores y los aceptores. Esto podría tender a sobreestimar las pérdidas por recombinación que tienen lugar en los estados neutros [25], ya que para estos estados la AED genera dos contribuciones simultáneas: la proveniente de los estados donores cuando están ocupados y la proveniente de los estados aceptores cuando están desocupados. En los casos en que los DBs se modelan como estados anfotéricos el modelo no permite la mencionada contribución simultánea. Por otra parte, en AED, la densidad de carga espacial se obtiene a partir de la diferencia entre la carga positiva proveniente de los estados donores y la carga negativa proveniente de los estados aceptores (Ecuación (4.8-c)), lo que introduce un posible error que ya fue discutido en la literatura para el caso en el que la densidad de estados se considera uniforme (UDM) [26]. Los parámetros utilizados en nuestros ajustes cumplen con las dos condiciones requeridas para que el modelo AED introduzca sólo un error despreciable: la secciones eficaces de las trampas cargadas son mucho mayores que la de las trampas neutras y la energía de correlación  $U$  es positiva y considerablemente mayor a  $kT$  ( $U = 0,2 \text{ eV} \gg kT \approx 0.026 \text{ eV}$ )[25] (ver Tabla 3.1).

Aunque a priori no hay razón para pensar que la AED podría fallar cuando la densidad de DBs es no uniforme, la complejidad de los algoritmos desarrollados por Powel y Dean hace prudente chequear esta afirmación. Como se ha discutido anteriormente, en los modelos computacionales un error en el cálculo de la recombinación puede afectar la concentración final de portadores libres y con ellos la magnitud del campo y la función de ocupación, las cuales a su vez, alterarían la concentración de carga atrapada. Es decir, al tratarse de un método de cálculo numérico se produce un efecto de realimentación entre la recombinación, las cargas libres y las atrapadas que puede inducir a un error mayor al obtenido en los modelos analíticos que se emplean en física de materiales. Así, las condiciones de precisión exigidas para implementar el modelo de AED en materiales, pueden ser insuficientes cuando se analizan dispositivos donde la densidad de DBs es provista por el modelo de DPM.

### 4.1.2 La Aproximaciones de Simmons-Taylor y AED aplicadas al modelo de DPM

Una vez implementada la AED en el modelo de DPM, se puede aplicar la AST descrita en el capítulo anterior. Nuevamente, a modo de facilitar el posterior desarrollo del tema, se reescriben las ecuaciones de la función de ocupación,  $f$ , y de la eficiencia de recombinación,  $\eta_R$ , que se deducen en las AST y ASTOK. Para la AST las siguientes expresiones son válidas:

$$f^n(E_t) = \frac{n\sigma_n}{n\sigma_n + p\sigma_p} \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_t - E_{fnt}}{kT}\right) \right]^{-1} \text{ para } E_t > E_{T0}, \quad (4.11-a)$$

$$f^p(E_t) = 1 - f^n(E_t) = \frac{p\sigma_p}{n\sigma_n + p\sigma_p} \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_{fpt} - E_t}{kT}\right) \right]^{-1} \text{ para } E_t < E_{T0}, \quad (4.11-b)$$

$$\eta_R(E_t) = v_{TH} \frac{\sigma_n \sigma_p np}{n\sigma_n + p\sigma_p} \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_t - E_{fnt}}{kT}\right) \right]^{-1} \text{ para } E_t > E_{T0}, \quad (4.12-a)$$

$$\eta_R(E_t) = v_{TH} \frac{\sigma_n \sigma_p np}{n\sigma_n + p\sigma_p} \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_{fpt} - E_t}{kT}\right) \right]^{-1} \text{ para } E_t < E_{T0}, \quad (4.12-b)$$

mientras que para la ASTOK, son las siguientes:

$$f^n(E_t) = \begin{cases} 1 & \text{for } E_v < E_t < E_{fpt} \\ \frac{n\sigma_n}{n\sigma_n + p\sigma_p} & \text{for } E_{fpt} < E_t < E_{fnt} \\ 0 & \text{for } E_{fnt} < E_t < E_c \end{cases}, \quad (4.13-a)$$

$$f^p(E_t) = \begin{cases} 0 & \text{for } E_v < E_t < E_{fpt} \\ \frac{p\sigma_p}{n\sigma_n + p\sigma_p} & \text{for } E_{fpt} < E_t < E_{fnt} \\ 1 & \text{for } E_{fnt} < E_t < E_c \end{cases}, \quad (4.13-b)$$

$$\eta_R(E_t) = \begin{cases} 0 & \text{for } E_v < E_t < E_{fpt} \\ v_{TH} \frac{(np - n_i^2)\sigma_n \sigma_p}{n\sigma_n + p\sigma_p} & \text{for } E_{fpt} < E_t < E_{fnt} \\ 0 & \text{for } E_{fnt} < E_t < E_c \end{cases}. \quad (4.14)$$

Reemplazando las Ecuaciones (4.12) en (4.9) y utilizando las Ecuaciones (4.11) para definir la carga promedio,  $Q$ , en (4.10), se pueden evaluar la tasa de recombinación y la densidad de carga atrapada con la AST utilizando el modelo de DPM. Análogamente, reemplazando (4.14) en (4.9) y (4.13) en (4.10), se puede calcular  $R$  y  $\rho$  con la ASTOK utilizando el modelo de DPM.

## 4.2 Ajuste de las curvas experimentales

Al igual que en el capítulo anterior, para realizar una comparación válida entre los formalismos a analizar, se realizó como primer paso el ajuste de las mismas curvas experimentales J-V, pero ahora utilizando el modelo DPM en lugar de el UDM. Se ajustaron las curvas experimentales J-V de las estructuras p-i-n de a-Si:H con ancho de capa intrínseca de 200 nm y 600 nm, depositadas y caracterizadas en Department of Photovoltaic Materials and Devices de Delft University of Technology en Holanda. (ver Sección 3.2 del Capítulo 3)

Para el ajuste de las curvas corriente-tensión se implementó la expresión (4.1-a) dentro de la capa intrínseca y de la capa buffer. En las capas dopadas la densidad de DBs se asumieron uniformes espacialmente, pero el número de defectos que contienen las Gaussianas  $D^+$ ,  $D^0$  y  $D^-$  fueron evaluados utilizando el modelo de DPM según las ecuaciones propuestas por Powel and Deane [29]:

$$D^-(E_F) \sim \exp\left(\frac{E_F}{2E_D}\right), \quad (4.15-a)$$

$$D^+(E_F) \sim \exp\left(-\frac{E_F}{2E_D}\right). \quad (4.15-b)$$

De las Ecuaciones (4.15) se puede deducir que en un material tipo p, donde el nivel de Fermi está cercano a la banda de valencia, la densidad de defectos en  $D^+$  será mucho mayor que la densidad de defectos en  $D^-$ , mientras que en un material tipo n, donde el nivel de Fermi está cercano a la banda de conducción, se da el caso inverso. Por tanto, las expresiones de Powel and Deane cumplen con las relaciones siguientes:  $D^+ \gg D^0 \gg D^-$  en la capa p, y  $D^+ \ll D^0 \ll D^-$  en la capa n. En las capas dopadas las bandas son aproximadamente planas ya que se asumieron condiciones de contorno neutras en las interfaces entre los metales de los contactos y las capas dopadas. Para ser más refinados se puede extender la utilización de la expresión (4.1-a) dentro de las capas dopadas para abarcar las zonas de vaciamiento de pequeño espesor, vecinas a la capa intrínseca. Sin embargo, los resultados obtenidos al hacerlo fueron idénticos. Las capas dopadas se tratan diferentes de las internas para facilitar la convergencia del código.

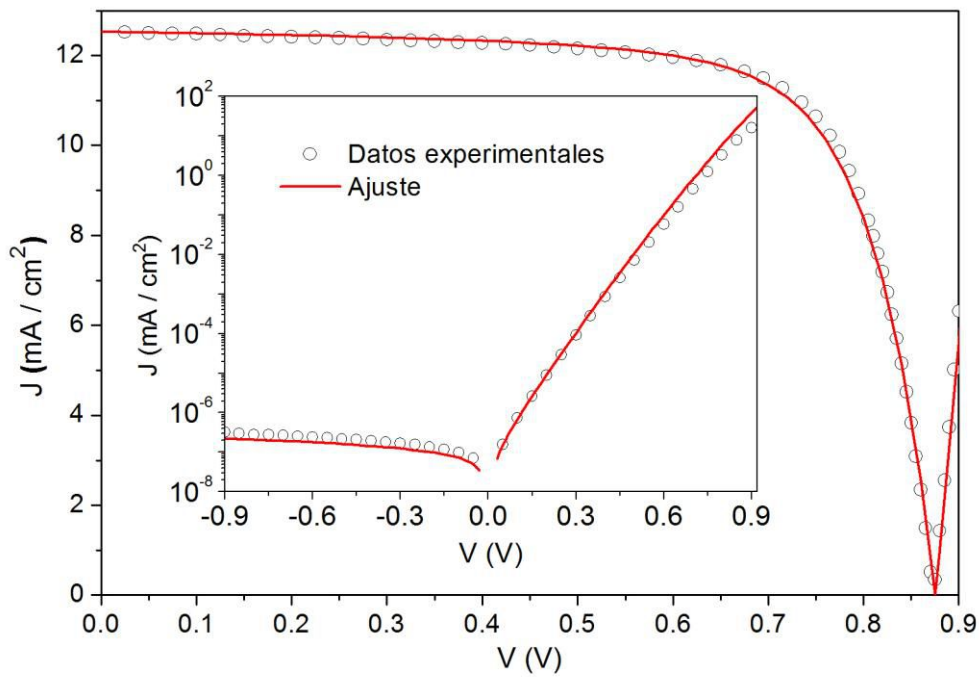
Los parámetros eléctricos se listan en la Tabla 4.1. La temperatura de congelamiento ("freezing") se fijó en 463K [61] y se adoptó  $10^{21} \text{ cm}^{-3}$  para la concentración de hidrógeno,  $H$ .

En las Figuras 4.1 y 4.2 se muestran los ajustes para las curvas características J-V a oscuras y bajo iluminación AM1.5 para las estructuras p-i-n con espesor de capa intrínseca de 200 nm y 600 nm. Las curvas a oscuras fueron medidas a 40°C y las curvas bajo iluminación a

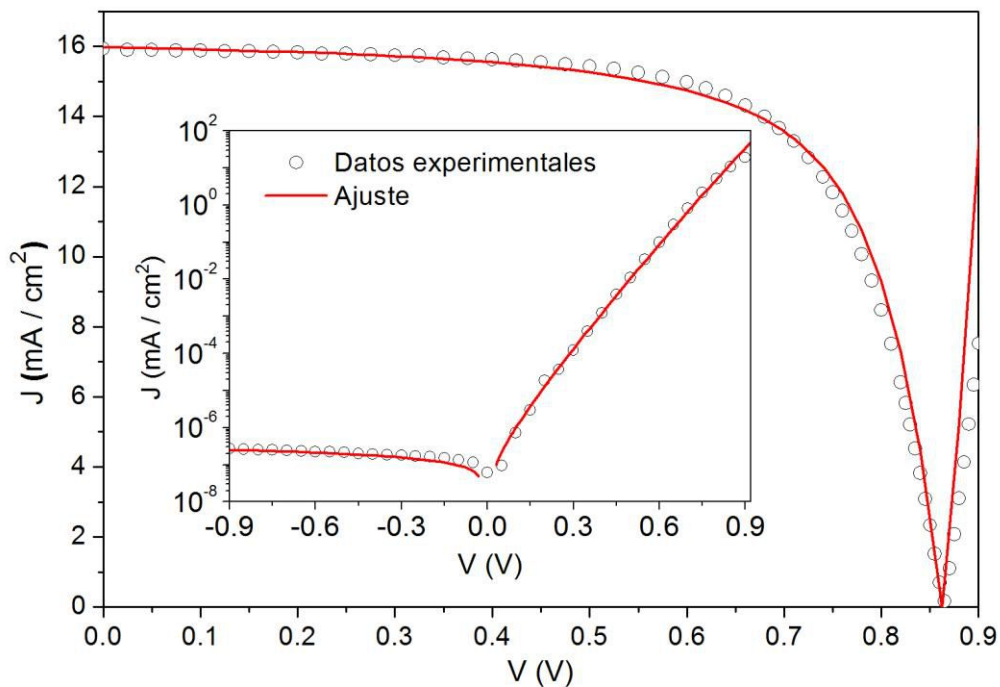
temperatura ambiente. Estos ajustes se realizaron utilizando el formalismo de DPM sin utilizar ninguna aproximación, es decir antes de aplicar AED o AST y ASTOK.

**Tabla 4.1:** Lista de parámetros eléctricos de entrada más relevantes en cada capa del dispositivo que resulta de los ajuste de las curvas características de juntas p-i-n de a-Si:H con el modelo de DPM. El significado de los símbolos es siguiente:  $W$  es el espesor de la capa,  $E_G$  es el gap de movilidad,  $N_c$  y  $N_v$  son la densidad efectiva de estados en las bandas de conducción y de valencia respectivamente,  $\mu_n$  y  $\mu_p$  son las movilidades de electrones y huecos,  $E_D$  y  $E_A$  son las pendientes de las colas de valencia y de conducción,  $t_n$  y  $t_p$  las sección eficaces de electrones y huecos en las colas,  $D$ ,  $D^0$  y  $D^+$  las densidades de estados encerradas en las tres gaussianas,  $E_{PG^-}$ ,  $E_{PG^0}$  y  $E_{PG^+}$  las posiciones (en energía) de los picos de las distribuciones gaussianas,  $\sigma_D$  son las desviaciones estándar,  $E_{DP}$  la energía más probable para de un defecto DB,  $\Delta_{DP}$  es el parámetro que se calcula con la Ecuación (4.1-e),  $\sigma_N$  and  $\sigma_P$  las secciones eficaces para electrones y huecos en los estados de los DB. Los superíndices +, 0 and - indican el estado de carga de las trampas.

Parámetro	p	i	n
$W$ (nm)	10	200 / 600	20
$E_G$ (eV)	1,9	1,72	1,72
$N_c, N_v$ (cm <sup>-3</sup> )	1x10 <sup>21</sup>	1x10 <sup>21</sup>	1x10 <sup>21</sup>
$\mu_n$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	5	20	5
$\mu_p$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	1	4	1
$E_D$ (meV)	80	44	50
$E_A$ (meV)	25	30	30
$t_n^+ t_p^-$ (cm <sup>2</sup> )	1x10 <sup>-15</sup>	1x10 <sup>-15</sup>	1x10 <sup>-15</sup>
$t_n^0 t_p^0$ (cm <sup>2</sup> )	1x10 <sup>-17</sup>	1x10 <sup>-17</sup>	1x10 <sup>-17</sup>
$D^-$ (cm <sup>-3</sup> )	3,04x10 <sup>12</sup>	-	6,78x10 <sup>18</sup>
$D^0$ (cm <sup>-3</sup> )	2x10 <sup>16</sup>	-	1,6x10 <sup>15</sup>
$D^+$ (cm <sup>-3</sup> )	5,25x10 <sup>18</sup>	-	1,51x10 <sup>12</sup>
$E_{PG^-}$ (eV)	0,7	-	0,6
$E_{PG^0}$ (eV)	1,0	-	0,9
$E_{PG^+}$ (eV)	1,3	-	1,2
$\sigma_D$ (eV)	0,13	-	0,13
$E_{DP}$ (eV)	-	1,03 / 1,1	-
$\Delta_{DP}$ (eV)	-	0,295	-
$\sigma_N^+ \sigma_P^-$ (cm <sup>2</sup> )	1x10 <sup>-14</sup>	3x10 <sup>-14</sup> / 1,2x10 <sup>-14</sup>	1x10 <sup>-14</sup>
$\sigma_N^0 \sigma_P^0$ (cm <sup>2</sup> )	2x10 <sup>-16</sup>	3x10 <sup>-15</sup> / 1,2x10 <sup>-15</sup>	2x10 <sup>-16</sup>



**Figure 4.1:** Ajuste de datos experimentales de las curvas  $J$ - $V$  a oscuras y bajo iluminación AM1.5 de una juntura p-i-n de a-Si:H con espesor de capa intrínseca de 200 nm utilizando el Modelo de Defect Pool.



**Figure 4.2:** Ajuste de datos experimentales de las curvas  $J$ - $V$  a oscuras y bajo iluminación AM1.5 de una juntura p-i-n de a-Si:H con espesor de capa intrínseca de 600 nm utilizando el Modelo de Defect Pool.

## 4.3 Resultados de la aplicación de las aproximaciones

### 4.3.1 Aproximación AED en el modelo de DPM

La validez de la AED en el DPM fue testada comparando los resultados obtenidos con D-AMPS en dispositivos de a-Si:H cuando la densidad de defectos se evalúa con el modelo de DPM y sus estados se modelan como anfotéricos, y cuando los mismos son aproximados por pares de estados desacoplados. Para verificar los alcances de la validez de la aproximación, los modelos se testaron en distintos escenarios y condiciones de operación: dispositivos con distintos espesores de capa intrínseca, con distintos gap de movilidad en la capa intrínseca, para diferentes intensidades de luz y a oscuras, para tensiones directas e inversas, etc.

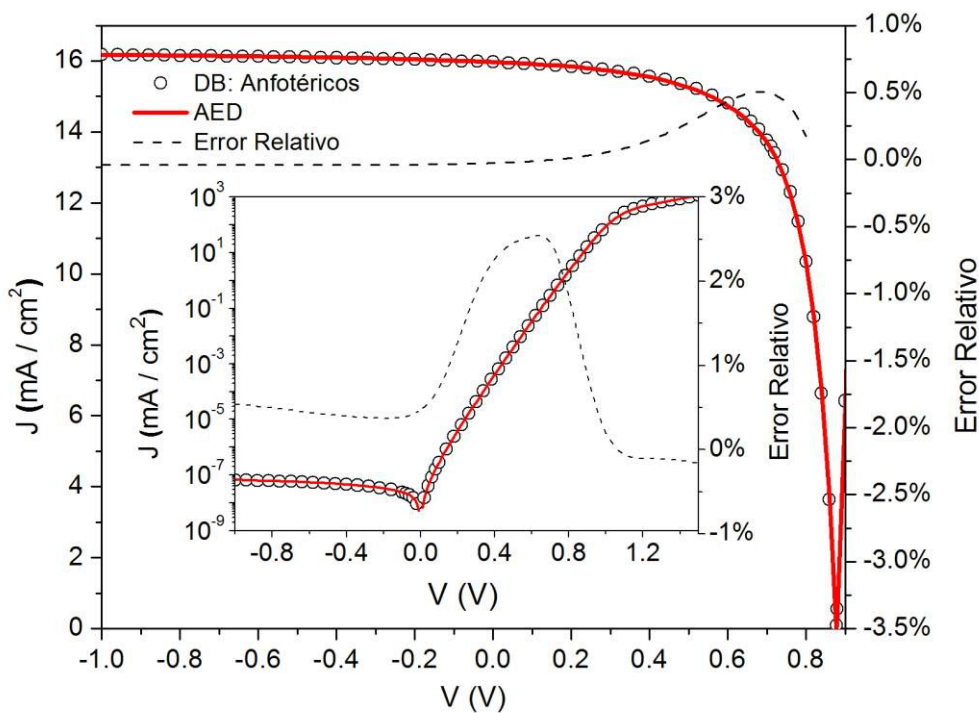
En la Figura 4.3 se comparan las curvas características J-V obtenidas con D-AMPS con el modelo de DPM cuando los estados de los DBs son modelados como anfotéricos y como desacoplados. Las simulaciones, se realizaron a temperatura ambiente para un dispositivo p-i-n de a-Si:H con espesor de capa intrínseca de 600 nm, similar al de la Figura 4.2 (los parámetros se listan en Tabla 4.1). Para cuantificar la diferencia entre los dos modelos se definió el error relativo  $\varepsilon_{ANF-AED}$  de manera similar al definido en el capítulo anterior:

$$\varepsilon_{ANF-AED} = 100 \frac{J_{ANF} - J_{AED}}{J_{ANF}}. \quad (4.16)$$

En los ejes ubicados ala derecha de ambas capas de la Figura 4.3 se muestra el error relativo.

Bajo condiciones de iluminación, tanto para tensiones inversas como para tensiones directas bajas ( $V < 0,3$  V), existen diferencias despreciables entre ambos modelos en el cálculo de la densidad de corriente. Para tensiones cercanas al punto de máxima potencia el error relativo aumenta levemente, lo que significa que el modelo DPM predice una menor densidad de corriente cuando los estados DBs son representan con la aproximación AED respecto a cuando lo hacen como anfotéricos. Esto es debido a la mayor recombinación que se obtiene con la AED [26] al desdoblar un estado anfotérico en dos simples, permitiéndose que el proceso tenga lugar, simultáneamente, a través de los estados donores y aceptores. Como puede observarse para el dispositivo de la Figura 4.3 el error relativo alcanza un valor máximo de 0,5%, mientras que en los demás dispositivos estudiados (temperaturas entre 250K y 400K, espesores de capa intrínseca entre 200 nm y 2000 nm, diferentes gaps de movilidad, etc.) el valor máximo se mantiene siempre por debajo del 1,5%.





**Figura 4.3:** Curvas  $J$ - $V$  bajo condiciones de iluminación AM1.5 y a oscuras obtenidas con D-AMPS para un dispositivo p-i-n de a-Si:H a temperatura ambiente utilizando el modelo de DPM representando los estados de los DBs como anfotéricos y desacoplados (AED). El espesor de la capa intrínseca es de 600 nm.

Para condiciones de oscuridad, tanto para tensiones inversas como para tensiones directas bajas ( $V < 0,2$  V), la AED predice similares densidades de corriente que el modelo de estados anfotéricos, con errores relativos siempre por debajo de 1,5%. Para tensiones mayores, pero por debajo de la rodilla de la curva, la diferencia entre los modelos se acentúa en todos los dispositivos analizados. En el dispositivo de la Figura 4.3 el  $\epsilon_{ANF-AED}$  alcanza un valor de 2,5%, mientras que en un dispositivo p-i-n con espesor de capa intrínseca de 2000 nm a temperatura ambiente el error asciende hasta el 8%. Estas diferencias son provocadas por la sobreestimación de la carga atrapada dentro de la capa intrínseca que se obtiene con la AED. Esta aproximación “empuja” a los niveles de Fermi hacia el centro del gap, subestimando así la tasa recombinación y las concentraciones de las cargas libres [26]. La comparación de los modelos en un dispositivo con capa intrínseca ancha (2000 nm) fue realizado intencionalmente, porque el campo eléctrico es más débil dentro de la capa intrínseca y la simulación se torna más sensible a los formalismos adoptados.

Cuando el gap de la capa intrínseca es menor, como por ejemplo de 1,53 eV, escenario que corresponde a un dispositivo p-i-n de a-SiGe:H, el error relativo que se obtiene bajo condiciones de iluminación muestra signo opuesto, es decir, la densidad de corriente calculada

con la aproximación AED es mayor que la que se obtiene para estados anfotéricos ( $\varepsilon_{ANF-AED} = -7\%$  como máximo). Para dispositivos con estos valores de gap de movilidad en la capa intrínseca, la sobreestimación de la tasa de recombinación obtenida con AED no modifica significativamente las concentraciones de las cargas libres, como sí ocurre cuando el gap de movilidad es de 1,72 eV, y por lo tanto el resultado final es simplemente la subestimación de la densidad de corriente por existir mayor recombinación.

Para condiciones de oscuridad y tensiones directas, el  $\varepsilon_{ANF-AED}$  muestra cierta dependencia respecto a la temperatura: a mayor temperatura, mayor es el error relativo. Para un dispositivo p-i-n de a-Si:H con espesor de capa intrínseca de 600 nm, el valor máximo de  $\varepsilon_{ANF-AED}$  crece del 2% al 5% cuando se opera a 250K y a 400K respectivamente. Esta diferencia se da a tensiones bajas donde la corriente es controlada por recombinación. A tensiones directas más altas, donde no solo la recombinación determina la corriente, el error relativo es menor y la dependencia con la temperatura disminuye.

### 4.3.2 AST en el modelo de DPM adaptado con la aproximación AED

Las AST y AST0K aplicadas al DPM fueron testeadas comparando las curvas características J-V predichas con el uso simultáneo de ambas aproximaciones con las curvas J-V obtenidas con el formalismo de SRH sin aproximaciones. Los modelos fueron evaluados en los mismos escenarios y condiciones que se describieron en el apartado anterior. Como se mencionó previamente, la aproximación AST fue concebida para dispositivos que trabajan con tensiones directas, sin embargo resulta interesante chequear también su comportamiento para tensiones inversas, modo de operación de los detectores ópticos. Para testear la AST se compararon los modelos AED y AST, ambos aplicados al modelo de DPM, dentro del rango de tensiones comprendidas entre -1 V y 1,5 V. Para la AST0K, bajo condiciones de iluminación se utilizó el mismo rango de tensiones, mientras que para condiciones de oscuridad la AST0K fue testada únicamente para tensiones directas, ya que, como se expuso en la Sección 3.3.2, para tensiones inversas y a oscuras la aproximación AST0K pierde validez.

Los errores relativos  $\varepsilon_{AED-AST}$  y  $\varepsilon_{AED-AST0K}$  se definieron de manera similar al error  $\varepsilon_{ANF-AED}$  (Ecuación 4.16):

$$\varepsilon_{AED-AST} = 100 \frac{J_{AED} - J_{AST}}{J_{AED}}, \quad (4.17-a)$$

$$\varepsilon_{AED-AST0K} = 100 \frac{J_{AED} - J_{AST0K}}{J_{AED}}. \quad (4.17-b)$$

También resulta interesante analizar el error relativo cuando se utilizan simultáneamente las dos aproximaciones AED y AST, el cual se calcula como:

$$\varepsilon_{ANF-AST} = 100 \frac{J_{ANF} - J_{AST}}{J_{ANF}}, \quad (4.18-a)$$

$$\varepsilon_{ANF-ASTOK} = 100 \frac{J_{ANF} - J_{ASTOK}}{J_{ANF}}. \quad (4.18-b)$$

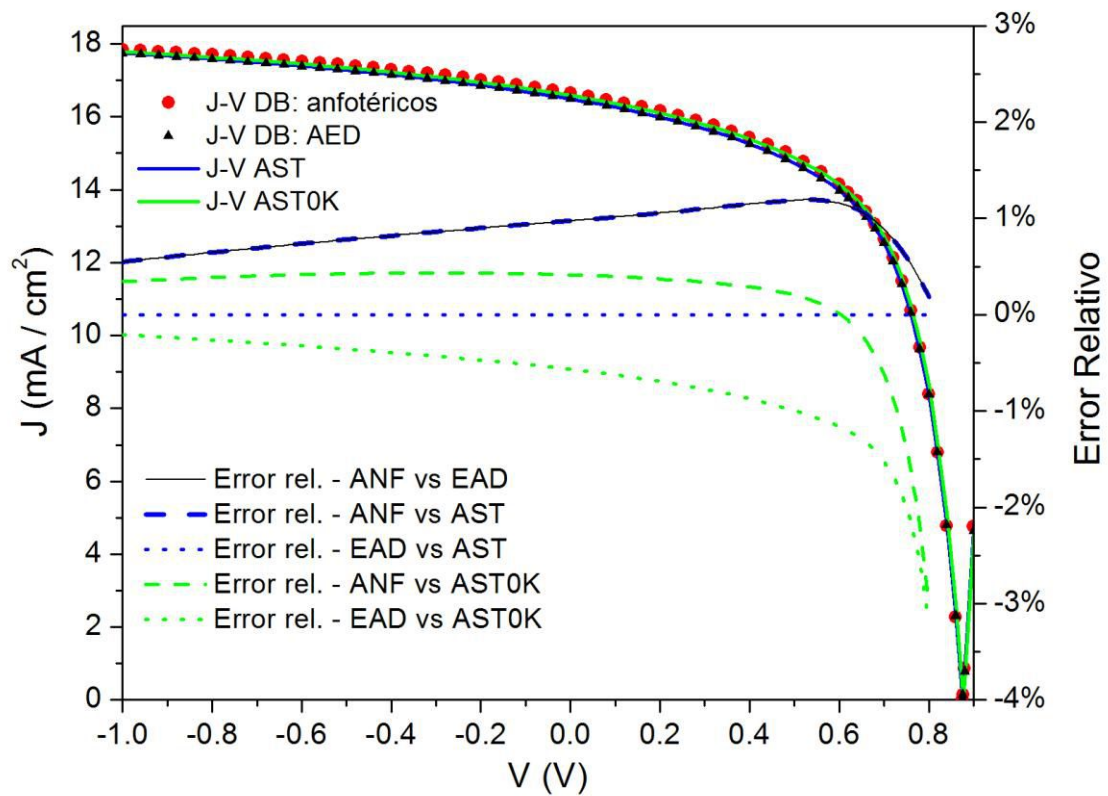
Los errores definidos en las Ecuaciones (4.16), (4.17) y (4.18) se pueden relacionar aproximadamente como (estrictamente, los denominadores de las Ecuaciones (4.16) y (4.17) son distintos):

$$\varepsilon_{ANF-AST} \approx \varepsilon_{ANF-AED} + \varepsilon_{AED-AST}, \quad (4.19-a)$$

$$\varepsilon_{ANF-ASTOK} \approx \varepsilon_{ANF-AED} + \varepsilon_{AED-ASTOK}. \quad (4.19-b)$$

En el peor escenario los errores relativos  $\varepsilon_{ANF-AED}$  y  $\varepsilon_{AED-AST}$  ( $\varepsilon_{ANF-AED}$  y  $\varepsilon_{AED-ASTOK}$ ) se suman, pero pueden presentarse situaciones en donde se dé una compensación de errores resultando el error total,  $\varepsilon_{ANF-AST}$  ( $\varepsilon_{ANF-ASTOK}$ ), menor que la suma de los valores absolutos de los errores definidos en (4.16) y (4.17).

En las Figuras 4.4 y 4.5, se muestran las curvas J-V bajo condiciones de iluminación AM1.5 y de oscuridad, respectivamente, de un dispositivo p-i-n de a-Si:H similar al de la Figura 4.2 (utilizando los parámetros de la Tabla 4.1). En este caso, el espesor de la capa intrínseca se incrementó a 2000 nm. Se grafican las curvas para cuatro casos diferentes: con DBs representados con estados anfotéricos (ANF), con DBs representados por estados desacoplados (AED), con DBs y estados de cola aproximados por la AST según las Ecuaciones (4.11) y (4.12) y con DBs y estados de cola aproximados con la ASTOK según las Ecuaciones (4.13) y (4.14) (se sobre-entiende que se utilizó el modelo de DPM para evaluar la densidad de DBs). En los primeros dos casos los estados de cola están modelados con el formalismo de SRH, o sea sin aproximaciones. También se muestran los errores relativos definidos en (4.16), (4.17) y (4.18), que en la Figura 4.4 se calculan para tensiones menores a 0,82 V. Muy cerca del  $V_{oc}$  el error relativo puede tomar valores muy grandes, pero carentes de sentido, debido a que la densidad de corriente se vuelve muy pequeña cerca de  $V_{oc}$ . La diferencia en la tensión que los distintos modelos predicen para el  $V_{oc}$  es menor a 0,004 V.



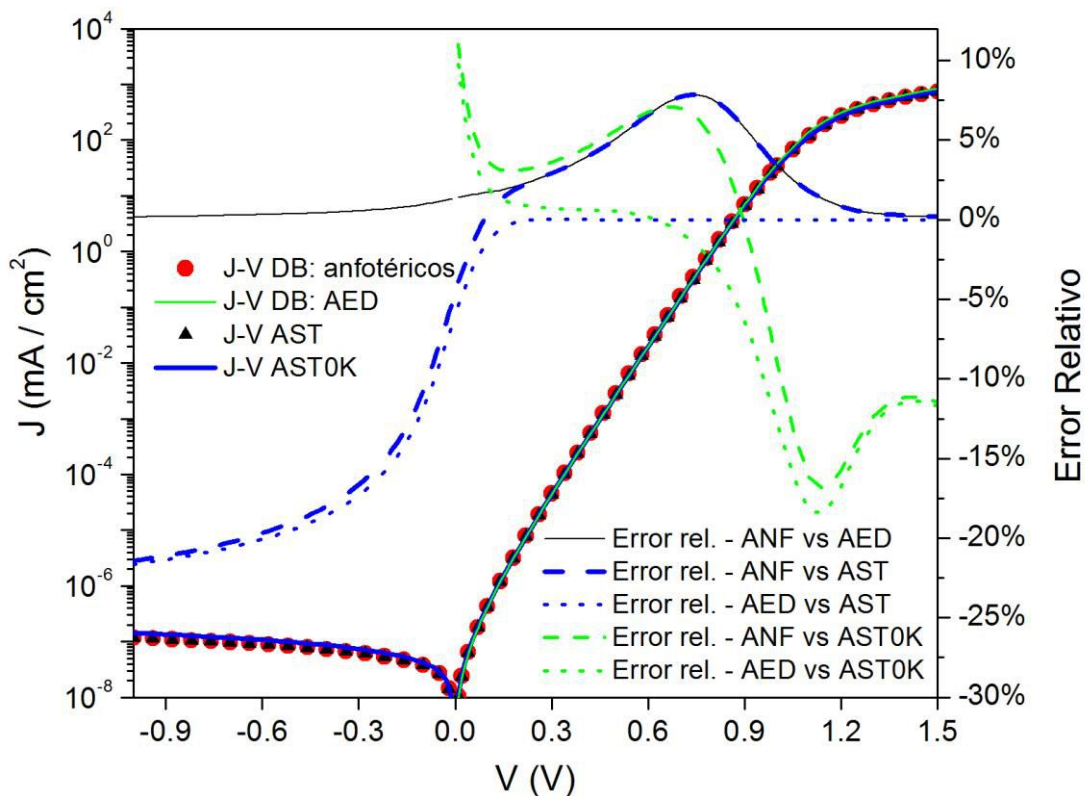
**Figura 4.4:** Curvas J-V bajo condiciones de iluminación AM1.5 obtenidas con D-AMPS para un dispositivo p-i-n de a-Si:H a temperatura ambiente utilizando los formalismos de ANF, AED, AST y AST0K. El espesor de la capa intrínseca es de 2000 nm.

En un dispositivo p-i-n de a-Si:H bajo condiciones de iluminación, tanto para tensiones inversas como para tensiones directas la AST reproduce exactamente los resultados obtenidos con AED. En la Figura 4.4 las curvas J-V de la AED y de la AST se ubican una encima de la otra y el error relativo es siempre menor al 0,001% en todo el rango de tensiones analizado. Este resultado es esperado, ya que bajo condiciones de iluminación los cuasi niveles de Fermi para carga atrapada se alejan del nivel  $E_{T0}$ , lo que garantiza la exactitud de la aproximación [66]. Por lo tanto en este escenario los errores relativos  $\epsilon_{ANF-AED}$  y  $\epsilon_{ANF-AST}$  son muy similares. En otras palabras, el error en el que incurre la AST cuando la densidad de DBs es modelada con el DPM, está dada por la aproximación de estados desacoplados AED. En dispositivos con menor gap de movilidad en la capa intrínseca, como los de a-SiGe:H, los resultados obtenidos son similares.

Bajo condiciones de oscuridad y tensiones directas, la AST muestra una pequeña diferencia con la AED, como se puede observar en la Figura 4.5. Únicamente para tensiones directas muy pequeñas, es decir cerca de las condiciones de equilibrio termodinámico, el  $\epsilon_{AED-AST}$  alcanza valores significativos (entre -4% y -7% para los dispositivos y condiciones estudiadas).

En este régimen la densidad de corriente es controlada por la recombinación [67]. Para este escenario los cuasi niveles de Fermi para carga atrapada se acercan mucho al nivel de carga intrínseco y la AST pierde su exactitud como sucedía con el modelo de UDM.

Resulta interesante destacar que para condiciones de oscuridad los errores relativos  $\varepsilon_{AED-AST}$  y  $\varepsilon_{ANF-AED}$  tienen signos opuestos. Mientras el formalismo AED tiende a subestimar la tasa de recombinación [26], la aproximación AST tiende a sobreestimarla [66], lo cual da lugar a un efecto de compensación en el error relativo total,  $\varepsilon_{ANF-AST}$  cuando la AED y la AST son aplicadas simultáneamente (ver Ecuación 4.19). Incluso, cuando al dispositivo se le aplica tensión directa mayores a 0,05 V, el error  $\varepsilon_{ANF-AST}$  es siempre menor, en valor absoluto, que  $\varepsilon_{ANF-AED}$  (ver Figura 4.5). En consecuencia, y a diferencia de lo esperado, en condiciones de oscuridad y para tensiones directas (mayores a 0,05 V) la AED y la AST utilizadas simultáneamente dan lugar a una mejor aproximación que empleando solamente la AED. Esta diferencia es significativa para tensiones directas por debajo de 0,2 V - 0,3 V. Para tensiones mayores la diferencia se vuelve prácticamente despreciable.



**Figura 4.5:** Curvas J-V bajo condiciones de oscuridad obtenidas con D-AMPS para un dispositivo p-i-n de a-Si:H utilizando los formalismos ANF, AED, AST y AST0K. El espesor de la capa intrínseca es de 2000 nm y la temperatura de operación de 310 K.

Bajo condiciones de oscuridad y aplicando una tensión inversa al dispositivo, la AST muestra discrepancias significativas respecto del formalismo AED. En este escenario, la densidad de corriente es controlada por la generación térmica de pares e-h [69]. La posición en energía de los cuasi niveles de Fermi,  $E_{fn}$  y  $E_{fp}$ , se invierten respecto de los obtenidos a tensión directa, es decir, el cuasi-nivel de Fermi de electrones  $E_{fn}$  se ubica por debajo del nivel de carga intrínseco,  $E_{T0}$ , y el cuasi-nivel de Fermi de huecos  $E_{fp}$  se ubica por encima del mismo. Dentro de la región de la capa intrínseca donde tiene lugar la generación térmica, el cuasi nivel de Fermi para electrones atrapados también queda por debajo del cuasi nivel de Fermi para huecos atrapados. La aplicación de la AST conlleva a desprestigiar la emisión de electrones hacia la banda de conducción en los estados energéticos ubicados por debajo del  $E_{T0}$ , debido a que AST desprestigia ese coeficiente de emisión. Análogamente se desprestigia la emisión de huecos hacia la banda de valencia para niveles de energía por encima de  $E_{T0}$ . La inversión de los cuasi-niveles de Fermi de portadores atrapados,  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ , provoca que la aplicación de la AST sea cuestionable en estas condiciones [30]. Igualmente, la AST es todavía capaz de reproducir correctamente la forma de la curva  $J-V$  a tensiones inversas (ver Figura 4.5), sobreestimando la corriente en no más de 25% en todos los dispositivos y escenarios aquí estudiados.

Para dispositivos p-i-n con menor gap de movilidad en la capa intrínseca, como los de a-SiGe:H, que operan bajo condiciones de oscuridad tanto en tensión directa como en inversa, ambos errores,  $\varepsilon_{AED-AST}$  y  $\varepsilon_{ANF-AED}$ , tienen el mismo signo. A diferencia de lo que sucedía en las junturas p-i-n de a-Si:H, ambas aproximaciones tienden a subestimar la tasa de recombinación, por lo tanto no existe efecto de compensación, sino que los errores al aplicar la AED y la AST se suman uno al otro.

Las diferencias en las curvas  $J-V$  obtenidas con AED y AST son independientes de la temperatura. El error relativo  $\varepsilon_{AED-AST}$  no muestra sensibilidad alguna respecto de la temperatura en un rango entre 250 K y 400 K. Por otro lado el  $\varepsilon_{AED-AST}$  cambia con la temperatura debido al error introducido por la AED.

En cuanto a la intensidad de iluminación, tanto para tensiones directas como inversas, los errores relativos  $\varepsilon_{AED-AST}$  y  $\varepsilon_{ANF-AST}$  son bastante independientes del flujo de luz incidente para intensidades por encima de  $8 \times 10^{10}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s. Por debajo de ese valor el error comienza a aumentar tendiendo hacia el comportamiento que muestra el dispositivo en condiciones de oscuridad. Para intensidades de luz menores a  $8 \times 10^8$  fotones/cm<sup>2</sup>/s y tensiones inversas aplicadas el error introducido por la AST se aparta ya significativamente del error introducido por la AED volviéndose más elevado, con errores relativos que superan el 15%.

### 4.3.3 La aproximación ASTOK en el modelo de DPM adaptado con la AED

La aplicación de la aproximación ASTOK da lugar también a la generación de resultados interesantes. Bajo condiciones de iluminación tanto para tensiones directas como inversas, ocurre un efecto de compensación de los errores introducidos por las aproximaciones AED y ASTOK. Bajo estas condiciones, la AED tiende a sobreestimar la tasa de recombinación mientras que la ASTOK tiende a subestimarla. Esto provoca que cuando se aplican ambas aproximaciones simultáneamente, la pérdida de densidad de corriente por recombinación sea menor que cuando se aplica únicamente la aproximación AED. Para tensiones entre -1 V y 0,6 V, los errores  $\varepsilon_{AED-ASTOK}$  y  $\varepsilon_{ANF-AED}$  varían aproximadamente en forma lineal y con valores absolutos similares, pero con signo contrario (ver Figura 4.4), haciendo que el error global cuando se aplican ambas sea cercano a cero y siempre menor al error cometido cuando se aplica únicamente la aproximación AED. De hecho, el error  $\varepsilon_{ANF-ASTOK}$  es siempre menor, en valor absoluto, a 0,5% para cualquier tensión aplicada por debajo del punto de máxima potencia, mientras que el  $\varepsilon_{ANF-AED}$  y el  $\varepsilon_{AED-ASTOK}$  alcanzan valores cercanos a 1% y a -1,5%.

Los dispositivos con capa intrínseca de a-SiGe:H muestran un comportamiento diferente. Bajo condiciones de iluminación y tensiones inversas, los errores  $\varepsilon_{AED-ASTOK}$  y  $\varepsilon_{ANF-AED}$  se mantienen cercanos al 0%. Para tensiones directas la aproximación ASTOK predice mayores densidades de corriente en comparación con aproximación AED. El error  $\varepsilon_{AED-ASTOK}$  se incrementa en valor absoluto a medida que la tensión aplicada es mayor, alcanzando valores cercanos al -25% para voltajes cercanos y por encima del punto de máxima potencia. Como es de esperar, cuando la tensión directa se acerca al  $V_{oc}$  el error relativo toma valores muy grandes debido a que las densidades de corriente en esas tensiones son muy pequeñas. En la aproximación ASTOK el proceso de recombinación se contabiliza únicamente en los estados energéticos del gap que se encuentran entre los cuasi niveles de Fermi para carga atrapada, mientras que la recombinación que tiene lugar en los estados del gap fuera de ese rango de energía son despreciados (ver Ecuación 4.14). En dispositivos p-i-n con gap de capa intrínseca bajos los estados de energía que se encuentran cerca de los bordes de banda (y por fuera del rango  $[E_{fpt}, E_{fnt}]$ ) no están tan alejados en energía del nivel  $E_{T0}$  como sucede en dispositivos con gap más grande, y por lo tanto la recombinación que se da en esos estados no es despreciable. En consecuencia, la ASTOK tiende a subestimar la recombinación en este tipo de dispositivos debido a que desprecia el aporte de esos estados energéticos. Cuando la tensión aplicada se incrementa el perfil de los bordes de banda se aplane y la intensidad del campo eléctrico disminuye. Este escenario favorece la recombinación dentro del gap, especialmente en los estados más alejados de  $E_{T0}$ , por lo que el error relativo se incrementa.

Bajo condiciones de oscuridad y aplicando tensiones inversas al dispositivo, la aproximación ASTOK no puede ser utilizada a partir de las Ecuaciones (4.13) y (4.14) ya que en esas circunstancias los cuasi niveles de Fermi para carga atrapada se invierten y las ecuaciones pierden su validez. En el capítulo siguiente se presenta una formulación alternativa de la aproximación ASTOK para poder abordar este escenario.

Bajo condiciones de oscuridad y aplicando tensiones directas al dispositivo, pero no cercanas al equilibrio termodinámico ( $V > 0,05$  V), la aproximación ASTOK arroja niveles de error aceptables ( $\epsilon_{AED-ASTOK} < |8|\%$ ) para temperaturas entre 250 K y 350 K, en junturas p-i-n con espesores de capa intrínseca menores a 800 nm. Sin embargo, para espesores mayores el error aumenta en forma considerable cuando se incrementa la tensión aplicada ( $V > 0,8$  V). En la Figura 4.5 se observa que para tensiones directas menores a 0,7 V (no cercanas al equilibrio termodinámico) la aproximación ASTOK aplicada a un dispositivo p-i-n con espesor de capa intrínseca de 2000 nm que se encuentra operando a temperatura ambiente, predice, respecto al modelo AED, densidades de corriente levemente menores ( $0\% < \epsilon_{AED-ASTOK} < 1\%$ ). Esta pequeña diferencia se debe a la subestimación de la tasa de recombinación que, para estas condiciones, predice la aproximación ASTOK como se explicó anteriormente.

Para tensiones más elevadas, en cambio, la ASTOK sobreestima la densidad de corriente con errores relativos respecto a la aproximación AED que alcanzan valores cercanos al -19% para dispositivos p-i-n con espesor de capa intrínseca de 2000 nm. Las diferencias más significativas se observan para voltajes de entre 0,8 V y 1,3 V donde el campo eléctrico es pequeño. El campo eléctrico es débil en ese rango debido a que cuando se incrementa la tensión directa aplicada a un dispositivo p-i-n a oscuras, para cierto valor de tensión el campo eléctrico cambia de dirección, es decir, las bandas pasan por la condición de bandas planas. Para el dispositivo de la Figura 4.5, esto ocurre dentro del rango de tensiones (0,8 V - 1,3 V). A esto se le suma el hecho de que a mayor espesor de capa intrínseca, el campo eléctrico es más débil. El proceso de recombinación se favorece cuando el campo eléctrico está debilitado y la aproximación ASTOK tiende a sobreestimar la recombinación en este escenario. Si bien por un lado la aproximación ASTOK desprecia la recombinación que se produce en los estados del gap por fuera de los niveles  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ , por otro lado tiende a sobreestimar la eficiencia de recombinación dentro de estos niveles, ya que la asume constante en ese rango de energía e igual al valor máximo que alcanza con el formalismo SRH (ver Ecuación 4.14 y Figura 3.2). Estas tendencias se observan en dispositivos p-i-n de a-Si:H que poseen gap de movilidad de capa intrínseca mayores que los de a-SiGe:H. Por otra parte, la aproximación ASTOK predice una menor carga atrapada en comparación con la aproximación AED cuando el campo eléctrico es pequeño. Esta disminución de carga atrapada tiende a atenuar la curvatura de las bandas en la



capa intrínseca cerca de la interface. Esto, facilita aún más la inyección de portadores libres dentro de la capa  $i$ , lo cual da lugar a un aumento extra de la tasa de recombinación. El resultado final de estas dos tendencias provoca que, en el rango de tensiones mencionado, el modelo de DPM calcule una densidad de corriente mayor cuando se aplica AST0K respecto a cuando sólo se aplica la AED. Si bien cuando los errores relativos  $\varepsilon_{ANF-AED}$  y  $\varepsilon_{AED-AST0K}$  tienen signo opuesto, este último es considerablemente mayor al primero, por lo que en este escenario no se produce el efecto de compensación y disminución del error relativo global al aplicar ambas aproximaciones.

Bajo condiciones de oscuridad y tensiones directas aplicadas, el error que introduce la aproximación AST0K, a diferencia de la aproximación AST, es sensible a la temperatura, siendo  $\varepsilon_{AED-AST0K}$  mayor cuando mayor es la temperatura. Por ejemplo, en un dispositivo p-i-n de a-Si:H de 600 nm de espesor de capa intrínseca el valor máximo de  $\varepsilon_{AED-AST0K}$  a  $T = 250$  K es de 0,5%, mientras que para  $T = 400$  K el valor del error relativo asciende a 12%. Esta diferencia se observa a tensiones bajas donde la corriente es controlada por la recombinación, que bajo estas condiciones, es subestimada por la aproximación AST0K. A temperaturas elevadas, la contribución para el cálculo de la recombinación de los estados del gap que se ubican fuera de los niveles  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ , deja de ser despreciable en contradicción con la suposición hecha en la AST0K (ver Ecuación 4.14).

Respecto de la dependencia de  $\varepsilon_{AED-AST0K}$  con la intensidad de luz, la aproximación AST0K es bastante aceptable para flujos mayores a  $8 \times 10^{11}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s ( $\varepsilon_{AED-AST0K} < 1\%$ ). En cambio, para intensidades menores a  $8 \times 10^9$  fotones/cm<sup>2</sup>/s el error  $\varepsilon_{AED-AST0K}$  adopta valores del orden del 20%.

## 4.4 Conclusiones

La Aproximación de Simmons-Taylor (AST) puede ser utilizada en dispositivos de película delgada de a-Si:H y sus aleaciones cuando la densidad de DBs es modelada con el modelo de Defect Pool (DPM). Cuando se evalúan la recombinación y la carga atrapada, la naturaleza anfotérica de los DBs debe ser aproximada por dos estados simples, uno donador y otro aceptor (aproximación AED), a los efectos de poder testear la aproximación AST. Las curvas J-V bajo condiciones de iluminación tanto para tensiones directas como para tensiones inversas pueden ser reproducidas con gran exactitud utilizando la aproximación AST mientras la intensidad de luz no sea menor a  $8 \times 10^{10}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s. El valor del error relativo introducido por aproximar los estados anfotéricos como estados desacoplados no supera el 1%. Las mismas conclusiones son válidas para las curvas de SR.

Para condiciones de oscuridad y tensión directa, el desempeño de la aproximación AST también es satisfactorio. En dispositivos de a-Si:H para tensiones mayores a 0,05 V el error que introducen el uso combinado de las aproximaciones AST y AED es menor que el error en el que incurre la implementación de sólo la aproximación AED. Esto se debe al efecto de compensación que ocurre entre los errores introducidos por ambas aproximaciones en el cálculo de la recombinación. En dispositivos de a-SiGe:H, también se obtienen buenos resultados con la aproximación AST, aunque no se produce el efecto de compensación de errores observado en los dispositivos de a-Si:H. Para condiciones de oscuridad y tensiones inversas la aproximación AST reproduce la forma de la curva J-V, pero sobreestima la densidad de corriente con valores de error relativo que alcanzan el 25% respecto del modelo de estados anfotéricos. Para diferentes temperaturas en un rango de 250 K y 400 K los resultados son similares con mínimas diferencias. Para dispositivos p-i-n con espesor de capa intrínseca mayores (hasta 2000 nm) los errores aumentan, pero siguen siendo aceptables.

La aproximación Simmons-Taylor 0K (AST0K) es también una herramienta útil para simplificar el modelado y el análisis de dispositivos basados en semiconductores amorfos, pero se deben tener en cuenta algunas particularidades. Para dispositivos de a-Si:H bajo condiciones de iluminación AM1.5 la utilización de la aproximación genera errores despreciables para cualquier tensión aplicada menor a la tensión de máxima potencia. Para dispositivos de a-SiGe:H, estos errores sufren un leve incremento, pero se mantienen en niveles más que aceptables (< 1%). En dispositivos de a-Si:H se observa nuevamente el efecto de compensación de errores, y tomando como referencia las curvas J-V obtenidas con el modelo de estados anfotéricos, las curvas J-V calculadas al aplicar simultáneamente las aproximaciones AED y AST0K son más exactas que las curvas J-V obtenidas cuando se aplica únicamente la aproximación AED. Para niveles de iluminación bajos, la aproximación AST0K tiene un comportamiento aceptable para intensidades por encima de  $8 \times 10^{11}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s.

Para condiciones de oscuridad y tensión directa aplicada la AST0K mantiene un buen desempeño en dispositivos p-i-n con espesor de capa intrínseca menores a 800 nm y gaps de movilidad iguales a 1,72 eV o mayores, en un rango de temperatura de operación entre 250 K y 350 K. La aproximación AST0K no puede ser aplicada en dispositivos bajo condiciones de oscuridad y tensión inversa aplicada.

## Capítulo 5

# Método simplificado para la evaluación de curvas corriente-tensión de dispositivos de película delgada bajo condiciones de oscuridad y tensiones inversas

En los Capítulos 3 y 4 se estudiaron los alcances de la aproximación presentada por Simmons-Taylor AST y ASTOK como simplificación al formalismo de Shockley-Read-Hall (SRH) para describir los procesos de recombinación y carga atrapada en dispositivos de a-Si:H y de  $\mu\text{-Si:H}$  utilizando el modelo de densidad uniforme (UDM) y el modelo de Defect Pool (DPM) sólo en las estructuras de a-Si:H. En ambos casos las curvas características de J-V calculadas con las aproximaciones AST y ASTOK se compararon con las curvas J-V obtenidas con el formalismo de SRH que se adoptaron como referencia. Las curvas J-V se compararon bajo condiciones de oscuridad e iluminación, para tensiones directas e inversas, a diferentes temperaturas de operación, en dispositivos p-i-n con capas intrínsecas delgadas y anchas y para diferentes valores de parámetros eléctricos claves. Nuestros resultados indicaron que la AST es una muy buena aproximación para dispositivos p-i-n que operan bajo iluminación para cualquier tensión aplicada. Bajo condiciones de oscuridad la aproximación AST es válida para tensiones directas, y muestra una sobreestimación de la densidad de corriente en dispositivos p-i-n cuando se les aplica una tensión inversa, pero reproduce la dependencia correcta entre J y V. La ASTOK también es una buena aproximación bajo condiciones de iluminación y oscuridad, pero en este último caso solo es aplicable para tensiones directas. La aproximación ASTOK no puede utilizarse en dispositivos de película delgada que operan a oscuras y bajo tensiones inversas.

En este capítulo se presenta una novedosa aproximación que permite simplificarla evaluación de las curvas características J-V de dispositivos de a-Si:H y de  $\mu\text{-Si:H}$  cuando operan a oscuras y con una tensión inversa aplicada. El presente método se denominó con las siglas

ARDOK (el significado de las siglas se explica más adelante) y fue concebido para reemplazar a la ASTOK cuando no es aplicable. Al igual que las aproximaciones de Simmons-Taylor, la ARDOK fue derivada para estados simples, ya sean donores o aceptores, es decir, los estados de defectos se modelan como trampas simplemente ocupadas hasta un máximo de un electrón. La aproximación ARDOK, como las aproximaciones anteriores, puede ser utilizada cuando la densidad de DBs es modelada tanto con el DPM como con el UDM. En el primer caso debe utilizarse la aproximación AED como paso previo para poder aplicarla.

El método que se presenta en este capítulo permite visualizar de manera más simple la física de transporte que controla la curva característica  $J$ - $V$  de dispositivos de película delgada que operan en condiciones de oscuridad y bajo una tensión inversa aplicada.

## 5.1 Aproximación ARDOK: Método simplificado para evaluar las curvas $J$ - $V$ bajo condiciones de oscuridad y con una tensión inversa aplicada

A modo de facilitar la lectura del presente capítulo, que contiene el desarrollo del nuevo método, se reescriben algunas ecuaciones presentadas en los capítulos anteriores.

Las expresiones de las funciones de ocupación de electrones y huecos,  $f_n$  y  $f_p$  ( $1-f_n$ ) y de la eficiencia de recombinación,  $\eta_R$ , para el formalismo de SRH fueron derivadas en la Sección 2.3.1 del Capítulo 2, obteniéndose:

$$f_n(E_t) = \frac{c_n + e_p(E_t)}{c_n + c_p + e_n(E_t) + e_p(E_t)}, \quad (5.1-a)$$

$$f_p(E_t) = 1 - f_n(E_t) = \frac{c_p + e_n(E_t)}{c_n + c_p + e_n(E_t) + e_p(E_t)}, \quad (5.1-b)$$

$$\eta_R(E_t) = v_{th}^2 \sigma_n \sigma_p \frac{np - n_i^2}{c_n + c_p + e_n(E_t) + e_p(E_t)}, \quad (5.1-c)$$

donde  $c_n$  y  $c_p$  son los coeficientes de capturas de electrones y huecos respectivamente y  $e_n$  y  $e_p$  los coeficientes de emisión de electrones y huecos. Los coeficientes  $c_n$ ,  $c_p$ ,  $e_n$  y  $e_p$ , a su vez, vienen dados por las siguientes expresiones:

$$e_n(E_t) = v_{th} \sigma_n N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{kT}\right), \quad (5.1-d)$$

$$e_p(E_t) = v_{th} \sigma_p N_v \exp\left(\frac{E_v - E_t}{kT}\right), \quad (5.1-e)$$

$$c_n = nv_{th}\sigma_n , \quad (5.1-f)$$

$$c_p = pv_{th}\sigma_p . \quad (5.1-g)$$

En las Ecuaciones (5.1)  $E_t$  representa la posición en energía del estado dentro del gap,  $n$  y  $p$  son las concentraciones de electrones y huecos libres respectivamente,  $\sigma_n$  y  $\sigma_p$  son las secciones eficaces de captura para electrones y huecos,  $v_{TH}$  es la velocidad térmica y  $n_i$  representa la concentración intrínseca de portadores [46]. Al igual que en los capítulos anteriores, tanto los coeficientes de emisión como las secciones eficaces de captura se expresan en forma genérica, sin especificar el estado de carga de las trampas, a los efectos de que las ecuaciones sean válidas tanto para los estados donores como para los estados aceptores.

Se define adicionalmente el coeficiente  $c_s$  como la suma de ambos coeficientes de captura, que se utilizará en la formulación del método ARDOK:

$$c_s = c_n + c_p . \quad (5.2)$$

También con el objeto de facilitar la lectura posterior se repiten las expresiones presentadas en la Sección 3.1.2 del Capítulo 3 para las ecuaciones de la función de ocupación de electrones,  $f_n$ , y huecos,  $f_p$ , y la eficiencia de recombinación,  $\eta_R$ , de la aproximación ASTOK:

$$f_n(E_t) = \begin{cases} 1 & \text{para } E_v < E_t < E_{fpt} \\ \frac{n\sigma_n}{n\sigma_n + p\sigma_p} & \text{para } E_{fpt} < E_t < E_{fnt} \\ 0 & \text{para } E_{fnt} < E_t < E_c \end{cases} , \quad (5.3-a)$$

$$f_p(E_t) = 1 - f_n(E_t) = \begin{cases} 0 & \text{para } E_v < E_t < E_{fpt} \\ \frac{p\sigma_p}{n\sigma_n + p\sigma_p} & \text{para } E_{fpt} < E_t < E_{fnt} \\ 1 & \text{para } E_{fnt} < E_t < E_c \end{cases} , \quad (5.3-b)$$

$$\eta_R(E_t) = \begin{cases} 0 & \text{para } E_v < E_t < E_{fpt} \\ v_{TH} \frac{(np - n_i^2)\sigma_n\sigma_p}{n\sigma_n + p\sigma_p} & \text{para } E_{fpt} < E_t < E_{fnt} \\ 0 & \text{para } E_{fnt} < E_t < E_c \end{cases} , \quad (5.3-c)$$

donde  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  son los cuasi niveles de Fermi de carga atrapados (CNFCA) para electrones y huecos, respectivamente. El nivel de energía  $E_{fnt}$  ( $E_{fpt}$ ) se definía como la energía a la cual se cumple la condición de que el coeficiente de emisión de electrones (huecos) es igual a la suma de los coeficientes de captura, es decir:

$$v_{th}\sigma_n N_c \exp\left(\frac{E_{fnt} - E_c}{kT}\right) = nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p , \quad (5.4-a)$$

$$v_{th}\sigma_p N_v \exp\left(\frac{E_v - E_{fpt}}{kT}\right) = nv_{th}\sigma_n + pv_{th}\sigma_p . \quad (5.4-b)$$

Las Ecuaciones (5.4) pueden reescribirse dividiendo los términos de emisión y captura por la velocidad térmica,  $v_{TH}$ , y la sección eficaz  $\sigma$  correspondiente:

$$e_{n-NOR} = N_c \exp\left(\frac{E_{fnt} - E_c}{kT}\right) = n + p \frac{\sigma_p}{\sigma_n} = c_{n-NOR} , \quad (5.5-a)$$

$$e_{p-NOR} = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_{fpt}}{kT}\right) = n \frac{\sigma_n}{\sigma_p} + p = c_{p-NOR} . \quad (5.5-b)$$

Los términos  $e_{n-NOR}$  ( $e_{p-NOR}$ ) y  $c_{n-NOR}$  ( $c_{p-NOR}$ ) se reconocerán como los coeficientes de emisión y captura normalizados, respectivamente, para electrones (huecos). Los CNFCA son entonces las energías a las cuales los coeficientes normalizados  $e_{n-NOR}$  con  $c_{n-NOR}$  y  $e_{p-NOR}$  con  $c_{p-NOR}$  se interceptan, y vienen dados por:

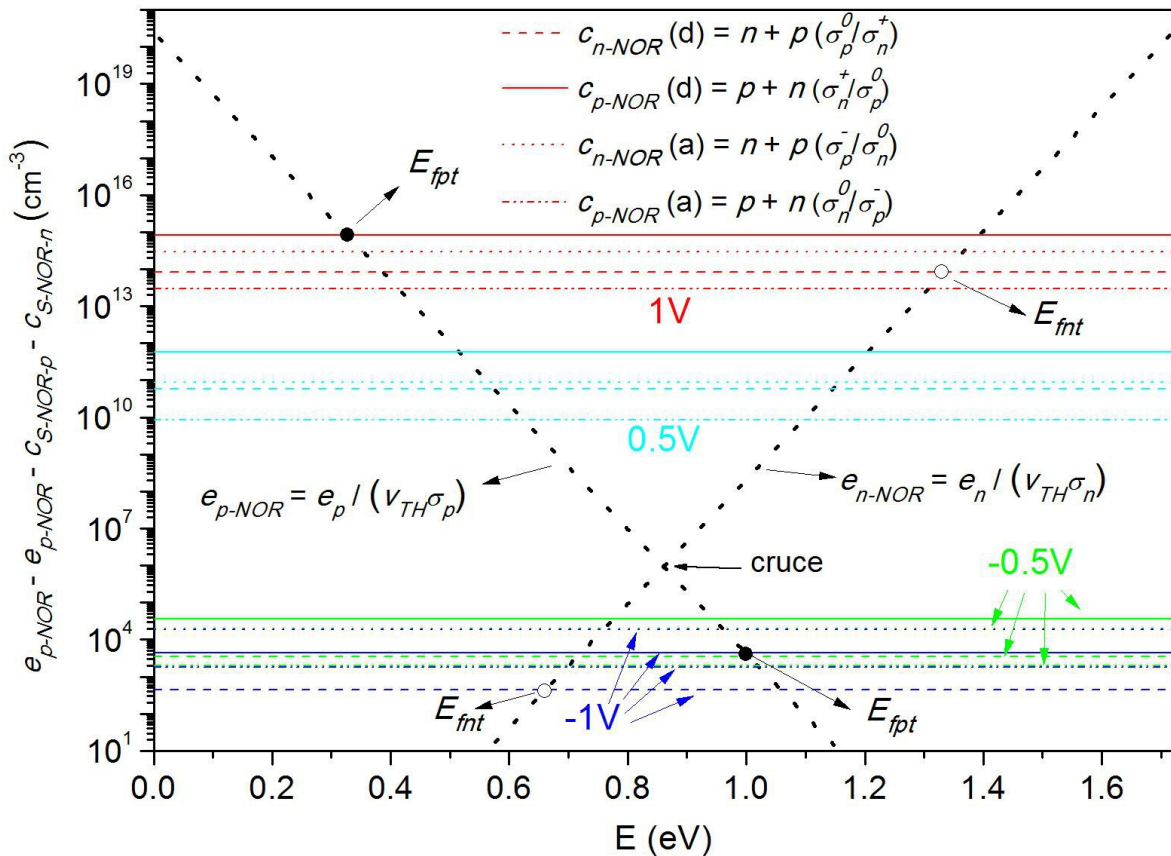
$$E_{fnt} = E_c + kT \ln\left(\frac{n\sigma_n + p\sigma_p}{N_c\sigma_n}\right) , \quad (5.6-a)$$

$$E_{fpt} = E_v - kT \ln\left(\frac{n\sigma_n + p\sigma_p}{N_v\sigma_p}\right) . \quad (5.6-b)$$

En la Figura 5.1 se esquematizan los coeficientes de captura y de emisión normalizados en función de la energía del gap en el centro de la capa intrínseca de un diodo p-i-n de a-Si:H, para algunas tensiones directas e inversas. El dispositivo se encuentra operando bajo condiciones de oscuridad y presenta características similares al dispositivo p-i-n estudiado en los Capítulos 3 y 4. El espesor de su capa intrínseca es de 600 nm. En la Figura 5.1 puede observarse que cuando el dispositivo p-i-n opera bajo condiciones de oscuridad, y sujeto a tensiones inversas, los CNFCA se invierten con respecto al escenario encontrado en el mismo dispositivo cuando opera bajo iluminación o en oscuridad pero sujeto a tensiones directas, es decir,  $E_{fnt} < E_{fpt}$ . Esta inversión hace imposible la aplicación de la Ecuación (5.3-c) para el cálculo de la eficiencia de recombinación y por lo tanto la aproximación ASTOK en estas condiciones deja de ser válida. En la Sección 5.2 se analizará más en detalle la física del dispositivo p-i-n cuando opera bajo oscuridad y sometido a tensiones inversas.

En un dispositivo p-i-n la corriente a oscuras para tensiones inversas es controlada por la generación térmica de pares e-h desde los estados localizados hacia los estados extendidos. Los portadores generados térmicamente son arrastrados por el campo eléctrico hacia los contactos del dispositivo generándose así la corriente eléctrica. Nuestras simulaciones indican que la corriente a oscuras es originada por la generación de pares e-h en los estados localizados de la capa intrínseca y no en los de las capas dopadas [19]. La tasa de generación térmica  $G(x)$  es

únicamente significativa dentro de una región espacial ( $x_1, x_2$ ) ubicada en el centro de la capa intrínseca. Esa región es esencialmente la fuente de corriente a oscuras para tensiones inversas. A mayor voltaje aplicado (en términos de su valor absoluto) las coordenadas espaciales  $x_1$  y  $x_2$  se mueven hacia las interfaces p/i e i/n, respectivamente [19]. Esta región puede alcanzar las capas dopadas únicamente a voltajes mayores (en valor absoluto) a -10 V en un dispositivo p-i-n que contiene una capa intrínseca de 200 nm de espesor.



**Figure 5.1:** Coeficientes de emisión y captura normalizados en función de la energía dentro del gap en los estados de defectos donores (d) y aceptores (a) de un dispositivo p-i-n de a-Si:H bajo tensiones aplicadas de  $\pm 1$  V y  $\pm 0,5$  V. La figura corresponde a la coordenada del centro de una capa intrínseca de 600 nm de espesor. El dispositivo está operando en condiciones de oscuridad. Los coeficientes normalizados corresponden a las Ecuaciones (5.5). Los cuasi niveles de Fermi para carga atrapada (Ecuaciones 5.6) se indican únicamente para tensiones de  $\pm 1$  V en los estados donores.

En la Figura 5.1, se puede observar que a tensiones directas los coeficientes de captura prevalecen por sobre los coeficientes de emisiones en el rango de energía comprendida entre ambos CNFCA. Para tensiones inversas, en cambio, las emisiones son mayores que las capturas

entre los mismos niveles  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ . En dispositivos p-i-n sujetos a tensiones inversas y que operan en condiciones de oscuridad, los coeficientes de captura de la Ecuación (5.1-c) podrían despreciarse para energías comprendidas entre los CNFCA. Por otra parte, en estas condiciones de operación la concentración de portadores libres,  $n$  y  $p$ , son menores a las correspondientes en equilibrio,  $n_0$  y  $p_0$ , debido a que el campo eléctrico aplicado externamente por la fuente de tensión inversa refuerza el campo interno presente en condiciones de equilibrio termodinámico empujando a los electrones y huecos de manera más eficiente hacia los contactos. Por lo tanto se cumple la relación  $np \ll n_i^2$ . Así, para el rango de energías comprendido entre los CNFCA la Ecuación (5.1-c) puede expresarse como:

$$\eta_R(E_t) = -\eta_G(E_t) = -v_{th}^2 \sigma_n \sigma_p \frac{n_i^2}{e_n(E_t) + e_p(E_t)} E_{fnt} < E_t < E_{fpt} . \quad (5.7)$$

Como se mencionó anteriormente, en un dispositivo p-i-n que opera en condiciones de oscuridad y bajo una tensión inversa aplicada, la generación de pares e-h prevalece por sobre la recombinación de los mismos. Por esta razón, en la Ecuación (5.7) el parámetro  $\eta_G$ , que en estas condiciones de operación hace referencia al concepto de la eficiencia de generación, corresponde a la eficiencia de recombinación  $\eta_R$  multiplicada por -1.

Los coeficientes de emisión se pueden reescribir de forma más compacta definiendo los valores de energía de la trampa como la diferencia de energía entre el nivel de energía propiamente dicho y el borde de banda correspondiente, de acuerdo a la siguiente convención: la energía de trampa  $E_t$  se mide para el coeficiente de emisión de huecos con valores positivos a medida que aumenta la energía desde  $E_v$ , y la energía de trampa  $E_t^*$  se mide para el coeficiente de emisión de electrones con valores positivos a medida que la energía disminuye desde  $E_c$ . Las Ecuaciones (5.1-d) y (5.1-e) con la nueva convención resultan:

$$e_n(E_t^*) = v_{th} \sigma_n N_c \exp\left(\frac{-E_t^*}{kT}\right) , \quad (5.8-a)$$

$$e_p(E_t) = v_{th} \sigma_p N_v \exp\left(\frac{-E_t}{kT}\right) . \quad (5.8-b)$$

Así, ambos coeficientes de emisión,  $e_n(E_t^*)$  y  $e_p(E_t)$ , decrecen exponencialmente hacia el interior del gap con respecto a las energías  $E_t^*$  y  $E_t$ , respectivamente y, al igual que en la aproximación AST, uno de ellos puede ser despreciado al apartarse algunos  $kT$  del valor de  $E_{T0}$  [24] definido en la Sección 3.1.1 del Capítulo 3. El nivel  $E_{T0}$  corresponde a la energía a la cual los coeficientes de emisión de electrones y huecos son iguales y se denomina como el nivel de trampas intrínseco. A partir de las Ecuaciones (5.1-d) y (5.1-e) se obtiene su expresión:



$$E_{T0} = \frac{E_v + E_c}{2} - \frac{kT}{2} \ln \left( \frac{\sigma_n N_c}{\sigma_p N_v} \right). \quad (5.9)$$

La eficiencia de generación se puede reescribir, entonces, como:

$$\eta_G(E_t > E_{T0}) = v_{th}^2 \sigma_n \sigma_p \frac{n_i^2}{e_n(E_t)}, \quad (5.10-a)$$

$$\eta_G(E_t < E_{T0}) = v_{th}^2 \sigma_n \sigma_p \frac{n_i^2}{e_p(E_t)}. \quad (5.10-b)$$

Combinando las Ecuaciones (5.8) y (5.10) se obtiene:

$$\eta_{G-E_t > E_{T0}}(E_t^*) = v_{th} n_i^2 \left( \frac{\sigma_p}{N_c} \right) \exp \left( \frac{E_t^*}{kT} \right), \quad (5.11-a)$$

$$\eta_{G-E_t < E_{T0}}(E_t) = v_{th} n_i^2 \left( \frac{\sigma_n}{N_v} \right) \exp \left( \frac{E_t}{kT} \right). \quad (5.11-b)$$

La tasa total de generación  $G$  viene dada por la integral entre  $E_v$  y  $E_c$  de la eficiencia de generación multiplicada por la densidad de estados (ver Sección 2.3.1):

$$G = -R \approx G_{E_t > E_{T0}} + G_{E_t < E_{T0}}, \quad (5.12-a)$$

$$G_{E_t > E_{T0}} = \int_{E_{fpt}^*}^{E_{T0}^*} \eta_{G-E_t > E_{T0}}(E_t^*) g_{gap}(E_t^*) dE_t^*, \quad (5.12-b)$$

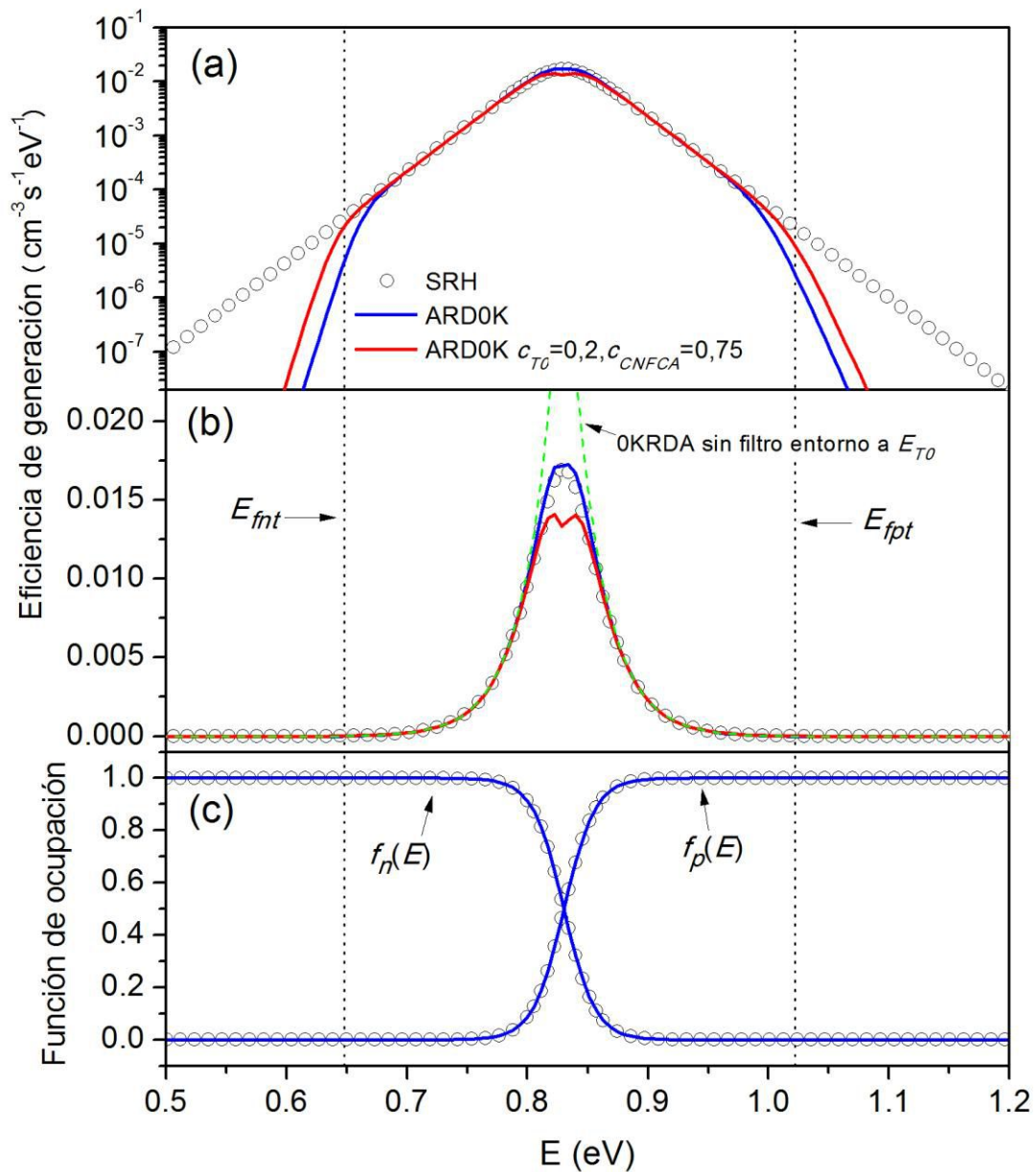
$$G_{E_t < E_{T0}} = \int_{E_{fnt}}^{E_{T0}} \eta_{G-E_t < E_{T0}}(E_t) g_{gap}(E_t) dE_t, \quad (5.12-c)$$

donde las energías  $E_{T0}^*$  y  $E_{fpt}^*$  se definen como:

$$E_{T0}^* = E_G - E_{T0}, \quad (5.12-d)$$

$$E_{fpt}^* = E_G - E_{fpt}. \quad (5.12-e)$$

La integral está restringida a los valores de energías comprendidos entre el nivel  $E_{T0}$  y los valores invertidos de los CNFCA,  $E_{fpt}$  y  $E_{fnt}$ , usando la misma lógica adoptada en la aproximación ASTOK (ver Capítulo 3). En la Figura 5.2(a) y 5.2(b) se compara la eficiencia de generación en función de la energía del gap en un dispositivo p-i-n de a-Si:H, calculada a partir del formalismo de SRH (círculos vacíos) y a partir de las Ecuaciones (5.11) (línea azul). Las otras curvas de la Figura 5.2 se explicarán y discutirán en la Sección 5.4.



**Figura 5.2:** Eficiencia de generación en función de la energía dentro del gap en el centro de la capa intrínseca de 600 nm de espesor, de un dispositivo p-i-n de a-Si:H. El dispositivo está operando en condiciones de oscuridad y con una tensión inversa de -1 V. Los círculos corresponden a la curva obtenida con el formalismo de SRH, mientras que la línea azul se obtuvo con la aproximación ARD0K. La eficiencia de generación se grafica en escalas (a) logarítmica, y (b) lineal. Se incluyen además las curvas correspondientes a la aproximación ARD0K cuando se implementan los coeficientes de corrección  $c_{T0}$  y  $c_{CNFCA}$  en el nivel de trampa intrínseca y en los CNFCA, respectivamente (línea roja) que se discuten en la sección 5.4. La línea de puntos verde en (b) corresponde a la curva calculada con la aproximación ARD0K sin aplicar los filtros Butterworth en  $E_{T0}$  (ver Sección 5.2). Finalmente en (c) se grafican las funciones de ocupación de electrones y huecos,  $f_n$  y  $f_p$ , obtenidas a partir de las Ecuaciones (5.1) (círculos) y de las Ecuaciones 5.16 (línea azul).

El dispositivo de la Figura 5.2 está operando en condiciones de oscuridad y bajo una tensión inversa de -1 V. La eficiencia de recombinación mostrada corresponde al centro de la capa intrínseca del dispositivo, la cual posee un espesor de 600 nm, y fue calculada con los parámetros de la Tabla 3.1 del Capítulo 3. En la figura se puede observar que la contribución más significativa a la tasa de recombinación en el formalismo de SRH proviene de los estados del gap con energías entre  $E_{fpt}$  y  $E_{fnt}$ , lo cual justifica los límites de integración adoptados para las Ecuaciones (5.12-b) y (5.12-c).

Dado que la densidad de estado,  $g_{gap}(E_t)$  es una función más suave con respecto a la energía  $E_t$  que los coeficientes de emisión  $e_n(E_t)$  y  $e_p(E_t)$ , ésta puede aproximarse como una constante cuyo valor se adopta igual al correspondiente a la energía  $E_{T0}$ , es decir  $g_{gap}(E_t) \approx g_{gap}(E_t=E_{T0})$ . De esta manera, la variable densidad de estados puede extraerse fuera de la integral en las Ecuaciones (5.12), simplificándose la expresión. Al alcanzar la suma  $e_n(E_t) + e_p(E_t)$  de la Ecuación (5.7) su valor mínimo en  $E_{T0}$ , la eficiencia de generación es máxima en ese punto.

Cuando se adopta el DPM para modelar la densidad de DB, la aproximación planteada  $g_{gap}(E_t) \approx g_{gap}(E_t=E_{T0})$  es bastante exacta en el centro de la capa intrínseca, pero la misma puede volverse cuestionable cerca de las interfaces p/i e i/n, donde  $g_{gap}(E_t)$  cambia más rápidamente con la energía del gap  $E_t$ . Sin embargo, en junturas p-i-n que operan en condiciones de oscuridad y bajo tensión inversa, la contribución más importante de la corriente proviene de las trampas ubicadas cerca del centro de la capa intrínseca y con energías cercanas al centro del gap. Si bien a medida que se incrementa la tensión inversa la región en la que se produce la generación de pares e-h se expande hacia las interfaces, las mayores contribuciones siguen estando en el centro de la capa intrínseca. En cambio, cuando se adopta el modelo de UDM nuestra aproximación es válida para cualquier voltaje inverso aplicado. Combinando entonces las Ecuaciones (5.11) y (5.12), la tasa total de generación puede expresarse como:

$$G_{E_t > E_{T0}} = g_{gap}(E_{T0}) \left( \frac{\sigma_p}{N_c} \right) n_i^2 kT \left[ \exp\left(\frac{E_{T0}^*}{kT}\right) - \exp\left(\frac{E_{fpt}^*}{kT}\right) \right], \quad (5.13-a)$$

$$G_{E_t < E_{T0}} = g_{gap}(E_{T0}) \left( \frac{\sigma_n}{N_v} \right) n_i^2 kT \left[ \exp\left(\frac{E_{T0}}{kT}\right) - \exp\left(\frac{E_{fnt}}{kT}\right) \right]. \quad (5.13-b)$$

Reemplazando las Ecuaciones (5.6), (5.9), (5.12-d) y (5.12-e) en las Ecuaciones (5.13) y realizando un poco de álgebra, se pueden derivar las siguientes expresiones:

$$G_{E_t > E_{T0}} = v_{th} \sigma_p n_i kT g_{gap}(E_{T0}) \left[ \left( \frac{\sigma_n}{p} \right)^{1/2} - \left( \frac{n\sigma_n + p\sigma_p}{n_i \sigma_p} \right) \right], \quad (5.14-a)$$

$$G_{E_t < E_{T0}} = v_{th} \sigma_n n_i kT g_{gap}(E_{T0}) \left[ \left( \frac{\sigma_p}{\sigma_n} \right)^{1/2} - \left( \frac{n\sigma_n + p\sigma_p}{n_i \sigma_n} \right) \right]. \quad (5.14-b)$$

La derivación fue realizada para una densidad de estados  $g_{gap}(E_t)$  genérica con el objetivo de que las expresiones sean válidas tanto para los estados donores como para los aceptores. Por esta razón se omitieron los estados de carga en las secciones eficaces y en los coeficientes de emisión.

La corriente a oscuras para tensiones inversas aplicadas puede calcularse como:

$$J(V) = -\left(\int (qG_{E_t > E_{T0}} + qG_{E_t < E_{T0}}) dx + J_{e-bd} + J_{h-bd}\right), \quad (5.15-a)$$

$$J(V) = -q \int (G_{E_t > E_{T0}} + G_{E_t < E_{T0}}) dx, \quad (5.15-b)$$

$q$  es la carga del electrón,  $J_{e-bd}$  es la densidad de corriente debida a la difusión de electrones hacia el contacto frontal, y  $J_{h-bd}$  es la densidad de corriente debida a la difusión de huecos hacia el contacto posterior. En los dispositivos estudiados, ambos términos son despreciables en comparación con los dos primeros,  $G_{E > E_{T0}}$  y  $G_{E < E_{T0}}$ .

Para evaluar la concentración de electrones atrapados es necesario disponer de una expresión para la función de ocupación que sea válida para el caso particular de operación a oscuras y tensiones inversas. Dicha expresión puede obtenerse reemplazando los coeficientes de emisión y captura (Ecuaciones (5.1-d) a (5.1-g)) en la Ecuación (5.1-a) y utilizando la Ecuación (5.9). Trabajando algebraicamente, la expresión final resultante es:

$$f_n(E_t) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{2E_t - E_{T0}}{kT}\right)}. \quad (5.16-a)$$

Esta ecuación es bastante similar a la función de ocupación de Fermi-Dirac para condiciones de equilibrio termodinámico, excepto por el factor 2 y por el nivel de energía  $E_{T0}$  que reemplaza al nivel de Fermi  $E_F$ . El factor 2 hace que la transición de 1 a 0 alrededor de  $E_{T0}$  sea más abrupta que alrededor de  $E_F$  en la ecuación de Fermi-Dirac. Debido a ello se vuelve plausible aproximar a  $f_n(E_t)$  por una función escalón que pasa de 1 a 0 cuando  $E_t = E_{T0}$ .

Siguiendo un razonamiento similar, la función de ocupación de huecos puede expresarse como:

$$f_p(E_t) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{2E_{T0} - E_t}{kT}\right)}. \quad (5.16-b)$$

Esta ecuación también puede ser aproximada por una función escalón que cambia de 0 a 1 en el nivel de energía  $E_t = E_{T0}$ . En la Figura 5.2(c) se muestran las funciones  $f_n(E_t)$  y  $f_p(E_t)$  para un dispositivo con los mismos parámetros y el mismo escenario que el de la Figura 1(a). Cuando las Ecuaciones (5.16) son aproximadas por una función escalón, las expresiones para las densidades de cargas atrapadas se simplifican considerablemente, siendo las mismas:

$$p_T(E_t) = \int_{E_{T0}}^{E_G} N_D(E_t) dE_t , \quad (5.17-a)$$

$$n_T(E_t) = \int_0^{E_{T0}} N_A(E_t) dE_t . \quad (5.17-b)$$

El uso de las Ecuaciones (5.14) a (5.17), que permiten evaluar la curva característica J-V, la tasa de generación térmica de pares e-h y las densidades de cargas atrapadas, definen el método o aproximación ARD0K, donde A se refiere a Aproximación, 0K representa la función escalón utilizada en las expresiones para el cálculo de la tasa total de generación  $G(x)$  y las concentraciones de carga atrapada,  $p_T(x)$  y  $n_T(x)$ , y las letras RD corresponden a las iniciales de los apellidos de los autores. Estas ecuaciones fueron implementadas en nuestro código D-AMPS descrito en el Capítulo 2. Simplemente cambiando el valor de una variable entera en el archivo de entrada del software, se puede seleccionar con qué formalismos (SRH, AST, AST0K o ARD0K) correrá el programa.

## 5.2 Análisis detallado del método ARD0K

Para testear la validez y la solidez del método ARD0K se utilizan los mismos dispositivos p-i-n de a-Si:H que fueron descritos en la Sección 3.2 del Capítulo 3, donde también se encuentran los parámetros resultantes de los ajustes utilizando el formalismo de SRH y el modelo UDM.

Al escoger el UDM para chequear la validez de la aproximación ARD0K, se debe tener en cuenta que cada una de las tres distribuciones gaussianas  $D^+$ ,  $D^0$  y  $D^-$ , contribuyen a la eficiencia de generación con cuatro términos: dos según la naturaleza del estado, donora o aceptora, y dos según el nivel de energía del estado, esté por encima o por debajo de  $E_{T0}$  como se expresa en las ecuaciones (5.14). En la aproximación de estados desacoplados cada gaussiana que contiene estados anfotéricos se desdobra en dos réplicas exactas, separadas aproximadamente por la energía de correlación  $U$ : una conteniendo estados donores y la otra, estados aceptores. Como la densidad de estados de defectos en el modelo de UDM se representa con tres gaussianas anfotéricas tendremos un total de  $2 \times 2 \times 3 = 12$  términos. El nivel  $E_{T0}$  es distinto para los estados donores ( $E_{T0-D}$ ) y para los estados aceptores ( $E_{T0-A}$ ) debido a que las secciones eficaces  $\sigma_n$  y  $\sigma_p$  son diferentes (ver Ecuación (5.9)). Usualmente  $E_{T0-D}$  y  $E_{T0-A}$  son iguales para las tres gaussianas donoras y para las tres aceptoras, respectivamente, ya que es práctica común asumir iguales las secciones eficaces de captura en las gaussianas que contienen estados del mismo tipo.

Utilizando los valores de los ajustes alcanzados en la Sección 3.2 los niveles de trampa intrínsecos  $E_{T0-D}$  y  $E_{T0-A}$  resultan aproximadamente:  $E_{T0-D}^G \approx 0,8$  eV y  $E_{T0-A}^G \approx 0,92$  eV (se agrega el

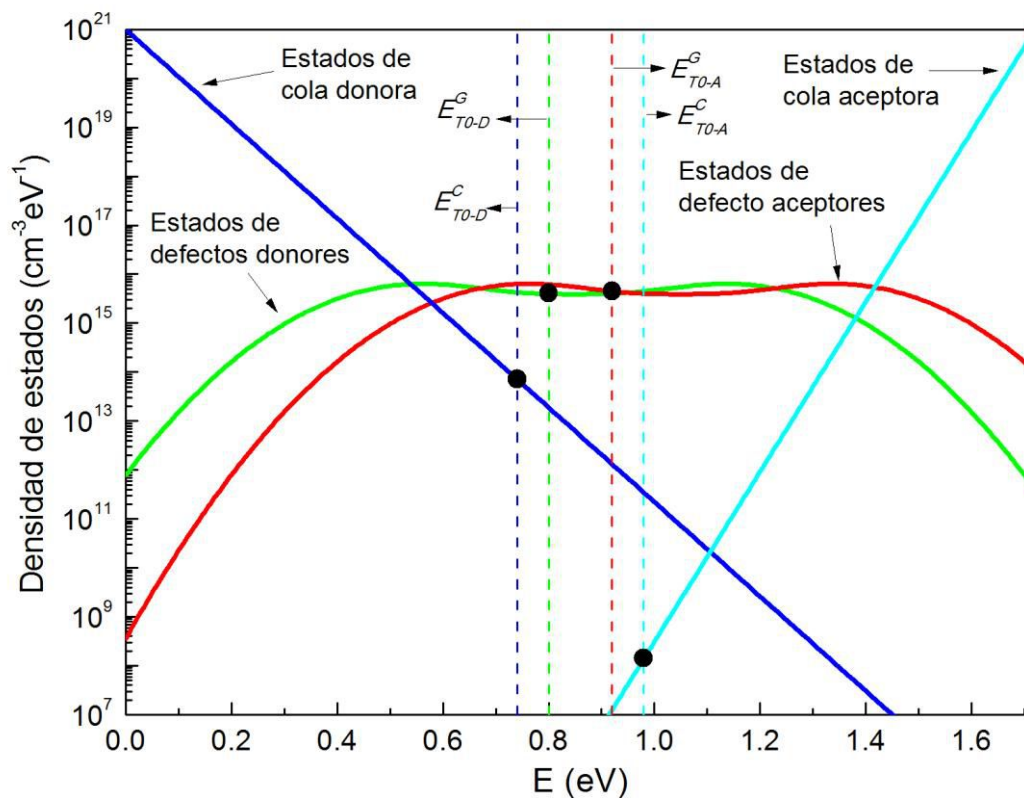
superíndice  $G$  para indicar que los niveles de trampas intrínsecos corresponden a estados de defectos y así diferenciarlos de los niveles  $E_{T0}$  correspondientes a los estados de las colas, que se denotarán con el superíndice  $C$ ). En la Tabla 5.1 se listan las seis distribuciones gaussianas (tres donoras y tres aceptoras) ordenadas según su contribución relativa al coeficiente de generación térmica. Para contabilizar la contribución que realiza cada gaussiana se suman entre sí los dos términos correspondientes a las energías por encima y por debajo de  $E_{T0}$ .

Los porcentajes fueron evaluados a  $V = -2$  V, pero las proporciones no varían significativamente con el voltaje aplicado. Estas contribuciones están determinadas, en primer lugar por la proximidad del pico de energía de la gaussiana al nivel  $E_{T0}$ , y, en segundo lugar, por la cantidad de estados que encierra cada Gaussiana. La eficiencia de generación cambia más rápidamente respecto de la energía que con respecto al número de estados encerrado por cada distribución gaussiana.

Los estados de las colas agregan dos pares más de términos al cálculo del coeficiente de degeneración, pero su contribución es despreciable frente a las de las gaussianas. Utilizando nuevamente los valores de los ajustes realizados en el Capítulo 3, los niveles de trampa intrínsecos para los estados de las colas resultan ser  $E_{C_{T0-A}} \approx 0,98$  eV y  $E_{C_{T0-D}} \approx 0,74$  eV. Como puede observarse en la Figura 5.3, para esos niveles de energía las densidades de estados en las colas son mucho menores que las densidades de estados correspondientes a los defectos encerrados por las gaussianas. En la Figura 5.3 se indican con círculos llenos las densidades de estados de los defectos y de las colas a la energía  $E_{T0}$  correspondiente a cada caso.

**Tabla 5.1:** Distribuciones gaussianas utilizadas para representar las densidades de los estados de defectos cuando se utiliza el modelo UDM con sus respectivas contribuciones al coeficiente de generación térmica, la energía del valor máximo de la distribución y las densidades de estados que encierra cada una. Los cálculos fueron realizados para un dispositivo p-i-n de a-Si:H con una capa intrínseca de 600 nm de espesor, que opera en condiciones de oscuridad y bajo una tensión inversa aplicada de -2 V.

Gaussiana	Contribución	Pico de energía	DOS encerrados en la gaussiana
$D_{A^-}$	39 %	0,75 eV	$2 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$
$D_{D^0}$	33 %	0,85 eV	$1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$
$D_{A^0}$	17 %	1,05 eV	$1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$
$D_{D^-}$	8 %	0,55 eV	$2 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$
$D_{D^+}$	3 %	1,15 eV	$2 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$
$D_{A^+}$	0,02 %	1,35 eV	$2 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$



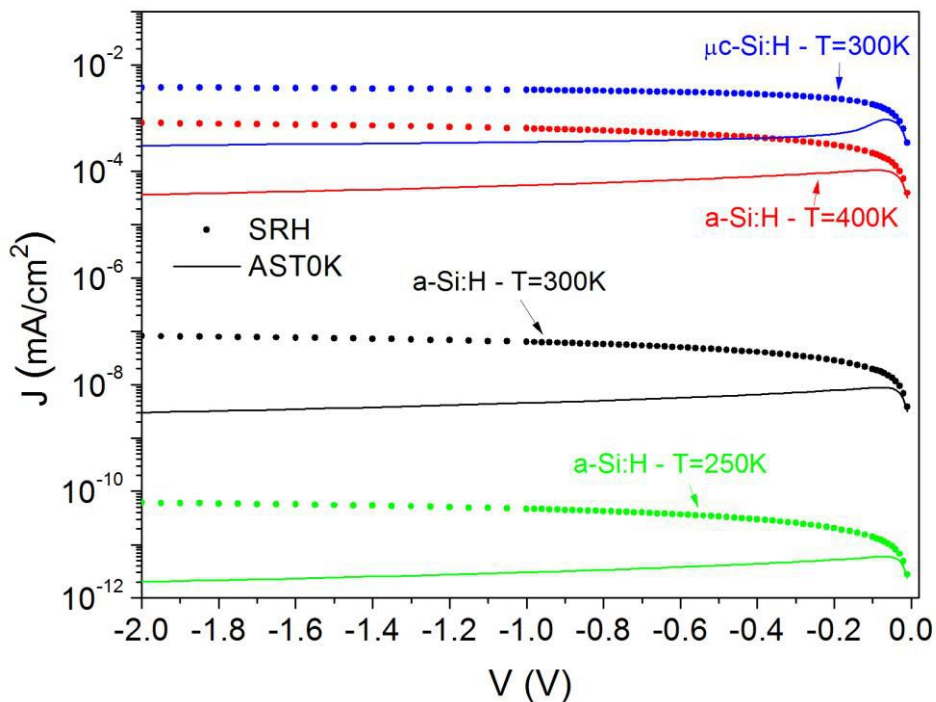
**Figura 5.3:** Densidad de estados en la capa intrínseca de un dispositivo p-i-n de a-Si:H. Los estados de defectos se modelan con distribuciones gaussianas, mientras que los estados de cola muestran un comportamiento exponencial. Para mayor claridad se grafican las densidades de estados de defectos totales (es decir, la obtenida a partir de la suma de las tres gaussianas). Se muestran también los niveles de trampas intrínsecos,  $E_{T0}$ , de los estados de las colas y de los estados de defectos (se distinguen entre sí con el supra índice  $C$  y  $G$  respectivamente) tanto para las trampas donoras como para las trampas aceptoras (subíndice  $-D$  y  $-A$ , respectivamente).

Las Figuras 5.2(a) y 5.2(b) muestran que para las energías donde la eficiencia de generación es importante, la aproximación ARD0K (línea azul) predice valores muy similares a los obtenidos con el formalismo de SRH (círculos vacíos). Los resultados que muestra la gráfica corresponden a los estados donores en el centro de la capa intrínseca del dispositivo p-i-n que se encuentra operando bajo una tensión inversa de  $-1$  V. El decaimiento de la curva correspondiente a la aproximación ARD0K cerca de los CNFCA junto al comportamiento de la curva similar en color rojo y la divergencia de la curva en color verde se discutirán en la Sección 5.4. Por su parte, la Figura 5.2(c) comprueba, como era de esperarse, que las Ecuaciones (5.16-a) y (5.16-b) arrojan resultados muy similares a las Ecuaciones (5.1-a) y (5.1-b), respectivamente, para las funciones de ocupación. Consecuentemente, a partir de los resultados de la Figura 5.2, donde se muestra que el cálculo de la eficiencia de recombinación y de la carga atrapada en la aproximación ARD0K dan lugar a resultados muy similares a los obtenidos con el formalismo de

SRH, se podría esperar que las curvas J-V obtenidas para inversa también lo sean. Sin embargo, se verá que la implementación de la aproximación ARD0K no es tan directa y sencilla, ya que necesita de discusiones y refinamientos adicionales.

En este capítulo, y en pos de visión más intuitiva, el voltaje aplicado se considerará mayor o menor respecto de su valor absoluto. Entonces, por ejemplo,  $-0,7$  V será considerado como un voltaje aplicado mayor a  $-0,5$  V y menor a  $-1$ V.

En la Figura 5.4 se observa que la curva J-V a oscuras para tensiones inversas calculada a partir de la aproximación AST0K (la de Simmons-Taylor, no la nuestra) es similar a la curva obtenida con el formalismo de SRH para tensiones muy bajas ( $|V| < 0,06$  V). En cambio, a medida que se aumenta la tensión aplicada pueden observarse diferencias significativas entre los dos formalismos. Si bien la derivación de Simmons y Taylor imposibilita que la aproximación AST0K pueda utilizarse para calcular la curva J-V en una juntura p-i-n a oscuras y bajo tensiones inversas aplicadas [56,69], algunos pequeños detalles que discutiremos a continuación abren la posibilidad de que la combinación de la aproximación AST0K con la aproximación ARD0K hagan posible la reproducción de la curva J-V para tensiones inversas bajas.



**Figura 5.4:** Comparación de las curvas J-V a oscuras y bajo tensiones inversas obtenidas a diferentes temperaturas con la aproximación AST0K y con el formalismo de SRH para un dispositivo p-i-n de a-Si:H con una capa intrínseca de 600 nm de espesor. Además se incluyen las curvas J-V obtenidas con los dos formalismos para un dispositivo p-i-n de  $\mu$ c-Si:H con una capa intrínseca de 3000 nm de espesor.



Cuando se comparan las ecuaciones de la eficiencia de recombinación provenientes de la aproximación ASTOK (Ecuación 5.3-c) con las del formalismo de SRH (Ecuación 5.1-c), a primera vista pareciera que los procesos de emisión, tanto de huecos como de electrones, han sido despreciados en el primer modelo. Sin embargo no es así, porque la emisión de electrones desde los estados del gap ubicados entre el nivel  $E_{T0}$  y el  $E_{fnt}$ , y la emisión de huecos desde estados del gap ubicados entre  $E_{T0}$  y  $E_{fpt}$  son todavía tenidos en cuenta por la aproximación ASTOK. Los procesos de emisión están presentes en la definición de los CNFCA (ver Ecuaciones (5.5) y (5.6)).

Otra conclusión incorrecta sería afirmar que la aproximación ASTOK no puede emplearse para ningún voltaje inverso en un dispositivo p-i-n que opera bajo condiciones de oscuridad, debido a que los CNFCA se encuentran invertidos. Bajo condiciones de oscuridad los cuasi-niveles de Fermi  $E_{fn}$  y  $E_{fp}$  para portadores libres resultan invertidos, o sea  $E_{fn} < E_{fp}$ , para cualquier voltaje inverso aplicado, no importa cuán pequeño sea. Esto no sucede con los CNFCA, ya que para tensiones negativas muy pequeñas el  $E_{fnt}$  se mantiene por encima del  $E_{fpt}$  a lo largo de todo el dispositivo, al igual que ocurre bajo tensiones directas aplicadas. Utilizando los parámetros obtenidos a partir de los ajustes de las curvas J-V del dispositivo p-i-n de a-Si:H (ver Sección 3.2) en el Capítulo 3, se determinó que la relación  $E_{fnt} > E_{fpt}$  se mantiene en toda la capa intrínseca hasta voltajes inversos de -0,02 V aproximadamente, y por lo tanto la Ecuación (5.2-c) sigue siendo válida dentro de ese rango de tensiones. En un dispositivo p-i-n de a-Si:H se observa que recién a partir de tensiones inversas aplicadas mayores a -0,04 V se encuentran los CNFCA invertidos para ambos tipos de estados de defectos: donores y aceptores. Para tensiones menores a -0,05 V, la inversión de los CNFCA se da en pequeñas regiones de la capa intrínseca que no coinciden exactamente con la posición en el cual el coeficiente de generación alcanza su valor máximo. Las coordenadas espaciales entre las cuales los CNFCA están invertidos se reconocerán como  $(x_3, x_4)$ , y se le añadirá el subíndice  $a$  y  $d$  para diferenciar los CNFCA correspondientes a los estados donores del de los aceptores. Para estados donores (aceptores), los CNFCA comienzan a invertirse espacialmente a la izquierda (derecha) del punto de máxima generación térmica, es decir, se cumple la siguiente relación:  $x_{d3} < x_{d4} < x_{a3} < x_{a4}$ , ubicándose la posición del pico de la generación térmica entre  $x_{d4}$  y  $x_{a3}$ . A medida que la tensión inversa se incrementa las regiones espaciales  $(x_3, x_4)$ , tanto para los estados donores como aceptores, comienzan a expandirse o espaciarse dentro de la capa intrínseca, desplazándose hacia las interfaces. Esto provoca que las regiones se superpongan entre sí modificándose la relación entre las coordenadas espaciales, que pasa a ser:  $x_{d3} < x_{a3} < x_{d4} < x_{a4}$ . Así, las posiciones en las que la generación térmica se vuelve significativa comienzan a coincidir con la inversión de los CNFCA para tensiones inversas más elevadas. Por su parte, la región  $(x_1, x_2)$  también se expande hacia las interfaces con el aumento de la tensión inversa aplicada, asemejándose cada vez más a las

regiones  $(x_3, x_4)$ . La relación  $x_1 \leq x_3 < x_4 \leq x_2$  se mantiene para cualquier tensión inversa aplicada tanto para estados donores como aceptores.

La aproximación ASTOK (Ecuaciones (5.2)) fue implementada en D-AMPS utilizando filtros Butterworths paso bajo y paso alto, que denominamos en la Sección 3.1.2. con las siglas BPB(E) y BPA(E), respectivamente [57], debido a que nuestro código no convergía cuando se implementan directamente las funciones escalones con las discontinuidades abruptas. Como ya se explicó en la Sección 3.1.2 los filtros Butterworths contienen dos parámetros: el nivel de transición, que en nuestro caso corresponde a los CNFCA, y el orden  $n$  que define qué tan abruptas son las transiciones: siendo más acentuadas para  $n$  más elevados. En particular, las Ecuaciones (5.2-c), al incluirle los filtros Butterworths, quedan expresadas de la siguiente manera:

$$\eta_R(E_t) = \begin{cases} n_f \text{BPB}(E_{fpt}) & \text{para } E_v < E_t < E_{fpt} \\ n_f \text{BPA}(E_{fpt}) \text{BPB}(E_{fnt}) & \text{para } E_{fpt} < E_t < E_{fnt} \\ n_f \text{BPA}(E_{fnt}) & \text{para } E_{fnt} < E_t < E_c \end{cases}, \quad (5.18-a)$$

$$n_f = v_{TH} \frac{(np - n_i^2) \sigma_n \sigma_p}{n \sigma_n + p \sigma_p}. \quad (5.18-b)$$

En nuestras simulaciones el orden  $n$  se incrementó hasta que los resultados se volvieron independientes del mismo. Adoptando  $n > 30$ , el filtro Butterworth se comporta prácticamente como un filtro ideal haciendo que la recombinación o la eficiencia de recombinación resulte igual a cero para energías entre los bordes de banda y los CNFCA, cuando estos últimos no están invertidos (ver Ecuación 5.18-c). En cambio, cuando los CNFCA se invierten la eficiencia de generación modulada por los filtros Butterworths se vuelve distinta de cero dentro del rango de energías aquí indicado (ver Ecuación (5.18-d)).

$$\eta_R = \begin{cases} 0 & \text{para } E_t < E_{fpt} \\ \neq 0 & \text{para } E_{fpt} < E_t < E_{fnt} \\ 0 & \text{para } E_t > E_{fnt} \end{cases}, \quad (5.18-c)$$

$$\eta_R = \begin{cases} \neq 0 & \text{para } E_t < E_{fpt} \\ 0 & \text{para } E_{fpt} < E_t < E_{fnt} \\ \neq 0 & \text{para } E_t > E_{fnt} \end{cases}. \quad (5.18-d)$$

En junturas p-i-n que operan en condiciones de oscuridad y bajo una tensión inversa aplicada, existen dos escenarios posibles: a) a tensiones muy pequeñas los CNFCA no están aún invertidos en ningún punto de la capa intrínseca y b) para tensiones moderadas y altas los CNFCA se invierten sólo dentro de la región  $(x_3, x_4)$  en la capa intrínseca, pero se mantienen no

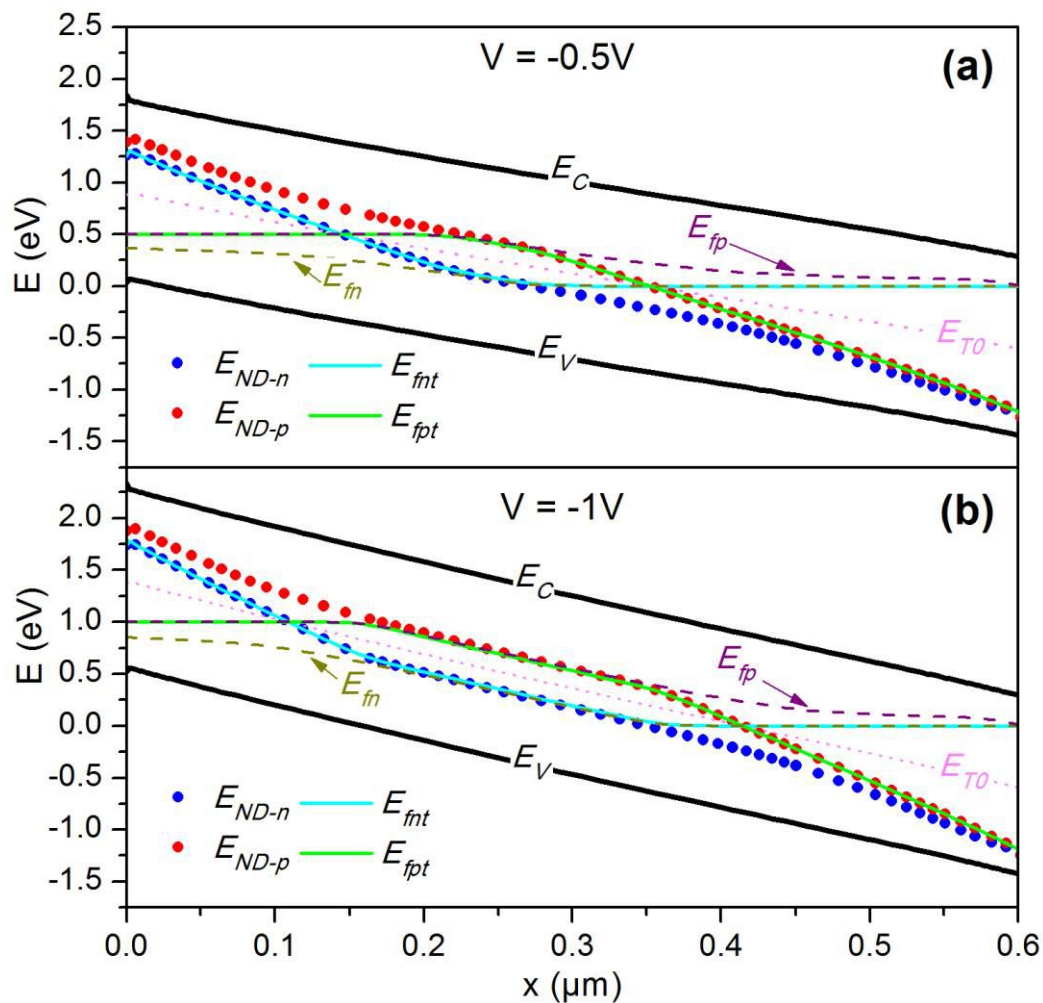
invertidos fuera de esa región. En ambos casos existen zonas donde la aproximación ASTOK aún puede ser aplicada. Nuestro código D-AMPS verifica en qué regiones de la capa intrínseca los CNFCA están invertidos, con el objeto de aplicar sólo allí la aproximación ARDOK, es decir dentro de la región espacial  $(x_3, x_4)$ . Las dos aproximaciones se combinan para poder describir apropiadamente la física de transporte a través del dispositivo y reproducir correctamente la curva J-V a oscuras para cualquier tensión inversa aplicada.

Cuando el voltaje inverso se incrementa, la región  $(x_3, x_4)$  se ensancha y la aproximación ARDOK se aplica en una región mayor de la capa intrínseca. En la Figura 5.4 puede observarse que para tensiones inversas de -0,6 V (-0,3 V) la contribución de la aproximación ASTOK a la densidad de corriente total  $J$  es aproximadamente de un 10% (20%) de la densidad de corriente obtenida con el formalismo de SRH. Ese porcentaje cambia levemente con la temperatura: es levemente mayor a menor temperatura.

La idea de Hack y Shur de incluir el término  $n_i^2$  en el numerador de la Ecuación (5.3-c) [58] se puede extender también para tensiones inversas pequeñas para las cuales los CNFCA no están aún invertidos. La aproximación ASTOK puede agregar una contribución extra de pares e-h generados térmicamente (y por lo tanto una recombinación extra de pares e-h para las tensiones directas [58]) a la corriente a oscuras, debido a que en esas regiones el término  $n_i^2$  de la Ecuación (5.2-c) permanece por encima del producto entre las concentraciones de electrones y huecos libres,  $np$ . En la Ecuación (5.18-c) puede observarse que en la región espacial donde los CNFCA están invertidos se incluyen los procesos de emisión de electrones y de huecos desde los estados del gap con energías entre los bordes de banda y los CNFCA invertidos (es decir, para las energías comprendidas en los rangos  $E_c > E_t > E_{fpt}$  y  $E_{fnt} > E_t > E_v$ ) cuando nos desplazamos hacia los estados extendidos. La Ecuación (5.18-a) puede considerarse como una variación de la tradicional aproximación ASTOK de Simmons-Taylor, pero aplicable en regiones donde los CNFCA se encuentran invertidos. Sin embargo, se encontró que la contribución de esos estados del gap en la corriente  $J$  a oscuras es bastante baja y puede considerarse despreciable (ver Sección 5.4).

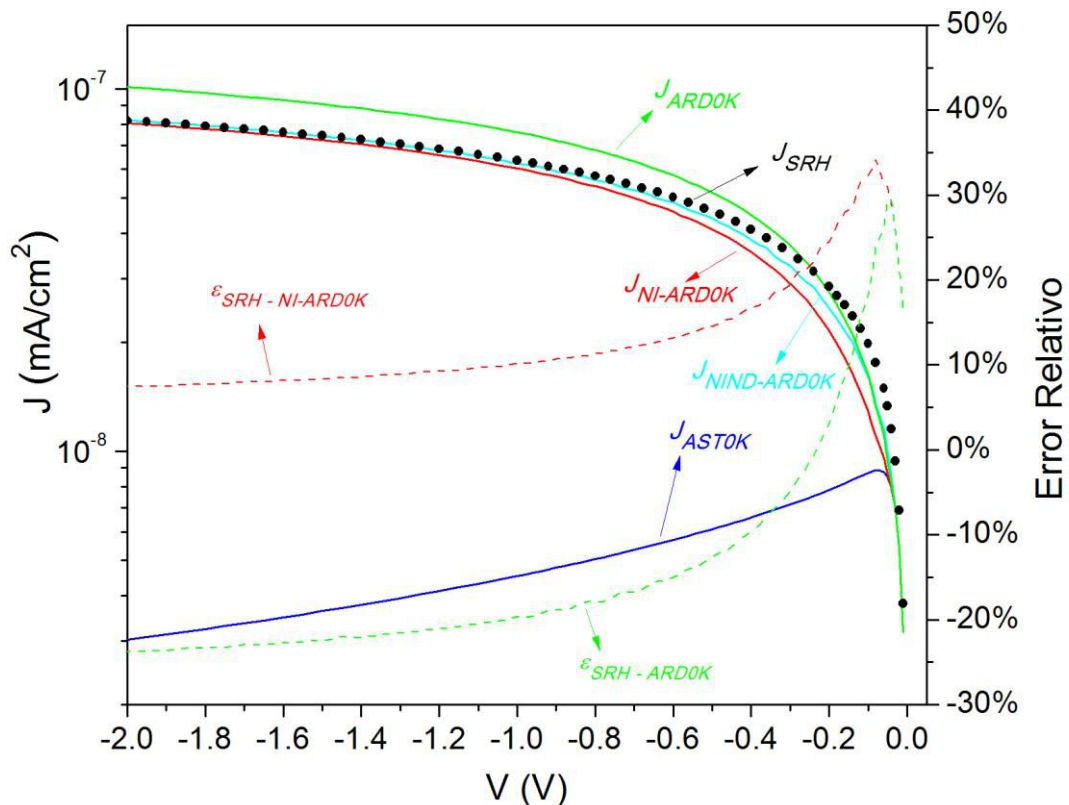
La Figura 5.5 muestra los CNFCA para un dispositivo p-i-n de a-Si:H con una capa intrínseca de 600 nm de espesor sometido a tensiones de -0,5 V y -1 V. La máxima contribución de la corriente a oscuras proviene, espacialmente, de la zona media del dispositivo y no de las regiones ubicadas cerca de las interfaces, a pesar de que allí los CNFCA están más separados entre sí, encerrando más estados dentro del gap que en el centro del dispositivo. Esto se debe a que las concentraciones de electrones y huecos libres en la zona media de la capa intrínseca, son más comparables entre sí, mientras que cerca de las interfaces la concentración de portadores mayoritarios es mucho mayor que la de minoritarios ( $n \gg p$  o  $n \ll p$ ). La emisión térmica de

pares e-h se favorece cuando se cumplen dos condiciones: a) que los estados del gap se encuentren cercanos a la energía  $E_{T0}$  donde las probabilidades de emisión de electrones y de huecos son comparables ( $E_{T0}$  coincide con el centro del gap cuando las secciones eficaces de captura para electrones y huecos son iguales) y b) que la concentración de portadores libres sea menor que  $n_i$ , favoreciéndose la emisión de portadores por sobre la captura. Esta última condición se da en el centro de capa intrínseca y no cerca de las interfaces donde domina un tipo de portador. Cerca de las interfaces p/i e i/n los CNFCA no están invertidos y debe aplicarse la aproximación ASTOK.



**Figura 5.5:** Diagramas de bandas de una juntura p-i-n de a-Si:H con una capa intrínseca de 600 nm de espesor para condiciones de oscuridad y tensiones inversas de -0,5 V y -1 V. Los diagramas muestran los bordes de las bandas de conducción y valencia,  $E_C$  y  $E_V$ , los cuasi niveles de Fermi para electrones y huecos libres,  $E_{fn}$  y  $E_{fp}$ , los cuasi niveles de Fermi para electrones y huecos atrapados,  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ , los niveles de demarcación para electrones y para huecos,  $E_{ND-n}$  y  $E_{ND-p}$ , y la energía de trampa intrínseca  $E_{T0}$ . Las energías  $E_{fnt}$ ,  $E_{fpt}$ ,  $E_{ND-n}$ ,  $E_{ND-p}$  y  $E_{T0}$  se muestran sólo para los estados de defectos de carácter donador.

En la Figura 5.6 se muestran las curvas J-V a oscuras y los errores relativos obtenidos para diferentes variaciones de la aproximación ARDOK (ver Sección 5.4) en un dispositivo p-i-n con una capa intrínseca de 600 nm de ancho con los parámetros eléctricos presentados en la Sección 3.2. Desde este punto en adelante, y mientras que no se aclare lo contrario, las curvas J-V obtenidas con la aproximación ARDOK incluirán las contribuciones de utilizar la ASTOK en las zonas donde los CNFCA no están invertidos.

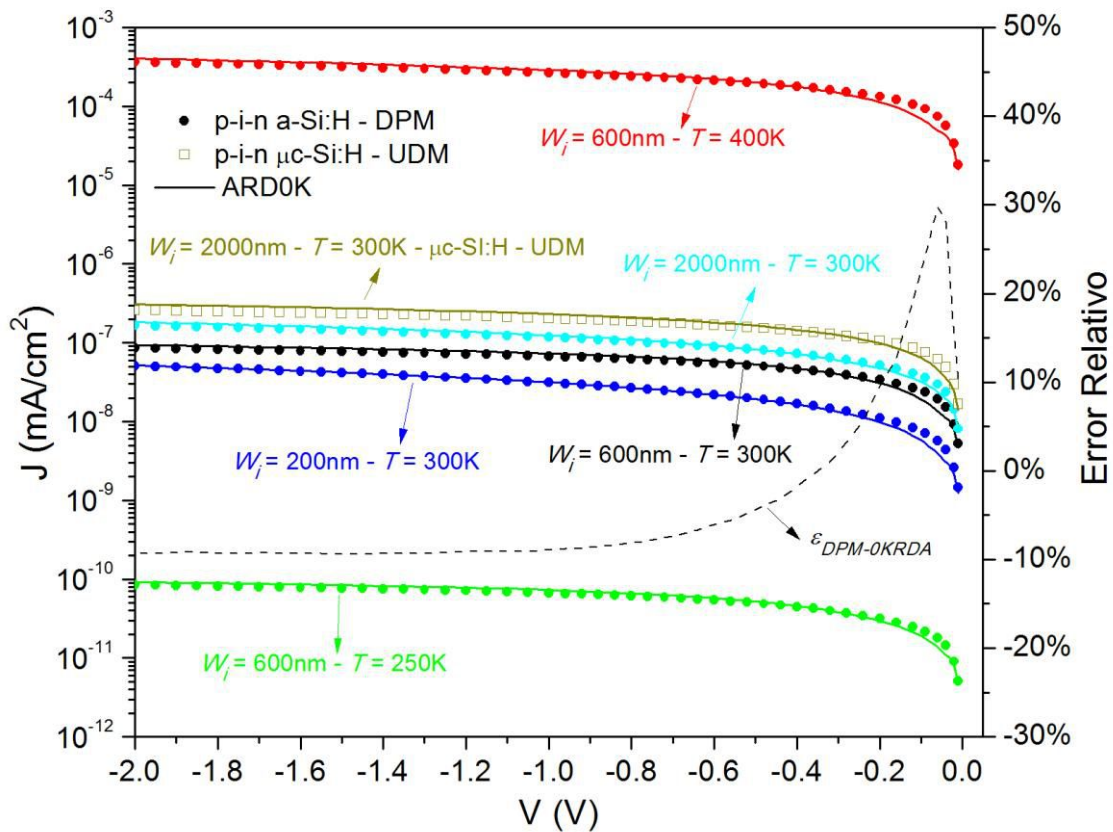


**Figura 5.6:** Comparación de las curvas J-V bajo condiciones de oscuridad y aplicando una tensión inversa obtenidas con el formalismo de SRH (círculos negros), la aproximación ASTOK (línea azul) y algunas variantes de la aproximación ARDOK (líneas verde, cian y roja) para una muestra p-i-n de a-Si:H con una capa intrínseca de 600 nm de espesor a temperatura ambiente. A modo de comparación se presentan dos variantes de la aproximación ARDOK donde se realiza la integración numérica de la eficiencia de generación entre los CNFCA (siglas NI-ARDOK) y entre los niveles de demarcación (siglas NIND-ARDOK).

### 5.3 Explorando la consistencia del método ARDOK

Para verificar la exactitud de la aproximación ARDOK se adoptaron nuevamente como referencia los resultados obtenidos por el formalismo de SRH, es decir, se compararon las curvas J-V obtenidas con ambos métodos utilizando los mismos parámetros eléctricos y ópticos,

buscando una coincidencia entre ambas curvas. Nuestra aproximación fue testada modelando la densidad de DBs con los métodos UDM y DPM en un dispositivo p-i-n de a-Si:H para diferentes espesores de capa intrínseca, densidades de estados, temperaturas y gaps de movilidades. En los distintos escenarios se obtuvieron resultados similares. En la Figura 5.7 se muestran los resultados más representativos. El error relativo se muestra únicamente para un dispositivo p-i-n de a-Si:H con una capa intrínseca de 600 nm de espesor y a temperatura ambiente. Para los demás dispositivos modelados el error relativo muestra un comportamiento similar. También se muestra en la figura el comportamiento de la aproximación ARDOK en un dispositivo p-i-n de  $\mu\text{c-Si:H}$  con una capa intrínseca de 2000 nm de espesor. En todos los casos y escenarios estudiados la aproximación resultó satisfactoria.



**Figura 5.7:** Comparación de las curvas J-V a oscuras para tensiones inversas obtenidas con el formalismo de SRH y la aproximación ARDOK para varios dispositivos p-i-n de a-Si:H a diferentes temperaturas y espesores de capa intrínseca, modelando la densidad de DBs con el modelo de DPM. La comparación también se realizó para una muestra p-i-n de  $\mu\text{c-Si:H}$  con una capa intrínseca de 2000 nm de espesor a temperatura ambiente, siendo la densidad de DBs modelada con UDM. Se muestra el error relativo únicamente de la curva correspondiente al dispositivo p-i-n de a-Si:H con una capa intrínseca de 600 nm de espesor y a temperatura ambiente.

La aproximación ARD0K, en comparación con el formalismo de SRH, tiende a sobreestimar la densidad de corriente  $J$  para tensiones inversas por encima de  $-0.25$  V y a subestimarla para tensiones inversas menores a ese valor. Igualmente, como puede verse en la Figura 5.7, la curva J-V de la aproximación ARD0K replica con bastante exactitud la obtenida con el formalismo de SRH. Este resultado es similar al obtenido con la AST para condiciones idénticas de operación (a oscuras y con tensión inversa aplicada) como se discutió en la Sección 3.3.1 del Capítulo 3.

En el modelo de DPM los estados de defecto se asumen anfotéricos, mientras que la aproximación AST fue derivada para estados desacoplados. En la Sección 4.3 del Capítulo 4 se abordó la implementación de la aproximación AST cuando la densidad de defectos se evalúa con el modelo de DPM. Las conclusiones y comentarios recientemente expuestos acerca de la exactitud y del uso combinado de ambas aproximaciones (AST0K y ARD0K) para evaluar las curvas J-V a oscuras y bajo una tensión inversa aplicada cuando se utiliza el modelo de UDM, son válidas también para el modelo de DPM. La única diferencia es que los errores relativos al comparar las curvas J-V son menores cuando se aplica el modelo de DPM, como ya se expuso en la Sección 4.3 debido a que la aproximación AED introduce un error de signo opuesto al originado por la aproximación AST [69].

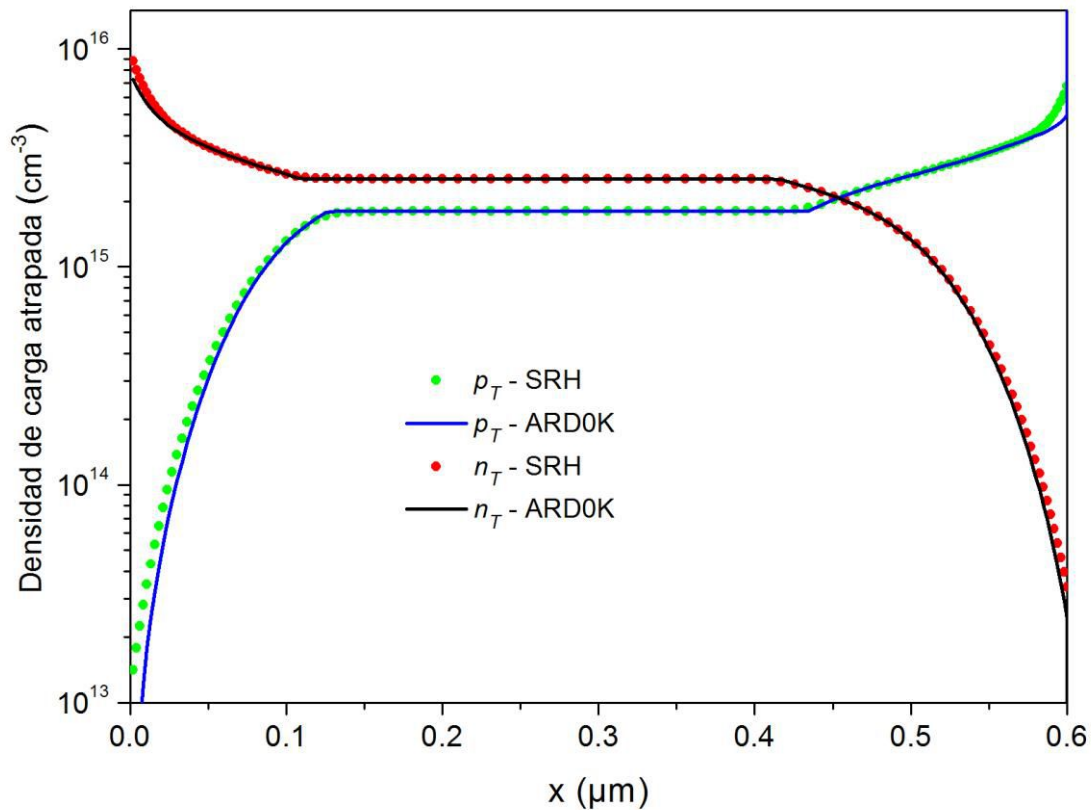
En la Figura 5.8 se comparan las concentraciones de electrones y huecos atrapados calculados con el formalismo de SRH y con la aproximación ARD0K en un dispositivo p-i-n de a-Si:H donde los DBs son modelados con UDM, a temperatura ambiente y bajo un voltaje aplicado de  $-1$  V. Si bien existe una pequeña diferencia cerca de las interfaces p/i e i/n, se puede observar que las curvas son muy similares. Por lo tanto se puede afirmar que el campo eléctrico calculado con la aproximación ARD0K también tiene un alto grado de exactitud.

## 5.4 Refinamiento del método

La Figura 5.6 contiene las curvas J-V calculadas con diferentes variaciones de la aproximación ARD0K. La opción NI-ARD0K evalúa la densidad de corriente a partir de las Ecuaciones (5.15), pero integra la eficiencia de generación de la Ecuación (5.11) numéricamente en lugar de hacerlo analíticamente, es decir, reemplazando las integrales de las Ecuaciones (5.12) por sumatorias:

$$G_{E > E_{T0}} = \int_{E_{fpt}}^{E_{T0}^*} g_{gap}(E_t) \eta_{G-E > E_{T0}}(E_t) dE_t \approx \sum_{i=E_{T0}}^{E_c} g_{gap}(E_{t_i}) \eta_{G-E > E_{T0}}(E_{t_i}), \quad (5.19-a)$$

$$G_{E_t < E_{T0}} = \int_{E_{fnt}}^{E_{T0}} g_{gap}(E_t) \eta_{G-E_t < E_{T0}}(E_t) dE_t \approx \sum_{i=E_v}^{E_{T0}} g_{gap}(E_{t_i}) \eta_{G-E_t < E_{T0}}(E_{t_i}). \quad (5.19-b)$$



**Figura 5.8:** Comparación de las concentraciones de electrones y huecos atrapados obtenidas con el formalismo de SRH y con la aproximación ARD0K para un dispositivo p-i-n de a-Si:H con una capa intrínseca de 600 nm de espesor bajo condiciones de oscuridad, a temperatura ambiente, y operando bajo una tensión de -1V.

Nuevamente cabe la aclaración de que la derivación fue realizada para una densidad de estados  $g_{gap}(E_t)$  genérica, con el objetivo de que las expresiones sean válidas tanto para estados donores como aceptores. La densidad de carga atrapada se evalúa integrando numéricamente el producto entre la densidad de estados  $g_{gap}(E_t)$  y las funciones de ocupación  $f_n$  y  $f_p$ . La curva J-V a oscuras obtenida con la opción NI-ARD0K se ajusta mejor a la curva obtenida con el formalismo de SRH (curva de referencia) en comparación con la obtenida con la aproximación ARD0K (ver Figura 5.6). El error relativo es muy bajo, especialmente para tensiones inversas mayores a -0,8 V, lo que indica que la aproximación ARD0K podría ser mejorada más allá de lo discutido hasta ahora.

La implementación de la variación NI-ARD0K requirió seguir dos pasos: a) reemplazar la integración analítica de la eficiencia de generación respecto de la energía (Ecuaciones 5.12) por la integración numérica, y b) las funciones de ocupación de electrones y huecos de la Ecuación (5.16) deben aproximarse por funciones escalón para así evaluar las concentraciones de los portadores atrapados y el campo eléctrico. De manera análoga a lo realizado en la aproximación



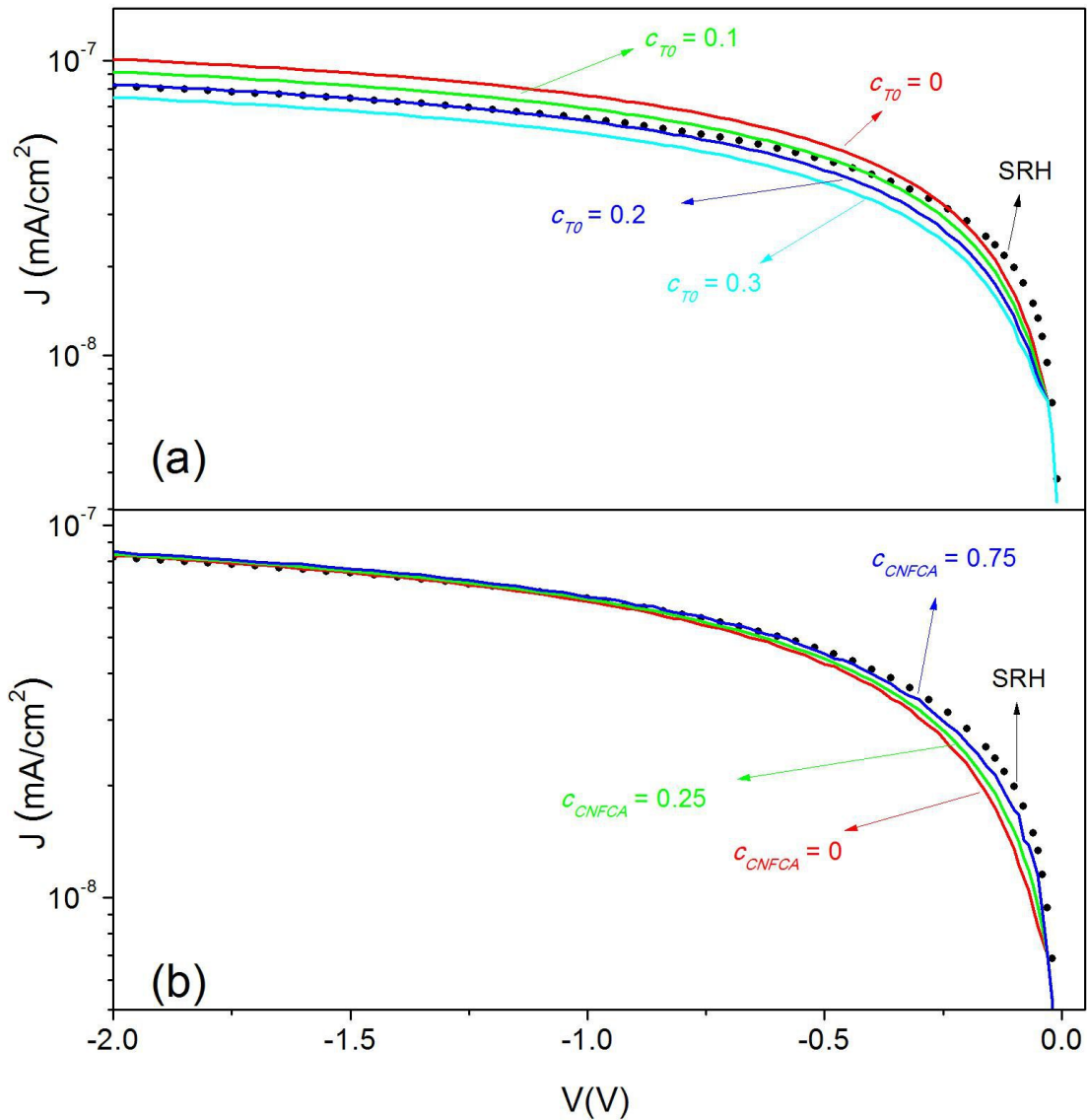
AST0K, en la opción NI-ARD0K se implementaron los filtros Butterworths paso alto y paso bajo para suavizar las discontinuidades en las energías  $E_{fnt}$ ,  $E_{fpt}$  y  $E_{T0}$  y asegurar la convergencia de nuestro código. Específicamente, se definieron los siguientes filtros para la opción NI-ARD0K:  $BPA(E_{fnt})$  y  $BPB(E_{T0})$  para energías  $E_{fnt} \leq E_t \leq E_{T0}$  y  $BPA(E_{T0}^*)$  y  $BPB(E_{fpt}^*)$  para energías  $E_{fpt}^* \leq E_t \leq E_{T0}^*$ .

Las aproximaciones  $e_n(E_t) \ll e_p(E_t)$  para energías  $E_t < E_{T0}$  y  $e_n(E_t) \gg e_p(E_t)$  para energías  $E_t > E_{T0}$  adoptadas en las aproximaciones ARD0K y AST son bastante exactas para los niveles de energías que se encuentran algunos  $kT$ s alejados de  $E_{T0}$  ( $E_{T0}^*$ ), pero pueden ser cuestionables cerca de  $E_{T0}$  ( $E_{T0}^*$ ) como se ilustra en la Figura 5.2(b). La línea de puntos verde indica cómo se incrementa significativamente la eficiencia de generación de la aproximación ARD0K por sobre la del formalismo de SRH para energías cercanas a  $E_{T0}$  ( $E_{T0}^*$ ), alcanzando un valor máximo de  $0,031 \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}\text{eV}^{-1}$  (el valor 0,031 no se muestra en la figura por cuestiones de escala). La integración del exceso de la eficiencia de generación daría lugar a que la aproximación ARD0K nos entregue una densidad de corriente mayor a la producida por el formalismo de SRH. En la opción NI-ARD0K la incorporación de los filtros en  $E_{T0}$  ( $E_{T0}^*$ ) impide que la eficiencia de generación alcance valores excesivos, como se muestra también en la Figura 5.2(b) (línea azul). En la integración numérica, al sub-dividirse el gap en fragmentos de energías igualmente espaciados, la contribución del valor pico de la eficiencia de generación en  $E_{T0}$  (y  $E_{T0}^*$ ) a la corriente total se ve suavizada. Un efecto similar ocurre cuando la integración se realiza en forma analítica pero cambiando ligeramente los límites de integración.

Con el objeto de explorar la sensibilidad de la aproximación ARD0K a los límites de integración de las Ecuaciones (5.12), los valores  $E_{T0}$  y  $E_{T0}^*$  fueron reemplazados por  $E_{T0} - c_{T0}kT$  y  $E_{T0}^* - c_{T0}kT$  respectivamente, donde  $c_{T0}$  es una constante ajustable. La Figura 5.9(a) muestra la dependencia de la curva J-V a oscuras respecto de la constante  $c_{T0}$ . Como puede observarse, cuando se adopta el valor 0,2, es decir, cuando se restringe la integración analítica hasta  $1/5$  de  $kT$  a ambos lados de  $E_{T0}$ , las curvas J-V a oscuras calculadas con la aproximación ARD0K y con el formalismo SRH resultan casi superpuestas para valores de tensiones inversa altos, y el error relativo disminuye considerablemente. El valle observado en la Figura 5.2(b) para  $E = 0,83 \text{ eV}$  correspondiente a la curva obtenida con la aproximación ARD0K para  $c_{T0}$  igual a 0,2 (línea roja), se debe a la inclusión de los filtros  $BPB(E_{T0})$  y  $BPA(E_{T0}^*)$ . Se hicieron pruebas para diferentes valores de  $c_{T0}$ , concluyéndose que 0,2 era el más apropiado.

Por otra parte, el ajuste de la curva J-V a bajas tensiones puede ser mejorado introduciendo otra constante ajustable,  $c_{CNFCA}$ , con el objeto de extender ligeramente el rango de integración más allá de los CNFCA invertidos. Los valores  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  fueron reemplazados por  $E_{fnt} - c_{CNFCA}kT$  y  $E_{fpt} - c_{CNFCA}kT$  respectivamente. Como puede observarse en la Figura 5.9(b) el mejor

ajuste se alcanza para  $c_{CNFCA} = 0,75$ . La Figura 5.2(a) muestra una mejora en el ajuste de la eficiencia de generación en torno a los valores  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  cuando se corrigen los límites de integración de la aproximación ARDOK con  $c_{CNFCA}$  (ver línea roja). Utilizando estas nuevas correcciones las curvas J-V a oscuras calculadas con SRH y con la aproximación ARDOK se vuelven muy similares también a bajas tensiones.



**Figura 5.9:** Comparación de las curvas J-V obtenidas con la aproximación ARDOK cuando se aplican los coeficientes de corrección  $c_{T0}$  y  $c_{CNFCA}$  a los límites de integración de las Ecuaciones (5.12). En (a) los valores  $E_{T0}$  y  $E_{T0}^*$  se reemplazan por  $E_{T0} - c_{T0}kT$  y  $E_{T0}^* - c_{T0}kT$ , respectivamente, y en (b)  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  se reemplazan por  $E_{fnt} - c_{CNFCA}kT$  y  $E_{fpt} - c_{CNFCA}kT$ , respectivamente. El dispositivo es una juntura p-i-n de a-Si:H con una capa intrínseca de 600 nm de espesor que opera a oscuras y a temperatura ambiente, bajo tensión inversa.

Con el objeto de refinar nuestra aproximación en forma académicamente más elegante se investigó también un enfoque alternativo. Los CNFCA,  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ , de las Ecuaciones (5.12) fueron reemplazados por los niveles o energías de demarcación (ND) definidos por Rose [70] que corresponden a las energías donde los electrones (huecos) tienen la misma probabilidad de ser emitidos a la banda de conducción (valencia) que de recombinarse, es decir, donde se cumplen las siguientes condiciones:  $e_n = p v_{th} \sigma_p$  y  $e_p = n v_{th} \sigma_n$ .

A partir de estas igualdades se pueden determinar las expresiones de los ND para electrones ( $E_{ND-n}$ ) y huecos ( $E_{ND-p}$ ) como [70]:

$$E_{ND-n} = E_c + kT \ln \left( \frac{p \sigma_p}{N_c \sigma_n} \right), \quad (5.20-a)$$

$$E_{ND-p} = E_v - kT \ln \left( \frac{n \sigma_n}{N_v \sigma_p} \right). \quad (5.20-b)$$

Notar que al requerirse que la probabilidad de emisión de un portador sea igual sólo a la probabilidad de captura del portador de carga contraria, y no a la suma de probabilidades de captura de ambos portadores, las expresiones de  $E_{ND-n}$  y  $E_{ND-p}$  resultan más simples que las de los CNFCA. Al reemplazar los CNFCA por  $E_{ND-n}$  y  $E_{ND-p}$  (que denotaremos brevemente como ND) las expresiones para las tasas de generación se vuelven más simples (ver Ecuación 5.14):

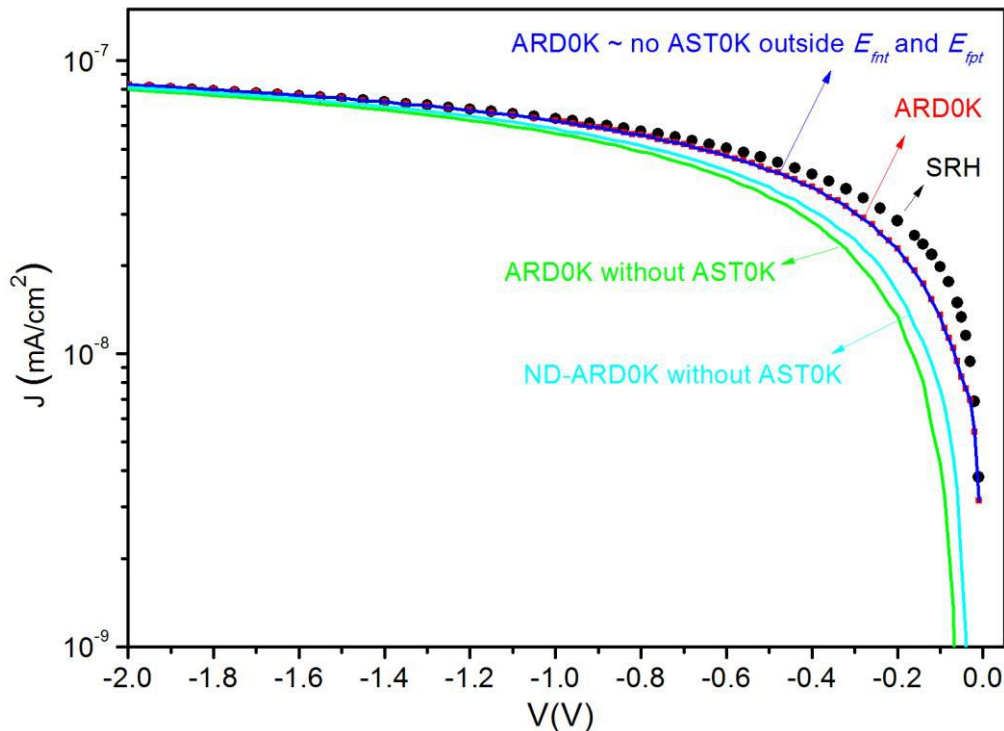
$$G_{E < E_{T0}} = v_{th} \sigma_n n_i kT g_{gap}(E_{T0}) \left[ \left( \frac{\sigma_p}{\sigma_n} \right)^{1/2} - \left( \frac{p \sigma_p}{n_i \sigma_n} \right) \right], \quad (5.21-a)$$

$$G_{E > E_{T0}} = v_{th} \sigma_p n_i kT g_{gap}(E_{T0}) \left[ \left( \frac{\sigma_n}{\sigma_p} \right)^{1/2} - \left( \frac{n \sigma_n}{n_i \sigma_p} \right) \right]. \quad (5.21-b)$$

A la variación de la ARDOK, donde la curva J-V a oscuras se obtiene a partir de reemplazar las Ecuaciones (5.21) en las Ecuaciones (5.15), se identificará con las siglas ND-ARDOK. Es importante notar que las Ecuaciones (5.21) se pueden utilizar únicamente en la región espacial donde los CNFCA están invertidos, ya que fuera de esa región ambos niveles de demarcación están por encima o por debajo de la energía  $E_{T0}$  (ver Figura 5.5). Para tensiones inversas los ND (al igual que los cuasi-niveles de Fermi) están invertidos para cualquier voltaje aplicado, no importa qué tan pequeña sea la tensión. La Figura 5.5 muestra que en la región espacial cercana al cruzamiento de los CNFCA, el ND y el CNFCA del portador minoritario se apartan uno de otro añadiendo más estados del gap a la integral de las Ecuaciones (5.12). Para tensiones inversas altas las curvas J-V a oscuras calculadas con las opciones ARDOK y ND-ARDOK son muy similares, mientras que para tensiones inversas bajas los resultados obtenidos con la opción ND-ARDOK son más cercanos a los producidos por el formalismo SRH utilizado como referencia. También se exploró la integración numérica utilizando los niveles de demarcación en la opción denotada como NIND-ARDOK, obteniendo muy buenos resultados como se muestran

en la Figura 5.6. Para esta opción también se definieron los filtros Butterworth paso alto y paso bajo para las energías  $E_{ND-n}$ ,  $E_{ND-p}$  y  $E_{T0}$ , siguiendo el mismo procedimiento utilizado para la opción NI-ARDOK.

Tanto en la aproximación ARDOK como en la opción ND-ARDOK la densidad de corriente es subestimada a tensiones inversas bajas si no se implementara la aproximación ASTOK en paralelo. Para mostrar claramente cómo impacta la contribución de la aproximación ASTOK en las curvas J-V a oscuras, se re-calcularon las curvas J-V recurriendo a algunas modificaciones. En primer lugar, se excluyó la contribución de los estados del gap ubicados entre los CNFCA y los bordes de banda y, en segundo lugar, se despreció la contribución de la aproximación ASTOK en los estados de las regiones en las cuales los CNFCA no están invertidos, es decir, de los estados ubicados espacialmente entre los cruces de  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$  y las interfaces p/i e i/n. La Figura 5.10 muestra que en la primera modificación realizada las diferencias son casi imperceptibles, mientras que en la segunda modificación propuesta las diferencias se vuelven muy significativas para tensiones inversas bajas.



**Figura 5.10:** Comparación de las curvas J-V obtenidas con la aproximación ARDOK cuando se excluyen la contribución de los estados del gap ubicados entre los CNFCA y los bordes de banda, y cuando se desprecia la contribución de la ASTOK en los estados de las regiones donde los CNFCA no están invertidos. El dispositivo es una juntura p-i-n de a-Si:H con una capa intrínseca de 600 nm de espesor operando a oscuras y temperatura ambiente, y sometido a tensiones inversas.

## 5.5 Conclusiones

Se desarrolló un nuevo algoritmo, identificado con las siglas ARD0K, para simplificar la evaluación de las curvas características J-V de dispositivos de película delgada que operan a oscuras y bajo una tensión inversa aplicada. Fue diseñado para reemplazar la aproximación AST0K en las regiones donde los cuasi-niveles de Fermi para carga atrapada,  $E_{fnt}$  y  $E_{fpt}$ , se encuentran invertidos en energía, escenario que aparece cuando se aplica una tensión inversa por encima de cierto valor mínimo a junturas que operan en condiciones de oscuridad. La aproximación ARD0K puede ser aplicada cuando la densidad de estados de defecto se modela tanto con el modelo de densidad uniforme como con el modelo de defect pool.

Cuando una juntura p-i-n es sometida a una tensión inversa pequeña la aproximación ARD0K debe combinarse con la aproximación AST0K para reproducir apropiadamente la curva J-V obtenida con el formalismo de SRH que en nuestro estudio fue utilizado como referencia. La contribución de la generación de pares e-h de los estados del gap ubicados en las regiones espaciales de la capa intrínseca donde los CNFCA no están invertidos para tensiones inversas bajas, no es despreciable. En cambio, para tensiones inversas elevadas la aproximación ARD0K puede reproducir la curva J-V obtenida con el formalismo de SRH sin necesidad de incluir la contribución de la aproximación AST0K.

La diferencia de los valores para la densidad de corriente en función del voltaje obtenida entre el formalismo de SRH y la aproximación ARD0K, en condiciones de oscuridad y para tensiones inversas mayores a 0,1 V ( $|V| = 0,1$  V), es menor al 10% (25%) cuando se adopta el modelo de DPM (UDM). Para tensiones inversas altas el error relativo se puede minimizar despreciando la contribución de los pares e-h que se generan en los estados del gap ubicados a menos de  $0,2kT$  del nivel de trampa intrínseco  $E_{T0}$ . Para tensiones inversas bajas, en cambio, el error relativo se puede minimizar extendiendo la región de contribución de la generación térmica de pares e-h en  $0,75kT$  más allá de los cuasi niveles de Fermi para carga atrapada que se encuentran invertidos. La curva J-V a oscuras calculada con la aproximación ARD0K se acerca incluso más a la obtenida con el formalismo de SRH para tensiones inversas bajas, cuando se computa la generación térmica de pares e-h entre los estados del gap delimitados por los niveles de demarcación invertidos, en lugar de entre los cuasi niveles de Fermi para carga atrapada.

La aproximación ARD0K se puede aplicar a otros detectores basados en semiconductores amorfos y a dispositivos como celdas solares basadas en junturas p-i-n, barreras Schottkys, estructuras tándem, etc. que operan bajo condiciones de oscuridad o bajo iluminación con fuentes luminosas de intensidad muy débil (por debajo de  $10^{10}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s). Sus expresiones

simples facilitan el análisis de la física de transporte que controla la forma de la curva corriente – tensión a oscuras para tensiones inversas.

## Capítulo 6

# Efecto photogating complementario en estructuras n-i-p de Silicio Microcristalino

### 6.1 Introducción

Los dispositivos de simple o múltiple juntura basados en a-Si:H o en  $\mu$ c-Si:H encuentran aplicación no solo como celdas fotovoltaicas sino también como detectores de radiación en el rango UV, visible e IR. Un fenómeno peculiar que presentan estos dispositivos que contienen una gran variedad y cantidad de defectos en el gap de movilidad es la posibilidad de dar lugar a respuestas espectrales por encima de la unidad. Este fenómeno conocido como efecto photogating (EPG) o respuestas anómalas, fue reportado por varios autores. La primera evidencia fue presentada en 1984 por Maruska et. al, quienes demostraron la existencia de  $SR > 1$  en estructuras Schottky de a-Si:H con un espesor de capa intrínseca de 400 nm previamente expuesta a un tratamiento de iluminación AM1 por un período de 400 horas (tratamiento denominado "light soaking") [71]. Las respuestas anómalas se observaron cuando el frente de la muestra fue iluminado por una luz auxiliar de polarización azul continua (dc). El valor de SR más alto obtenido fue de 1,06 para un haz de prueba con longitud de onda de 550 nm aproximadamente. En los experimentos SR el haz monocromático de prueba es usualmente modulado mecánicamente con un "chopper" (ac) y su intensidad es elegida uno o dos órdenes de magnitud menor que la intensidad de la luz auxiliar. El origen del fenómeno fue atribuido a la modulación de la resistencia serie que presenta la región posterior de la zona intrínseca libre de campo eléctrico.

En 1992 Hou y Fonash predijeron con simulaciones numéricas la presencia de  $SR > 1$  en estructuras p-i-n de a-Si:H iluminadas con luz de color azul luego de un tratamiento de "light soaking" en condiciones de corto-circuito [72]. En este caso el flujo de la luz azul auxiliar fue

asumido de  $6 \times 10^{15}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s con una longitud de onda central de 460 nm mientras que el haz de prueba tenía una intensidad de  $10^{15}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s. La capa intrínseca presentaba un espesor de 400 nm y la densidad de defectos fue estimada en  $2,4 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup>. La máxima respuesta predicha fue superior a 1,5 para longitudes de onda en el rango 600-700 nm. Utilizando el código numérico AMPS-1D demostraron que la luz azul fuertemente absorbida en los pocos nanómetros vecinos al contacto frontal crea una región de campo eléctrico de menor intensidad en la parte frontal de la capa intrínseca del dispositivo cercana a la interfaz p/i y al mismo tiempo una región de campo eléctrico de mayor intensidad en la parte posterior de la capa intrínseca del dispositivo. O sea la luz auxiliar introduce una redistribución del campo eléctrico existente en condiciones de equilibrio disminuyendo su valor en la zona frontal y aumentándolo en la zona posterior. La integral del campo respecto de la posición a lo largo del dispositivo debe permanecer constante debido a que los potenciales en los contactos no son modificados (la SR fue evaluada en condiciones de corto-circuito). La luz monocromática roja con un flujo menor al de la auxiliar azul genera pares e-h a lo largo de todo el dispositivo, que al ser atrapados en un número suficiente por los estados del gap dan lugar a un incremento del campo eléctrico en la zona anterior de la capa intrínseca y a una disminución del mismo en la zona posterior de la capa intrínseca permitiendo la liberación de los portadores generados por la luz azul auxiliar que no podían atravesar la zona anterior de la capa intrínseca sin recombinarse. El fenómeno fue denominado por los autores como el efecto “photogating” debido a que una fuente de luz abre la puerta (gate) a la aparición de  $SR > 1$ . Posteriormente, la predicción del efecto photogating fue confirmada experimentalmente por la empresa Solarex de Filadelfia, USA, en muestras p-i-n de a-Si:H sometidas a tratamientos de “light-soaking”.

En 1994 Rubinelli encontró evidencias de la presencia de  $SR > 1$  en junturas Schottky con una estructura Ni-(i)a-Si:H/(n)a-Si:H donde la capa de (i)a-Si:H se encuentra en el estado inicial al ser polarizadas con un tensión directa moderada por debajo de la condición de bandas planas [73]. El flujo de luz azul auxiliar fue de  $8 \times 10^{15}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s con una longitud de onda central de 400 nm y el haz de prueba tenía una intensidad de  $6 \times 10^{13}$  -  $2 \times 10^{14}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s. La capa intrínseca poseía un espesor de 3000 nm y la capa (n) de 30 nm. La máxima respuesta obtenida fue alrededor de 1,75 para una longitud de onda aproximadamente entre 640 - 660nm. Los resultados fueron también interpretados con el software AMPS-1D utilizando argumentos similares a los de Hou y Fonash [72].

En 1999 C. Main et al. observaron SR muy elevadas cercanas a 50 en junturas p-i-n de a-Si:H de espesores elevados (3400 nm) al ser polarizadas con tensiones inversas [74]. En sus experimentos se utilizó una luz azul auxiliar de  $1,5 \times 10^{15}$  fotones/cm<sup>2</sup>/s con una longitud de onda centrada en 450 nm. El haz de prueba monocromático tenía una intensidad de  $7,4 \times 10^{11}$



fotones/cm<sup>2</sup>/s que se mantuvo constante para todas las longitudes de onda. Las tensiones inversas se variaron entre -5 V y -40 V y la muestra fue sujeta a un tratamiento “light soaking” de diferentes duraciones utilizando una fuente de luz AM1.5. Las SR mostraron un pico ancho con una especie de “plateau” entre 580 nm y 630 nm. Las máximas respuestas resultaron función del tiempo de “light soaking” empleado y mayores para tensiones inversas más elevadas cuando el tiempo de “light soaking” se escogía más prolongado. Los autores interpretaron sus resultados con simulaciones numéricas que mostraron una significativa dependencia de la SR a la densidad de DBs presente en la capa intrínseca así como a las secciones eficaces de captura escogidas para las mismas.

La luz auxiliar o de polarización azul y el haz de prueba rojo se reconocerán de aquí en adelante con las siglas BBL (Blue Bias Light) y RML (Red Monochromatic Light) respectivamente. El término photogating fue inicialmente concebido para identificar las respuestas anómalas cuando las longitudes de onda del haz de prueba se encuentran en la región del rojo y las muestras están iluminadas con una BBL. Sin embargo, en 1995 Bae et al. reportaron  $SR > 1$  para un haz de prueba monocromático en la región azul del espectro utilizando una luz DC auxiliar de color rojo en estructuras heterojunturas p-i-n de a-Si:H/a-SiGe:H [75]. A este fenómeno se lo conoce en la literatura como *efecto photogating complementario* (EPGC). La luz auxiliar o de polarización roja y el haz de prueba azul se reconocerán, respectivamente, con las siglas RBL (Red Bias Light) y BML (Blue Monochromatic Light). Tanto la luz auxiliar como la de prueba incidían sobre el contacto frontal el dispositivo. Los dispositivos utilizados por Bae tenían una estructura del tipo p- $i_1$ - $d_1$ - $d_2$ - $i_2$ -n donde  $i_1$  y  $i_2$  eran capas de a-Si:H denominadas interfaces, y  $d_1$  y  $d_2$  eran capas intrínsecas ya sea de a-Si:H o bien de a-SiGe:H. Los autores asumieron que las interfaces presentaban una densidad de DBs superior a las capas intrínsecas. Los gaps de movilidades de las capas intrínsecas de a-Si:H y de a-SiGe:H fueron asumidos de 1,72 eV y de 1,34 eV respectivamente. La heteroestructuras se denominan “Back Loaded” cuando la capa de a-SiGe:H se coloca por detrás de la de a-Si:H (o sea  $d_1$  de a-Si:H y  $d_2$  de a-SiGe:H) y “Front Loaded” cuando la capa de a-SiGe:H se coloca por delante de la de a-Si:H (o sea  $d_1$  de a-SiGe:H y  $d_2$  de a-Si:H). Los autores también utilizaron el software AMPS-1D para explicar sus resultados. Las densidades de DBs utilizadas en las simulaciones fueron de  $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  -  $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  en las interfaces, de  $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  en la capa intrínseca a-Si:H y de  $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  en la capa intrínseca a-SiGe:H. El fenómeno de photogating se observó únicamente en las estructuras Back Loaded con RBL. El máximo valor de SR obtenido para el EPGC fue de 1,3 para un haz de prueba de 380 - 400 nm cuando se adoptaron interfaces altamente defectuosas ( $DB \approx 4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ). El fenómeno EPGC no aparecía para interfaces menos defectuosas ( $DB \approx 2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  o menores). Los

resultados experimentales mostraban una elevada respuesta en el azul pero ligeramente inferior a la unidad.

En 1993 Chaterjee también utilizando simulaciones numéricas identificó las condiciones necesarias para la existencia del EPGC en estructuras Schottky del tipo Pd/(i)a-Si:H/(n)a-Si:H [76] con capas intrínseca de 1000 nm de espesor. Chaterjee demostró que en estos dispositivos la aparición de  $SR > 1$  en el espectro azul está condicionada a la existencia de regiones significativamente defectuosas en las capas cercanas a la interfaz metal/(i)a-Si:H. La autora concluyó que para obtener  $SR \approx 1,1$  en las longitudes de onda por debajo de 500 nm es necesario contar con una capa de 100 nm de espesor contigua a la interfaz Pd/(i)-a-Si:H que albergue una densidad de DBs de aproximadamente  $10^{18}\text{cm}^{-3}$ . La densidad de DBs en el seno de la capa intrínseca fue adoptada del orden de  $10^{15}\text{cm}^{-3}$ .

Más recientemente, en 2010, Li et al. presentaron evidencias experimentales de la existencia de  $SR > 1$  en estructuras p-i-n de  $\mu\text{-Si:H}$  y nano-c-Si:H en la zona del rojo-IR del espectro iluminando la muestra con BBL [77]. La dependencia obtenida para SR como función de las intensidades de la BBL y la RML fueron analizados con el código D-AMPS-1D encontrándose consistencia entre las predicciones teóricas y los resultados experimentales. Se demostró que el máximo de SR aumenta con la intensidad de la BBL y disminuye con la intensidad de RML. Los flujos de BBL y RML utilizados en el trabajo fueron  $4 \times 10^{16}$  fotones/ $\text{cm}^2/\text{s}$  y  $3 \times 10^{13}$  fotones/ $\text{cm}^2/\text{s}$  respectivamente. La SR presenta un máximo de 1,6 - 1,63 en 700 nm aproximadamente. La longitud de onda central de la luz auxiliar era de 380 nm, que se obtuvo a partir de un filtro con ancho de banda considerable. El uso de una luz azul con un espectro más angosto hubiera dado lugar a SR más elevadas. La capa intrínseca poseía un espesor de 1300 nm. La física utilizada para describir el fenómeno fue similar a la ya utilizadas en contribuciones previas [72,73]. Se estudió la dependencia de la SR con respecto a la densidad de DBs, el espesor de la capa intrínseca, las secciones eficaces de captura y las movilidades de portadores libres.

Según nuestros conocimientos no han sido publicados aún trabajos donde se investigue la posible existencia del EPGC en estructuras n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$  y nano-c-Si:H. Debido a que el  $\mu\text{-Si:H}$  presenta un bajo gap de movilidad las pérdidas por recombinación en la capa intrínseca son significativas. Por lo tanto la modulación del campo eléctrico por el haz monocromático utilizado en la medición de la SR puede dar lugar a una modulación importante de la tasa de recombinación que convierten al  $\mu\text{-Si:H}$  en un material interesante para explorar la existencia de  $SR > 1$  tanto cuando se utiliza una luz auxiliar azul como roja. En este capítulo se exploran con simulaciones numéricas las condiciones necesarias para la observación del fenómeno photogating complementario en estructuras p-i-n o n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$ . Sin adentrarse en un

análisis profundo y riguroso del fenómeno se estudiará la sensibilidad de las  $SR > 1$  respecto a diferentes parámetros eléctricos de estos dispositivos.

## 6.2 Metodología

La estructura básica utilizada en este estudio es la misma que utilizaron Li et al [77] para estudiar las respuestas anómalas bajo iluminación BBL en junturas n-i-p de  $\mu\text{c-Si:H}$ . La descripción completa de la muestra es: sustrato/Ag superficie rugosa/reflector posterior de ZnO/(n)- $\mu\text{c-Si:H}$ /(i)- $\mu\text{c-Si:H}$ /(buffer)-a-Si:H/(p)- $\mu\text{c-Si:H}$ /ITO/Au (contacto con estructura de grilla). El área activa del dispositivo es de  $0,13 \text{ cm}^2$ . El espesor de la capa ITO es 80 nm, las capas dopadas p- y n- tienen espesores de 20 nm y 27 nm, respectivamente, y la capa intrínseca donde se absorbe mayoritariamente la luz es de aproximadamente de  $1,3 \mu\text{m}$ . Todas las capas de silicio fueron depositadas en un sistema de múltiple cámara UHV en Utrecht University (Holanda) denominado PASTA. La capa intrínseca fue depositada por la técnica de Hot-Wire CVD utilizando dos filamentos de Tántalo (Ta) por los que hizo pasar una corriente de 10,5 A alcanzándose una temperatura de filamento de  $1850 \text{ }^\circ\text{C}$  que resulta en una temperatura de sustrato de  $250^\circ\text{C}$ . La relación  $R_{\text{H}}=\text{H}_2/(\text{H}_2+\text{SiH}_4)$  es típicamente de 0,952. Las capas dopadas fueron depositadas por la técnica de CVD en cámaras separadas. El sustrato es Asahi tipo-U sobre los que depositaron una capa de Ag a temperatura elevada para lograr la rugosidad apropiada y una capa de ZnO con la técnica de "sputtering". Más información sobre la muestra puede encontrarse en la referencia [77].

Para medir la SR se utilizó un equipo que permite la aplicación simultánea de una luz continua auxiliar y de un voltaje a la muestra. Es decir, es posible medir la eficiencia de colección externa de dispositivos bajos diferentes condiciones de iluminación y bajo la aplicación de diferentes tensiones. La fuente de luz utilizada para producir tanto la luz auxiliar como el haz monocromático es una lámpara Xenon. La luz auxiliar roja se obtiene mediante el uso de un filtro pasa bajo RG630 transparente para longitudes de onda mayores a 630 nm. Se interpuso además un filtro KG1 para cortar la luz IR extra. El flujo de fotones integrado de la luz auxiliar es de  $7 \times 10^{16}$  fotones/ $\text{cm}^2/\text{s}$ . El ancho de banda del monocromador es de aproximadamente 10 nm. El haz monocromático de prueba se hace pasar a través de un "chopper" óptico para producir una luz AC, y la componente AC de la corriente que arroja la muestra se mide con un amplificador Lock-In en forma sincrónica.

La curva densidad de corriente - voltaje (J-V) fue medida con un simulador solar WACOM de doble haz manteniéndose las muestras a  $25 \text{ }^\circ\text{C}$ . Los parámetros ópticos fueron obtenidos a partir de la medición de espectros de reflexión y de transmisión de películas

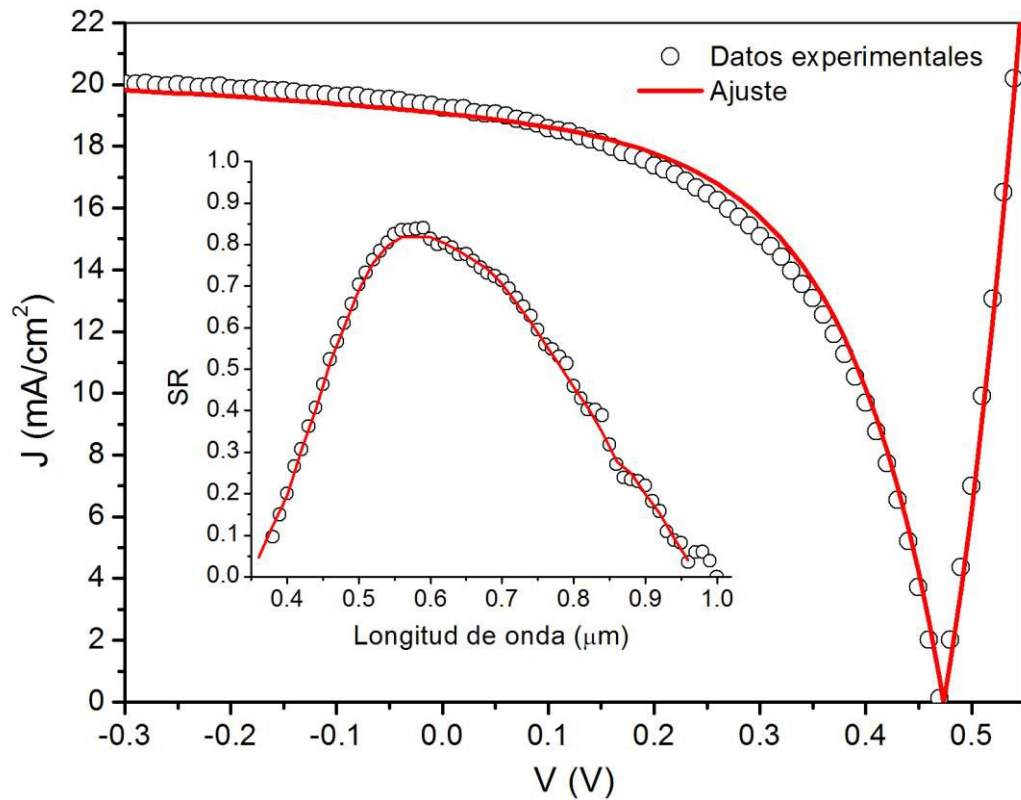
delgadas de  $\mu\text{-Si:H}$ . La densidad global de defectos y la pendiente de la cola de banda de valencia fueron extraídas con la técnica de DBP en muestras coplanares de  $\mu\text{-Si:H}$ . Los demás parámetros eléctricos fueron ajustados a los efectos de reproducir diferentes datos y curvas experimentales J-V y SR.

Las simulaciones numéricas se realizaron con el código D-AMPS descrito en el Capítulo 2. En los dispositivos de  $\mu\text{-Si:H}$  la densidad de estados se asumió uniforme en cada capa del mismo (modelo UDM) de manera similar a lo realizado para los dispositivos p-i-n de a-Si:H en el Capítulo 3. La densidad de defectos se representó con tres pares de Gaussianas  $D^-$ ,  $D^0$  y  $D^+$  que contienen estados donores y aceptores, separadas por la energía de correlación  $U$ . Los estados de colas se modelaron con dos distribuciones exponenciales que decrecen desde los bordes de banda hacia el medio del gap, y que contienen estados donores en la cola de la banda de valencia y aceptores en la cola de la banda de conducción.

En la Figura 6.1 se muestran los ajustes alcanzados para la curva J-V medida bajo iluminación AM1.5 y la SR obtenida bajo iluminación rojiza interponiendo entre la lámpara de Xenón y la muestra el filtro RG630 ya descrito. Las mediciones se realizaron a temperatura ambiente y la SR bajo condiciones de cortocircuito. En la Tabla 6.1 se muestra el listado de los parámetros eléctricos obtenidos más significativos para las capas dopadas y la intrínseca a los efectos de alcanzar los ajustes de la Figuras 6.1. La última columna de la tabla muestra los valores de una capa p- de a-SiC:H que se utilizó como alternativa a la original de  $\mu\text{-Si:H}$  en nuestras simulaciones y cuyos resultados se presentarán en la Sección 6.4. En una delgada zona de la capa intrínseca (180 nm) contigua a la interfaz n/i se asumió una densidad de defectos mayor que en el centro de la capa ( $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ) que representa la zona de transición desde el régimen amorfo al cristalino, también conocida como zona de incubación que se presenta en los primeros nanómetros de las capas de semiconductores micro-cristalinos crecidos con las técnicas de PECVD o HWCVD. La SR pudo ser ajustada tanto considerando esta zona de transición como sin considerarla, pero el  $FF$  y  $V_{oc}$  de la curva J-V iluminada no pudieron ser replicados cuando se ignoraba esta zona.

**Tabla 6.1:** Lista de parámetros eléctricos utilizados en el código D-AMPS para lograr los ajustes de las curvas características J-V y SR. El significado de los símbolos es el siguiente:  $W$  es el espesor de la capa,  $E_G$  es el gap de movilidad,  $N_c$  y  $N_v$  son la densidad efectiva de estados en las bandas de conducción y de valencia respectivamente,  $g_{co}$  y  $g_{vo}$  las densidad de estados en los bordes de la banda de conducción y de valencia,  $\mu_n$  y  $\mu_p$  las movilidades de electrones y huecos,  $E_D$  y  $E_A$  las pendientes de las colas de valencia y de conducción,  $t_n$  y  $t_p$  las sección eficaces de electrones y huecos en los estados de las colas,  $D^-$ ,  $D^0$  y  $D^+$  las densidades de estados encerradas por las tres Gaussianas,  $E^-$ ,  $E^0$  y  $E^+$  las posiciones (en energía) de los picos de dichas distribuciones,  $\sigma_D$  las desviaciones estándar,  $U$  es la energía de correlación,  $\sigma_n$  y  $\sigma_p$  son las secciones eficaces para electrones y huecos en los estados de los DBs,  $N_a$  y  $N_v$  son concentración de impurezas ionizadas aceptoras y donoras, respectivamente, y  $E_{ACT}$  es la energía de activación. Los superíndices  $+$ ,  $0$  y  $-$  indican el estado de carga de las trampas.

Parámetro	p- $\mu\text{c-Si:H}$	buffer-a-Si:H	i- $\mu\text{c-Si:H}$	n- $\mu\text{c-Si:H}$	p-a-SiC:H
$W$ (nm)	20	5	1300	27	20
$E_G$ (eV)	1,2	2	1,25	1,2	2
$N_c, N_v$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$3 \times 10^{19}$	$2 \times 10^{20}$	$6 \times 10^{19}$	$3 \times 10^{19}$	$2 \times 10^{20}$
$g_{co}, g_{vo}$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$2 \times 10^{20}$	$10^{21}$	$2 \times 10^{20}$	$2 \times 10^{20}$	$10^{21}$
$\mu_n$ ( $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ )	40	20	25	40	10
$\mu_p$ ( $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ )	4	2	10	4	1
$E_D$ (meV)	30	48	35	30	80
$E_A$ (meV)	25	30	23	25	45
$t_n^+ t_p^-$ ( $\text{cm}^2$ )	$5 \times 10^{-15}$	$1 \times 10^{-15}$	$1 \times 10^{-15}$	$5 \times 10^{-15}$	$1 \times 10^{-15}$
$t_n^0 t_p^0$ ( $\text{cm}^2$ )	$5 \times 10^{-17}$	$1 \times 10^{-17}$	$1 \times 10^{-17}$	$5 \times 10^{-17}$	$1 \times 10^{-17}$
$D^-$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$2 \times 10^{18}$	$3 \times 10^{15}$	$5.8 \times 10^{15}$	$2 \times 10^{18}$	$2.0 \times 10^{18}$
$D^0$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$1 \times 10^{18}$	$1.5 \times 10^{15}$	$2.9 \times 10^{15}$	$1 \times 10^{18}$	$1 \times 10^{18}$
$D^+$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$2 \times 10^{18}$	$3 \times 10^{15}$	$5.8 \times 10^{15}$	$2 \times 10^{18}$	$2.0 \times 10^{18}$
$E_D^-$ (eV)	0,235	0,67	0,26	0,235	0,9
$E_D^0$ (eV)	0,535	0,97	0,56	0,535	1,2
$E_D^+$ (eV)	0,835	1,27	0,86	0,835	1,5
$\sigma_D$ (eV)	0,1	0,13	0,1	0,1	0,13
$U$ (eV)	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2
$\sigma_n^+ \sigma_p^-$ ( $\text{cm}^2$ )	$5 \times 10^{-14}$	$1 \times 10^{-15}$	$1 \times 10^{-15}$	$5 \times 10^{-14}$	$5 \times 10^{-15}$
$\sigma_n^0 \sigma_p^0$ ( $\text{cm}^2$ )	$5 \times 10^{-15}$	$1 \times 10^{-16}$	$1 \times 10^{-17}$	$5 \times 10^{-15}$	$5 \times 10^{-16}$
$N_a N_d$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$9,5 \times 10^{18}$	-	-	$1,53 \times 10^{19}$	$5,15 \times 10^{18}$
$E_{ACT}$ (eV)	0,059	0,95	0,59	0,025	0,47



**Figura 6.1:** Ajuste de las curvas características J-V y SR experimentales de un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$  descrito en la sección 6.2. La curva J-V fue medida bajo condiciones de iluminación AM1.5 y la SR con iluminación de polarización roja utilizando el filtro RG630 transparente a  $\lambda > 630\text{nm}$  y en condiciones de corto circuito.

### 6.3 Origen del efecto photogating complementario (Luz de Polarización Roja)

Las ecuaciones derivadas en esta sección son válidas tanto para los efectos EPG como EPGC, por lo tanto, se reconocerá a la luz auxiliar y al haz monocromático con las siglas BL y ML respectivamente. En las mediciones de SR bajo una luz auxiliar la muestra es iluminada por dos fuentes: la luz auxiliar continua DC y el haz de prueba monocromático AC. Las densidades de flujo se reconocerán con las siglas  $\Phi_{BL}(\lambda)$  y  $\Phi_{ML}(\lambda)$ , respectivamente. La respuesta espectral de un dispositivo iluminando con una luz auxiliar puede expresarse como:

$$SR(\lambda) = \frac{J_{BL+ML}(\lambda) - J_{BL}(\lambda)}{e\Phi_{ML}(\lambda)}, \quad (6.1)$$

donde  $J_{BL+ML}(\lambda)$  es la densidad de corriente generada por la fracción correspondiente a la longitud de onda  $\lambda$  de la luz de polarización o auxiliar y el haz de prueba monocromático en forma conjunta,  $J_{BL}(\lambda)$  es la densidad de corriente generada por la fracción correspondiente a la longitud de onda  $\lambda$  de, solamente, la luz auxiliar, y  $e$  es la carga del electrón.

Cuando un dispositivo es iluminado con una fuente de luz monocromática con longitud de onda  $\lambda$ , la ecuación de continuidad para huecos en la posición  $x$  puede expresarse como:

$$\frac{1}{e} \frac{dJ_{BL-h}(x,\lambda)}{dx} = G_{BL}(x,\lambda) - R_{BL}(x,\lambda), \quad (6.2)$$

donde  $J_{BL-h}(x,\lambda)$  es la corriente de huecos,  $G_{BL}(x,\lambda)$  es la generación óptica de pares e-h y  $R_{BL}(x,\lambda)$  la recombinación neta. Los tres términos son evaluados en la posición  $x$  y para la longitud de onda  $\lambda$  de la luz incidente.

La corriente total es la suma de las corrientes de electrones  $J_{BL-e}(x,\lambda)$  y huecos  $J_{BL-h}(x,\lambda)$ :

$$J_{BL}(\lambda) = J_{BL-e}(x,\lambda) + J_{BL-h}(x,\lambda). \quad (6.3)$$

Integrando la Ecuación (6.2) entre el contacto frontal ( $x = 0$ ) y el contacto posterior ( $x = W$ ) se obtiene la siguiente relación:

$$J_{BL-h}(W,\lambda) - J_{BL-h}(0,\lambda) = e \int_0^W G_{BL}(x,\lambda) dx - e \int_0^W R_{BL}(x,\lambda) dx. \quad (6.4)$$

Introduciendo la Ecuación (6.3) en la expresión anterior resulta:

$$J_{BL-h}(W,\lambda) - J_{BL}(\lambda) + J_{BL-e}(0,\lambda) = e \int_0^W G_{BL}(x,\lambda) dx - e \int_0^W R_{BL}(x,\lambda) dx. \quad (6.5)$$

Finalmente, despejando la corriente total  $J_{BL}(\lambda)$ , que por ser independiente de la posición no se especifica su coordenada  $x$ , se obtiene la siguiente expresión:

$$J_{BL}(\lambda) = -e \int_0^W G_{BL}(x,\lambda) dx + e \int_0^W R_{BL}(x,\lambda) dx + J_{BL-e}(0,\lambda) + J_{BL-h}(W,\lambda), \quad (6.6)$$

donde  $J_{BL-e}(0,\lambda)$  es la corriente de pérdida por difusión (hacia "atrás") de los electrones en el contacto frontal ( $x = 0$ ) y  $J_{BL-h}(W,\lambda)$  es la corriente de pérdida por difusión (hacia "atrás") de los huecos en el contacto posterior ( $x = W$ ). La Ecuación (6.6) expresa la corriente total en términos de: (a) la foto-corriente (primer término) con signo negativo al adoptarse como sentido positivo el de los huecos viajando de izquierda a derecha y (b) la suma de las pérdidas eléctricas que hacen que la corriente final sea menor que la fotocorriente. Las pérdidas eléctricas abarcan las debidas a recombinación de pares e-h a lo largo de todo el dispositivo (segundo término), las de

difusión de electrones y huecos que salen del dispositivo por el contacto frontal (tercer término) y por el contacto posterior (cuarto término) respectivamente, en lugar de hacerlo a través de los contactos opuestos.

Utilizando un razonamiento enteramente análogo podemos expresar el primer término del numerador de la Ecuación (6.1), o sea, la corriente producido por ambas luces  $BL$  y  $ML$ , como:

$$J_{BL+ML}(\lambda) = -e \int_0^W G_{BL}(x, \lambda) dx - e \int_0^W G_{ML}(x, \lambda) dx + e \int_0^W R_{BL+ML}(x, \lambda) dx \\ + J_{BL+ML-e}(0, \lambda) + J_{BL+ML-h}(W, \lambda). \quad (6.7)$$

Los términos de fotocorriente producidos por  $BL$  y  $ML$  pueden separarse mientras que las pérdidas eléctricas no, ya que en términos ópticos el fenómeno es lineal, pero en términos eléctricos no lo es. La fuente de luz  $BL$  abre los cuasi-niveles de Fermi y la fuente de luz  $ML$  introduce un desplazamiento adicional de los cuasi-niveles de Fermi modulado por la frecuencia "ac" del "chopper". El numerador de la Ecuación (6.1) puede obtenerse restando las Ecuaciones (6.7) y (6.6):

$$J_{BL+ML}(\lambda) - J_{BL}(\lambda) = -e \int_0^W G_{ML}(x, \lambda) dx + e \int_0^W R_{BL+ML}(x, \lambda) dx - e \int_0^W R_{BL}(x, \lambda) dx \\ + J_{BL+ML-e}(0, \lambda) - J_{BL-e}(0, \lambda) + J_{BL+ML-h}(W, \lambda) - J_{BL-h}(W, \lambda). \quad (6.8)$$

Los términos asociados a la generación de pares e-h por la fuente  $BL$  se cancelan entre sí al efectuarse la resta. La integral del primer término del lado derecho de la ecuación es siempre menor, o a lo sumo igual, que el flujo de fotones incidente del haz de prueba  $ML$ , es decir:

$$\Phi_{ML}(\lambda) \geq \int_0^W G_{ML}(x, \lambda) dx. \quad (6.9)$$

El signo igual sólo se daría para el caso ideal de un dispositivo con una longitud infinita que permita la absorción completa de la luz  $ML$  y que presente cero reflexión de la luz en su cara frontal. Es posible definir la respuesta espectral óptica  $SR_{OPT}$  como:

$$SR_{OPT}(\lambda) = \frac{e \int_0^W G_{ML}(x, \lambda) dx}{e \Phi_{ML}(\lambda)} \leq 1. \quad (6.10)$$

La curva de SR óptica presenta un valor máximo para cierta longitud de onda que depende fundamentalmente del gap y del coeficiente de absorción del material. La SR decae para longitudes de onda más cortas debido a las pérdidas por reflexión y para longitudes de onda más largas debido a la incompleta absorción de la luz de acuerdo a las pérdidas ópticas propias del diseño del dispositivo.



La contribución de los términos de corriente debidos a la difusión de huecos  $J_{BL+ML-h}(W,\lambda)$  y  $J_{BL-h}(W,\lambda)$  es siempre despreciable en dispositivos n-i-p de  $\mu\text{c-Si:H}$ . La presencia de la capa buffer entre la capa intrínseca y la capa p con un gap elevado reduce las pérdidas por difusión de electrones hacia el contacto frontal, y por lo tanto los términos de corriente debidos a la difusión de electrones  $J_{BL+ML-e}(0,\lambda)$  y  $J_{BL-e}(0,\lambda)$  son generalmente inferiores a la suma de las pérdidas por recombinación. Entonces, la Ecuación (6.1) puede re-escribirse como:

$$SR(\lambda) = \frac{J_{BL+ML}(\lambda) - J_{BL}(\lambda)}{e\Phi_{ML}(\lambda)} \approx SR_{OPT} - \frac{\int_0^W [R_{BL+ML}(x,\lambda) - R_{BL}(x,\lambda)] dx}{\Phi_{ML}(\lambda)}. \quad (6.11)$$

El signo menos del segundo término se debe a que para que la SR dé un valor positivo es preciso adoptar la convención opuesta para la corriente. La ecuación (6.11) nos muestra que valores de SR mayores a la unidad son sólo posibles cuando las pérdidas de recombinación presentes en el dispositivo cuando ambas luces,  $BL$  y  $ML$ , inciden en forma conjunta sobre el contacto frontal del dispositivo son menores a las que existen cuando sólo incide la luz auxiliar  $BL$ , ya que la SR óptica nunca puede superar el valor de la unidad.

La diferencia entre las pérdidas por recombinación pueden expresarse como la suma de cuatro diferencias, una por capa del dispositivo, p, buffer, i y n:

$$\begin{aligned} \int_0^W [R_{BL+ML}(x,\lambda) - R_{BL}(x,\lambda)] dx &= \\ &= \int_{-p} [R_{BL+ML}(x,\lambda) - R_{BL}(x,\lambda)] dx + \int_{buffer} [R_{BL+ML}(x,\lambda) - R_{BL}(x,\lambda)] dx \\ &\quad + \int_{-i} [R_{BL+ML}(x,\lambda) - R_{BL}(x,\lambda)] dx + \int_{-n} [R_{BL+ML}(x,\lambda) - R_{BL}(x,\lambda)] dx. \end{aligned} \quad (6.12)$$

En las mediciones convencionales de SR se suele o bien no usar una luz auxiliar (SR medida a oscuras) o bien utilizar una luz auxiliar  $BL$  blanca (SR medida bajo iluminación) que contiene todo el espectro visible y parte del UV e IR, en analogía con el espectro solar. Cuando se ilumina la muestra con luz  $ML$ , como su intensidad es bastante menor a la de la luz auxiliar, los pares e-h foto-generados por la luz  $ML$  van a ser superados por los generados por la luz  $BL$  en todas las zonas del dispositivo. Por lo tanto, no podrán alterar significativamente la distribución del campo eléctrico al ser atrapados por los estados localizados del gap ya que su ocupación está mayormente fijada por los pares e-h atrapados de los foto-generados por la luz  $BL$ .

Las SR anómalas se observan cuando la fuente de luz auxiliar es azul o roja, es decir cuando las longitudes de onda de la luz  $BL$  se ubican en los extremos del espectro visible. En el efecto photogating convencional la luz  $BBL$  es absorbida en la parte anterior del dispositivo. Cuando incide en forma conjunta el haz RML, al ser absorbido más o menos uniformemente en

todo el dispositivo, los pares e-h foto-generados en el seno del mismo van a ser atrapados por estados localizados de las zonas central y posterior de la capa intrínseca donde la luz BBL no llega, logrando impactar en la distribución final del campo eléctrico. Análogamente, en el efecto photogating complementario los pares e-h foto-generados por el haz monocromático azul pueden competir con los foto-generados por la luz auxiliar roja. Los pares e-h foto-generados por la luz BML serán atrapados preferentemente por estados localizados de la zona anterior del dispositivo mientras que la luz RBL al absorberse uniformemente en todo el dispositivo, su contribución en la zona anterior no resulta tan significativa. Así, el haz de prueba azul podrá alterar la distribución del campo eléctrico. En ambos escenarios es entonces factible encontrar situaciones en las que sea  $SR > 1$  en la Ecuación (6.11).

## 6.4 Resultados

### 6.4.1 Explorando las condiciones para obtener $SR > 1$

Utilizando los parámetros de la Tabla 6.1 se determinó que las pérdidas por recombinación en cada capa y por difusión de electrones en el contacto frontal, siguen las relaciones esperadas  $R_{BBL} < R_{BBL+RML}$  y  $J_{n-BBL} < J_{n-BBL+RML}$ . En las contribuciones de Bae et al. y Chatterjee [78,76] se predicen respuestas espectrales mayores a uno para longitudes de ondas bajas en dispositivos iluminados con RBL cuando a éstos se les incorpora una capa altamente defectuosa en su región frontal. A partir de estos resultados algunos parámetros eléctricos de la capa buffer fueron modificados en pos de obtener una  $SR > 1$ : la densidad de defecto se incrementó varios órdenes de magnitud, el espesor de la capa se ensanchó, el gap de movilidad se varió escalonadamente y las movilidades de portadores libres y secciones eficaces de capturas fueron también modificadas. Sin embargo, a pesar de todas estas pruebas no fue posible encontrar respuestas espectrales mayores a uno.

Al no poder obtenerse predicciones de  $SR$  mayores a la unidad se exploró la posibilidad de estudiar, con simulaciones numéricas, una estructura alternativa donde la capa (p)  $\mu\text{-Si:H}$  de bajo gap de movilidad (1,2 eV) es reemplazada por una capa (p)-a-SiC:H de gap elevado (2 eV). Se propuso esta nueva estructura para reducir las pérdidas por recombinación en la capa (p) (ya que la tasa de recombinación es una fuerte función del gap del material) y las pérdidas por difusión de electrones en el contacto frontal. Este cambio potenciaría la dependencia de la  $SR$  con respecto a las tasas de recombinación presentes en la zona frontal de la capa intrínseca próxima a la interfaz p/buffer que en principio es la zona del dispositivo que nos permitiría activar el efecto EPGC. En el dispositivo alternativo propuesto los parámetros eléctricos de la

capa buffer en la interface p/i, como el gap de movilidad, la densidad de DB, el espesor, etc., fueron nuevamente modificados. En este caso, nuestro código fue capaz de predecir respuestas espectrales mayores a la unidad cuando la capa buffer se asume bastante defectuosa.

El primer resultado exitoso en la predicción del efecto EPGC en la estructura (p)-a-SiC:H/(buffer)-a-Si:H/(i)- $\mu\text{c-SiH}$ /(n)- $\mu\text{c-SiH}$  se obtuvo utilizando los parámetros de la primera columna de la Tabla 6.2 que corresponden a una capa que denominaremos como Capa Buffer Defectuosa (CBD). En esta tabla se comparan los parámetros eléctricos de la CBD con los parámetros de la Capa Buffer Regular (CBR) utilizada para ajustar las curvas J-V y SR de la Figura 6.1. La columna de la derecha de la Tabla 6.2 muestra el valor máximo calculado para la SR y su correspondiente longitud de onda cuando sólo uno de los parámetros de la CBD es reemplazado por el parámetro correspondiente de la CBR. En la última fila de la tabla se presenta un valor de referencia que corresponde a la SR que se obtiene cuando se utilizan todos los parámetros de la CBD. Se demuestra así, que los parámetros claves para obtener el efecto EPGC son: el gap de movilidad, el espesor y la densidad de defectos, a los que se suman las secciones eficaces de captura de electrones para los estados donores y la densidad efectiva de estados para la banda de valencia. Una capa buffer muy fina, un gap muy elevado o una densidad de DBs baja no permiten que la luz BML origine una modulación apreciable de las pérdidas por recombinación. La Tabla 6.2 también muestra que la SR es sensible a las movilidades de los portadores libres. Los valores de las movilidades afectan la cantidad de portadores libres que son atrapados por los estados localizados de la capa buffer. Nuestras simulaciones indican que la SR no es sensible a los estados de las colas de valencia y conducción, ya sea a sus densidades o a las secciones eficaces de captura.

#### 6.4.2 Sensibilidad de la $SR > 1$ a parámetros eléctricos de la capa (p)-a-SiC:H

Una vez obtenido el resultado esperado ( $SR > 1$ ) se estudió la sensibilidad de la SR a diferentes parámetros eléctricos, a los efectos de explorar si es posible obtener valores de SR más elevados. Respecto a los parámetros de la capa (p)-a-SiC:H se modificaron las secciones eficaces de captura de los defectos y las movilidades de electrones y huecos obteniéndose una baja sensibilidad de la SR en relación a los mismos con excepción de la movilidad de huecos. Nuestros resultados indican que capas (p)-a-SiC:H con mayor movilidad de huecos darían lugar a mayores respuestas  $SR > 1$  debido a que la elevada energía de activación del a-SiC:H limita la salida de huecos y por ende el valor de la corriente. Esta dependencia no aparece cuando la capa dopada p- es de  $\mu\text{c-SiH}$ .

**Tabla 6.2:** Comparación entre los parámetros eléctricos de la capa buffer p/i defectuosa utilizados para predecir el EPGC (columna de la izquierda) y la capa buffer regular utilizada para ajustar las curvas características J-V y SR de una estructura (p)- $\mu\text{-Si:H}$ /buffer/(i)- $\mu\text{-Si:H}$ /(n)- $\mu\text{-Si:H}$  (columna central). La columna derecha muestra el máximo valor obtenido para la SR (y la longitud de onda a la que se produce) cuando el valor de sólo un parámetro de la capa buffer defectuosa es reemplazado por el valor correspondiente de la capa buffer regular. Las densidades de defecto ( $D$ ,  $D^0$ ,  $D^+$ ) en las tres distribuciones Gaussianas fueron modificadas conjuntamente.

Parámetro	Capa Buffer Defectuosa	Capa Buffer Regular	SR <sub>MAX</sub> - $\lambda_{\text{MAX}}$ (nm)
$W$ (nm)	20	5	0,818 - 560
$E_G$ (eV)	1,65	2	2,220 - 460
$N_c$ (cm <sup>-3</sup> )	8x10 <sup>19</sup>	2x10 <sup>20</sup>	1,611 - 500
$N_v$ (cm <sup>-3</sup> )	8x10 <sup>19</sup>	2x10 <sup>20</sup>	1,372 - 500
$\mu_n$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	10	20	1,446 - 500
$\mu_p$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	1	2	1,510 - 500
$D$ (cm <sup>-3</sup> )	4x10 <sup>17</sup>	3x10 <sup>15</sup>	0,816 - 580
$D^0$ (cm <sup>-3</sup> )	2x10 <sup>17</sup>	1,5x10 <sup>15</sup>	0,816 - 580
$D^+$ (cm <sup>-3</sup> )	4x10 <sup>17</sup>	3x10 <sup>15</sup>	0,816 - 580
$\sigma_{n^+}$ (cm <sup>2</sup> )	7,5x10 <sup>-15</sup>	1x10 <sup>-15</sup>	1,072 - 460
$\sigma_{p^0}$ (cm <sup>2</sup> )	7,5x10 <sup>-17</sup>	1x10 <sup>-16</sup>	1,592 - 500
$\sigma_p^-$ (cm <sup>2</sup> )	7,5x10 <sup>-15</sup>	1x10 <sup>-15</sup>	1,619 - 460
$\sigma_{n^0}$ (cm <sup>2</sup> )	7,5x10 <sup>-17</sup>	1x10 <sup>-16</sup>	1,661 - 500
<b>Referencia</b>			<b>1,661 - 500</b>

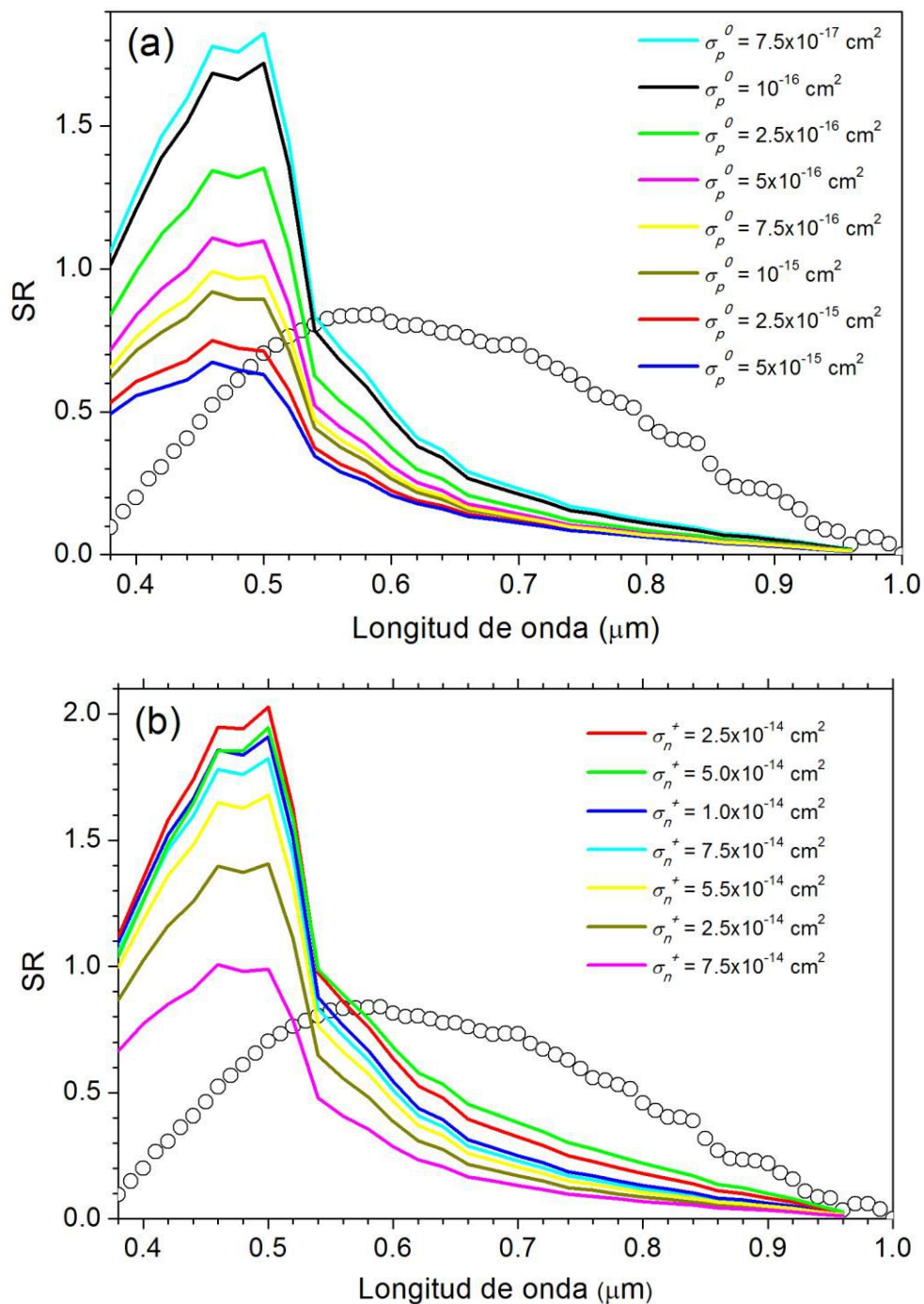
### 6.4.3 Sensibilidad de la SR > 1 a los parámetros eléctricos de la capa buffer

Respecto a los parámetros eléctricos de la capa buffer, se estudió la dependencia de la SR en relación a las secciones eficaces de captura, las movilidades de los portadores libres, el espesor de capa, la densidad de defectos y el gap de movilidad.

### 6.4.3.1 Secciones eficaces de captura

El aumento en un orden de magnitud de las secciones eficaces de captura en los estados aceptores no da lugar a sensibles modificaciones de la SR, mientras que el mismo aumento en las secciones eficaces de captura en los estados donores produce una importante caída en el valor de SR. Los estados de defectos en la capa buffer están mayormente despoblados debido a su proximidad a la capa p, en la cual el nivel de Fermi se ubica cerca de la banda de valencia con presencia predominante de cargas atrapadas positivas. Esto provoca que los estados aceptores, mayoritariamente vacíos, alberguen una cantidad no significativa de cargas negativas, mientras que los estados donores, también vacíos en su mayoría, por el contrario contienen una cantidad importante de cargas positivas. Esta asimetría explica la diferencia en la sensibilidad de la SR a los cambios en las secciones eficaces de captura entre los estados aceptores y los estados donores.

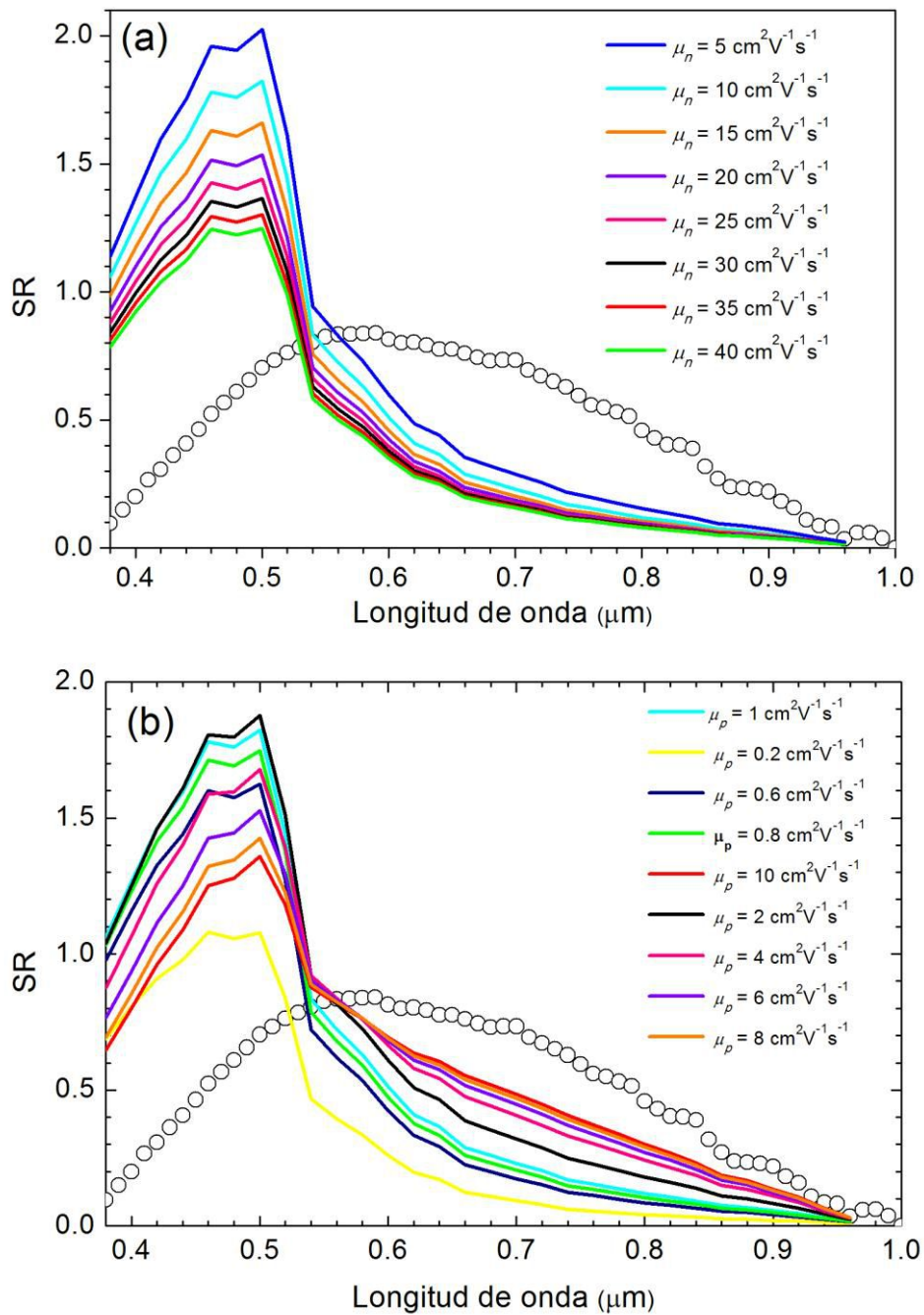
La disminución de la SR con el aumento de la sección eficaz de captura para huecos ( $\sigma_{pd}$ ) o con la disminución de sección eficaz de captura para electrones ( $\sigma_{nd}$ ) en los estados donores de la capa buffer, se debe a una baja en la tasa de recombinación en la capa intrínseca provocada por dicha modificación. En los estados donores de la capa buffer el aumento de la sección eficaz de captura de huecos  $\sigma_{pd}$  conlleva a un aumento en la concentración de carga positiva atrapada debido a la mayor cantidad de huecos libres capturados por los estados donores. Este aumento de la concentración de carga positiva, da lugar a un incremento del campo eléctrico en la capa buffer y a una disminución del mismo en la capa intrínseca que a su vez ocasiona un aumento en la recombinación bajo iluminación conjunta de BML y RBL. La diferencia entre las tasas de recombinación cuando inciden ambas luces y cuando sólo incide la RBL se vuelve entonces menor produciéndose una baja en la SR. Cuando se disminuye la sección eficaz de captura de electrones  $\sigma_{nd}$  se produce una menor captura de electrones en los estados donores, lo que da lugar (al igual que en escenario recién descrito) a una mayor concentración de cargas positivas atrapadas en la capa buffer. Siguiendo el mismo razonamiento que el del caso anterior, obtenemos el mismo resultado, es decir, una baja en la SR. El efecto EPGC se pierde para secciones eficaces de captura tales que  $\sigma_{nd} < 7.5 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$  o  $\sigma_{pd} > 7 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ .



**Figura 6.2:** Respuestas espectrales predichas con D-AMPS para distintos valores de sección eficaz de captura para (a) huecos y (b) electrones de trampas donoras de la capa buffer de un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{c-Si:H}$  (con capa p de a-SiC:H) en condiciones de cortocircuito. Los parámetros de la capa buffer se listan en la Tabla 6.2 (columna izquierda). A modo de referencia, se muestran los valores experimentales de la SR (círculos) a partir de los cuales se realizó el ajuste.

### 6.4.3.2 Movilidad de portadores libres

Nuestras simulaciones indican que la disminución de la movilidad de electrones conlleva a un aumento de la respuesta  $SR > 1$ , mientras que la disminución en la movilidad de huecos provoca prácticamente el efecto contrario. El valor máximo de  $SR$  se alcanza con  $\mu_p \sim 0,8 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  mientras que la  $SR$  disminuye para movilidades de huecos menores. La tasa de recombinación en la capa buffer está limitada por los portadores minoritarios que en este caso son los electrones. Una menor movilidad en los electrones en esa zona da lugar a un aumento de la concentración de electrones libres (debido a que la corriente de electrones intenta mantenerse en el mismo valor), lo que provoca una mayor tasa de recombinación y un número más elevado de electrones atrapados en la capa buffer. Esta mayor cantidad de electrones atrapados induce un deterioro en el campo eléctrico dentro de la capa buffer, que, si bien no es tan significativo, da lugar a un refuerzo del campo eléctrico en la capa intrínseca y a una disminución de la tasa de recombinación en la misma cuando la muestra se ilumina tanto con luz RBL como con ambas luces, BML y RBL. El resultado final es que la diferencia entre las tasas de recombinación en la capa intrínseca bajo ambas condiciones de iluminación se vuelve mayor. Una reducción de la movilidad de huecos da lugar al efecto contrario porque se produce un aumento de la concentración de huecos libres y atrapados, lo que a su vez implica un robustecimiento del campo eléctrico en la capa buffer y una disminución del mismo en la capa intrínseca. Esto, da lugar a un aumento de la recombinación de pares e-h dentro de la capa intrínseca en ambos escenarios de iluminación, o sea sólo con RBL y bajo ambas luces BML + RBL. En este caso el resultado final es que la diferencia entre las tasas de recombinación en la capa intrínseca bajo ambas condiciones de iluminación se vuelve menor.

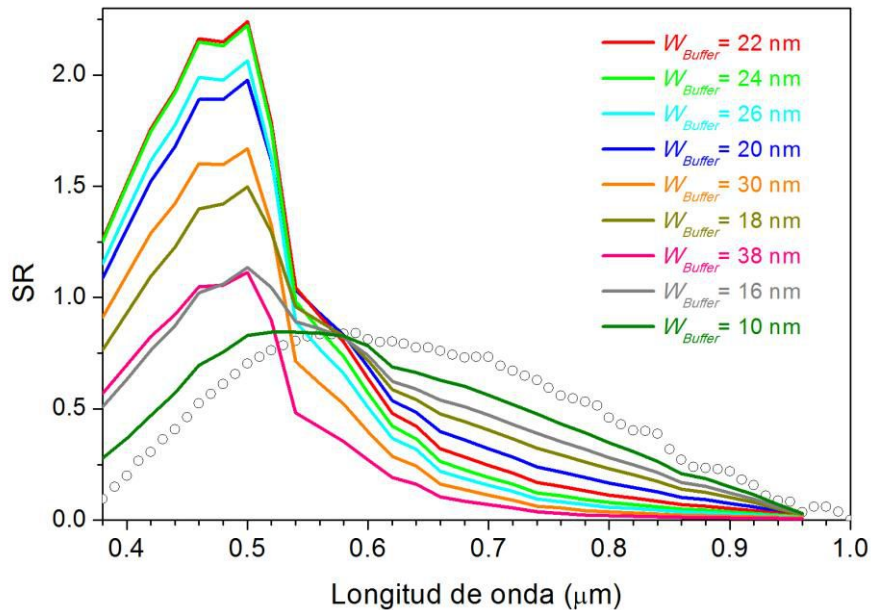


**Figura 6.3:** Respuestas espectrales predichas con D-AMPS para distintos valores de (a) movilidad de electrones libres y (b) movilidad de huecos libres de la capa buffer de un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{c-Si:H}$  (con capa p de a-SiC:H) en condiciones de cortocircuito. Los parámetros de la capa buffer se listan en la Tabla 6.2 (columna izquierda). A modo de referencia, se muestran los valores experimentales de la SR (círculos) a partir de los cuales se realizó el ajuste.



### 6.4.3.3 Espesor

Respecto del espesor de la capa buffer, se realizaron una serie de simulaciones modificando el parámetro en saltos de 2nm. Como puede observarse en la Figura 6.4, el máximo valor de SR obtenido manteniendo constante los demás parámetros se produce con un espesor de 22 nm, valor muy próximo al espesor originalmente adoptado (20 nm) para la CBD.



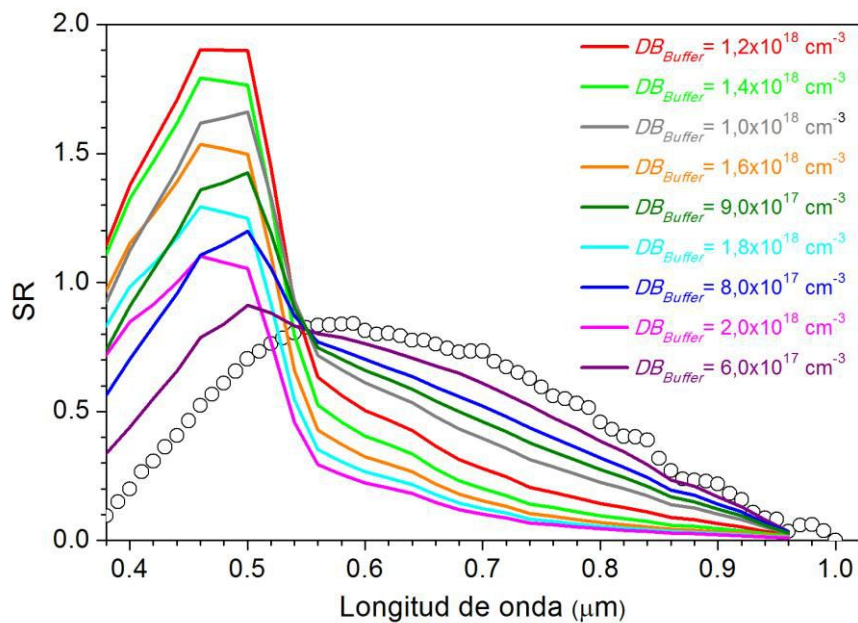
**Figura 6.4:** Respuestas espectrales predichas con D-AMPS para distintos espesores de la capa buffer de un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{C-Si:H}$  (con capa p de a-SiC:H) en condiciones de cortocircuito. Los parámetros de la capa buffer se listan en la Tabla 6.2 (columna izquierda). A modo de referencia, se muestran los valores experimentales de la SR (círculos) a partir de los cuales se realizó el ajuste.

La modulación del campo eléctrico producida por la luz BML tiende a atenuarse para espesores bajos, debido a que disminuyen las trampas disponibles para la captura de portadores libres generados por la BML. Debido a ello, la luz de prueba no alcanza a alterar suficientemente la densidad de carga atrapada en la capa buffer defectuosa, lo que no da lugar a una modulación eficiente (a la frecuencia del “chopper”) del campo eléctrico y de la tasa de recombinación dentro de la capa intrínseca. Espesores de capa buffer elevados provocan un mayor apantallamiento del campo eléctrico en la capa intrínseca. Se llega a un punto en que la carga positiva atrapada en la capa buffer supera la carga negativa neta presente en la capa (p)-aSiC:H dando lugar a la aparición de una significativa curvatura de bandas en la capa dopada. Esta curvatura se debe a la generación de cargas negativas que compensan el aumento de las positivas de la capa buffer y que permiten alcanzar la condición de neutralidad de carga. El fuerte dipolo creado en las capas frontales del dispositivo hace colapsar el campo eléctrico

dentro de la capa intrínseca haciendo que las pérdidas por recombinación se vuelvan muy significativas, disminuyendo la corriente colectada y haciendo que SR sea pobre y menor a uno.

#### 6.4.3.4 Densidad de defectos

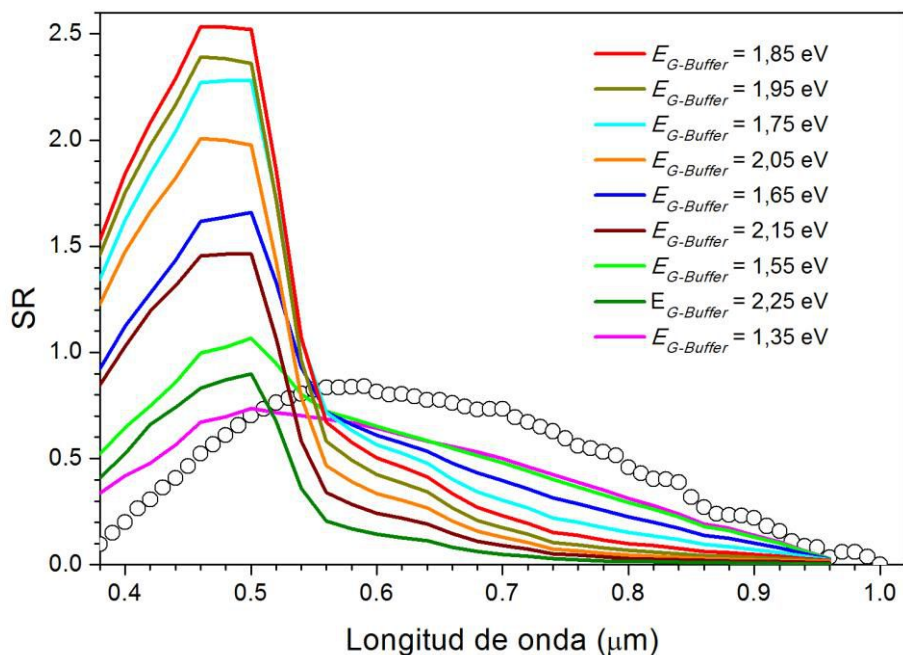
Tendencias similares al punto anterior se obtienen cuando, en lugar de variar el espesor de la interfaz defectuosa, se varía la densidad de defectos dentro de la misma, dejando fijo el espesor. La Figura 6.5 muestra que la máxima respuesta en ese caso se obtiene para una densidad de defectos  $D_{tot}$  ( $D_{tot} = D^- + D^0 + D^+$ ) de  $\sim 1,2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  cuando el espesor de la capa buffer es de 20 nm. Densidades de defectos menores hacen que el campo eléctrico no pueda ser modulado tan eficientemente, perdiéndose el efecto EPGC para  $D_{tot} < 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Para  $D_{tot}$  inferiores a  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  la SR se vuelve insensible a la cantidad de DBs presentes en la interfaz. Cuando  $D_{tot} >$  de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  la recombinación en la capa intrínseca comienza a incrementarse de tal manera que la corriente colectada y la SR se vuelven muy pobres, desapareciendo el EPGC. El EPGC se pierde para  $D_{tot} > 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . El estudio de la dependencia de las SR  $> 1$  con respecto a la densidad de defectos presentes en la interfaz p/i defectuosa pone en evidencia la elevada sensibilidad que presenta el valor máximo de la SR respecto a algunos parámetros eléctricos de las capas del dispositivo, especialmente de la capa buffer.



**Figura 6.5:** Respuestas espectrales predichas con D-AMPS para distintas densidades de defecto de la capa buffer de un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{c-Si:H}$  (con capa p de  $\text{a-SiC:H}$ ) en condiciones de cortocircuito. Los parámetros de la capa buffer se listan en la Tabla 6.2 (columna izquierda). A modo de referencia, se muestran los valores experimentales de la SR (círculos) a partir de los cuales se realizó el ajuste.

### 6.4.3.5 Gap de movilidad

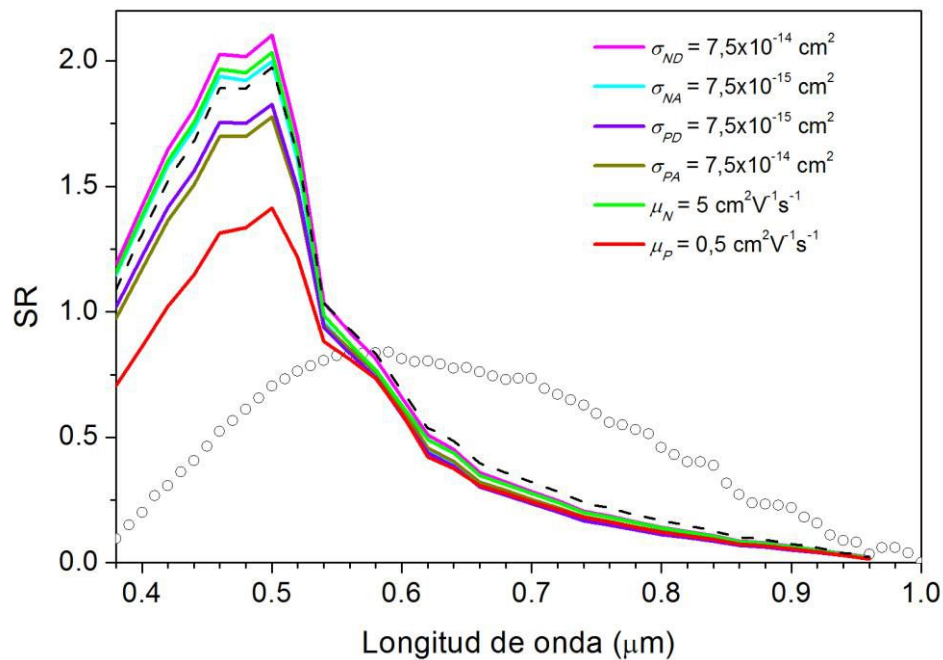
Finalmente se estudió la dependencia del EPGC con respecto al gap de movilidad de la capa buffer. Las  $SR > 1$  son extremadamente sensibles a este parámetro. El EPGC desaparece para un gap de movilidad de 1,45 eV o menor, ya que en ese caso se favorece la emisión de portadores atrapados a las bandas, existiendo un menor atrapamiento de huecos. La SR aumenta con el incremento del gap, obteniéndose un máximo para  $E_G = 1,85$  eV, y vuelve a decaer para valores superiores del gap de movilidad, como puede observarse en la Figura 6.6. Cuando el gap de movilidad se incrementa a valores elevados ( $> 1,9$  eV) se dificulta el atrapamiento de huecos en los defectos de la interfaz a partir de los portadores foto-generados en la capa intrínseca por la BML. En ambos casos se dificulta la posibilidad de modular el campo eléctrico y la tasa de recombinación en la capa intrínseca por la luz BML a partir de los huecos atrapados en la capa buffer. Los estados de las colas no contribuyen significativamente a la modulación de la carga atrapada en la capa buffer. Según nuestras simulaciones, para el dispositivo analizado existe una ventana de valores posibles para el gap de movilidad de la capa buffer, que permite predecir el fenómeno EPGC que se encuentra entre 1,55 eV y 2,10 eV.



**Figura 6.6:** Respuestas espectrales predichas con D-AMPS para distintos valores del gap de movilidad de la capa buffer de un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$  (con capa p de a-SiC:H) en condiciones de cortocircuito. Los parámetros de la capa buffer se listan en la Tabla 6.2 (columna izquierda). A modo de referencia, se muestran los valores experimentales de la SR (círculos) a partir de los cuales se realizó el ajuste.

#### 6.4.4 Sensibilidad de la $SR > 1$ a algunos parámetros eléctricos de la capa intrínseca

A los efectos de explorar la posible dependencia de la respuesta anómala con respecto a los parámetros eléctricos de la capa intrínseca se sub-dividió la capa intrínseca en dos sub-capas,  $i_1$  e  $i_2$  con parámetros idénticos de forma tal que la suma de los espesores de ambas sub-capas,  $W_{i1}$  y  $W_{i2}$ , sea igual al espesor total de la capa intrínseca, es decir  $W_i = W_{i1} + W_{i2} = 1300$  nm. Con el objeto de investigar la dependencia de  $SR > 1$  respecto de las características de los defectos a lo largo de la capa intrínseca, se mantuvieron inalterados todos los parámetros eléctricos en la zona  $i_1$  contigua a la interfaz p/i, y modificaron algunos parámetros en la capa  $i_2$  contigua a la interfaz i/n. Las secciones eficaces de captura de la zona  $i_2$  se aumentaron en un orden de magnitud y las movilidades se disminuyeron en un orden de magnitud. El objetivo de estas simulaciones fue determinar cuándo la  $SR > 1$  se torna insensible ante el aumento del espesor  $W_{i1}$ , a los efectos de individualizar hasta qué distancia de la interfaz p/i la densidad de carga atrapada en los defectos modulada por la luz de prueba puede afectar el valor máximo de SR. Cabe recordar que el EPGC se manifiesta al iluminar con una luz de prueba de espectro azul, que es absorbida preferentemente en la región frontal del dispositivo. Este procedimiento fue implementado de a un parámetro por vez para estudiar también la dependencia de la SR respecto de estos parámetros. Como era de esperar, a medida que aumenta el espesor  $W_{i1}$  la dependencia del valor máximo de SR respecto a las variaciones de las secciones eficaces de captura y movilidades se reduce gradualmente. La SR se vuelve insensible con respecto a las variaciones de estos parámetros cuando  $W_{i1}$  es mayor a 1000 nm. Las diferencias entre los máximos de la SR al variar los parámetros mencionados es menor al 5% cuando  $W_{i1}$  es mayor a 800 nm y menor a un 10% a partir de espesores  $W_{i1}$  mayores a 500 nm. A los efectos de ilustrar la dependencia obtenida al variar las secciones eficaces de captura y movilidades en la zona de  $i_1$  se muestran las curvas obtenidas para  $W_{i1} = 200$  nm en la Figura 6.7. Estos resultados también explican en forma indirecta la baja sensibilidad del EPGC al espesor total de la capa intrínseca. El valor máximo de la SR se vuelve insensible (por debajo del 1%) para espesores de la capa intrínseca por encima de 1800 nm.



**Figura 6.7:** Respuestas espectrales predichas con D-AMPS para variaciones en las movilidades de electrones y huecos (un orden de magnitud menores) y en las secciones eficaces de captura de los defectos (un orden de magnitud mayores) en la zona posterior de la capa intrínseca de un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$  (con capa p de a-SiC:H) en condiciones de cortocircuito. Los parámetros de referencia se listan en la Tabla 6.2 (columna izquierda). El espesor de la zona posterior es de 1100 nm y el de la zona anterior de 200 nm. A modo de referencia, se muestran la curva obtenida con una capa intrínseca de 1500 nm de espesor con los parámetros de referencia, y los valores experimentales de la SR a partir de los cuales se realizó el ajuste (círculos vacíos).

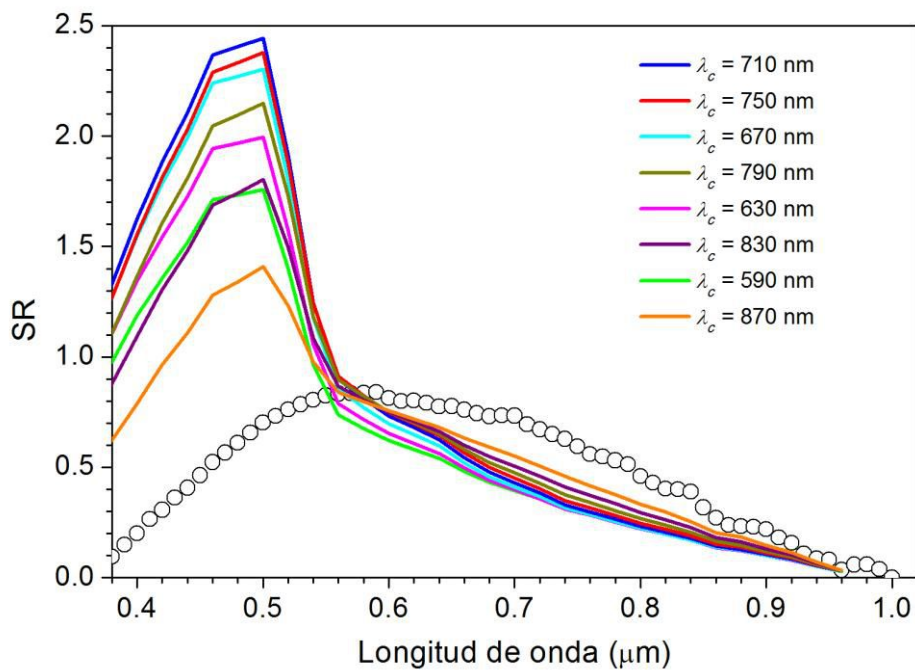
De manera análoga a lo discutido para la capa buffer, la modulación de la carga positiva atrapada y generada por la BML en la zona frontal de la capa intrínseca puede dar lugar a una modulación del campo eléctrico y de la tasa de recombinación, pero se determinó que es de mucha menor intensidad a la inducida por las cargas que residen en la capa buffer, ya que la capa intrínseca posee menos defectos y un gap bajo. Como puede observarse en la Figura 6.7, la sensibilidad más pronunciada de la SR es respecto a la disminución de la movilidad de huecos en la zona posterior de la capa intrínseca,  $i_2$ . La asimetría de la movilidad favorece el atrapamiento de huecos en la zona posterior donde la luz BML no puede modular eficientemente el campo eléctrico, ya que casi la totalidad de la absorción se realiza en la zona anterior de la capa intrínseca. Pueden observarse tendencias similares, aunque menos pronunciadas, al aumentar las secciones eficaces para huecos en la zona  $i_2$ . La tendencia opuesta es observada cuando se aumentan las secciones eficaces para electrones o se disminuye la movilidad de electrones en la misma zona, debido a que se favorece el atrapamiento de electrones en la zona posterior de la

capa intrínseca. Recordemos que para que se produzca el efecto  $\text{SR} > 1$  la recombinación debe ser menor en la zona frontal cuando ambas luces (BML y RBL) inciden sobre la muestra respecto de cuando solo la luz RBL es absorbida. El atrapamiento de huecos (o la liberación de electrones) en la zona anterior de la capa intrínseca daría lugar a un aumento del campo eléctrico en esa zona lo que a su vez reduciría la recombinación, y magnificaría el efecto EPGC.

#### **6.4.5 Sensibilidad de la $\text{SR} > 1$ al contenido espectral de la luz de polarización**

La luz de polarización roja utilizada en las simulaciones anteriores corresponde a una fuente de luz blanca a la que se le interpone un filtro pasa-alto, en términos de frecuencia de la luz, que deja pasar longitudes de onda por encima de 590 nm, es decir, se adoptó un filtro que deja pasar algunas longitudes de onda inferiores a las del RG630. Los fotones con longitudes de onda cercanas a 590 nm generan pares e-h que pueden interferir con los pares generados por la luz BML, ya que con esos niveles de energía una fracción importante de fotones se absorbe en zona frontal del dispositivo. Cuando la luz de polarización contiene sólo fotones con longitudes de onda de 700-800 nm o mayores la absorción es más uniforme en toda la capa intrínseca. Si incrementamos la asimetría en la generación de pares e-h producida por la luz azul y la roja, los pares e-h generados por la luz azul podrían modular el campo eléctrico más eficientemente.

La Figura 6.8 muestra la fuerte dependencia del pico de  $\text{SR} > 1$  con respecto al contenido espectral de la luz de polarización. Una luz de polarización con fotones de longitud de onda sólo por encima de 700 nm se absorbe más uniformemente y con una menor fracción de pares e-h generados en la zona frontal del dispositivo. La respuesta máxima se alcanza cuando se dejan pasar los fotones con longitudes de onda de 710 nm o más elevadas siendo el valor máximo de SR de 2,44 para una longitud de onda de 500 nm de la luz de prueba BML. Si continuamos bloqueando la absorción de fotones con longitudes de onda por encima de 710 nm el pico de la SR máxima comienza a decrecer. Por otro lado si se introduce un filtro pasa-bajo que recorte las longitudes de onda más largas también la respuesta máxima decrece. Estos resultados prueban que el efecto EPGC es también altamente sensible al contenido espectral de la luz de polarización.



**Figura 6.8:** Respuestas espectrales predichas con D-AMPS para distintos contenidos espectrales de la luz de polarización que ilumina un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{c-Si:H}$  (con capa p de a-SiC:H) en condiciones de cortocircuito. Los parámetros de la capa buffer se listan en la Tabla 6.2 (columna izquierda). A modo de referencia, se muestran los valores experimentales de la SR (círculos) a partir de los cuales se realizó el ajuste.

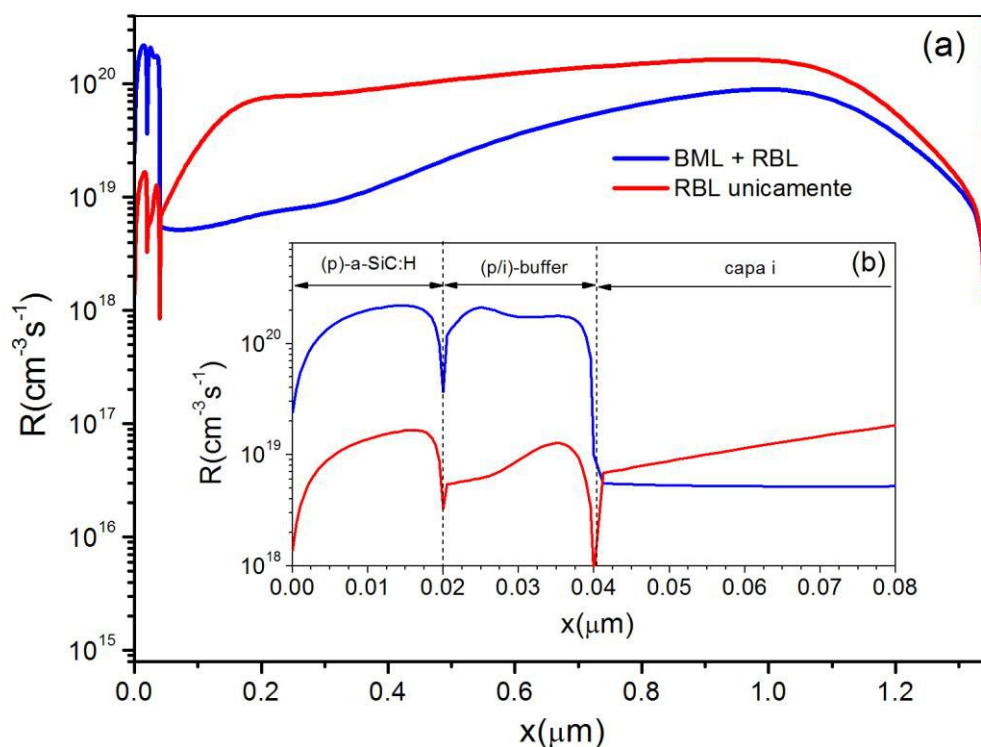
La SR muestra baja sensibilidad respecto a la intensidad de la luz del haz de prueba. Las simulaciones de este capítulo se realizaron asumiendo una intensidad del haz monocromático de  $5 \times 10^{13}$  fotones/ $\text{cm}^2/\text{s}$ . La respuesta máxima se obtiene para una intensidad del haz monocromático de  $10^{12}$  fotones/ $\text{cm}^2/\text{s}$  y satura para intensidades menores. Con respecto a la intensidad de  $5 \times 10^{13}$  fotones/ $\text{cm}^2/\text{s}$  se observa sólo un incremento relativo del 1,4%. Cabe recordar que en la definición de SR la corriente modulada por el chopper se mide respecto del flujo del haz de prueba (ver denominador de la Ecuación (6.1)). Se obtienen SR mayores para intensidades de BML menores porque la modulación introducida por la luz de prueba BML tiende a perturbar menos el escenario de carga atrapada creada por la luz de polarización RBL. Las respuestas anómalas muestran una mayor sensibilidad a la intensidad de la luz roja de polarización. El máximo valor de SR ( $\sim 3.3$ ) se obtiene para una intensidad de la luz RBL de  $4,5 \times 10^{17}$  fotones. $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  ( $\sim 10$  más elevada que en nuestras simulaciones) y  $\lambda_c = 710$  nm. El valor máximo de SR decrece para intensidades mayores y se pierde el efecto EPGC para intensidades de  $\sim 3,95 \times 10^{15}$  fotones. $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  ( $\sim 80$  más elevada que en nuestras simulaciones).



## 6.5 Análisis del origen del EPGC a partir de los perfiles de recombinación, carga atrapada y campo eléctrico

El origen del EPGC se puede comprender mediante la comparación de los perfiles de recombinación, carga atrapada y campo eléctrico que presenta el dispositivo cuando es iluminado sólo con la luz RBL y cuando a ello se le suma la luz BML. Para poder ver con mayor facilidad las diferencias existentes entre ambas condiciones de iluminación, la intensidad del haz de prueba fue incrementada considerablemente en las siguientes simulaciones.

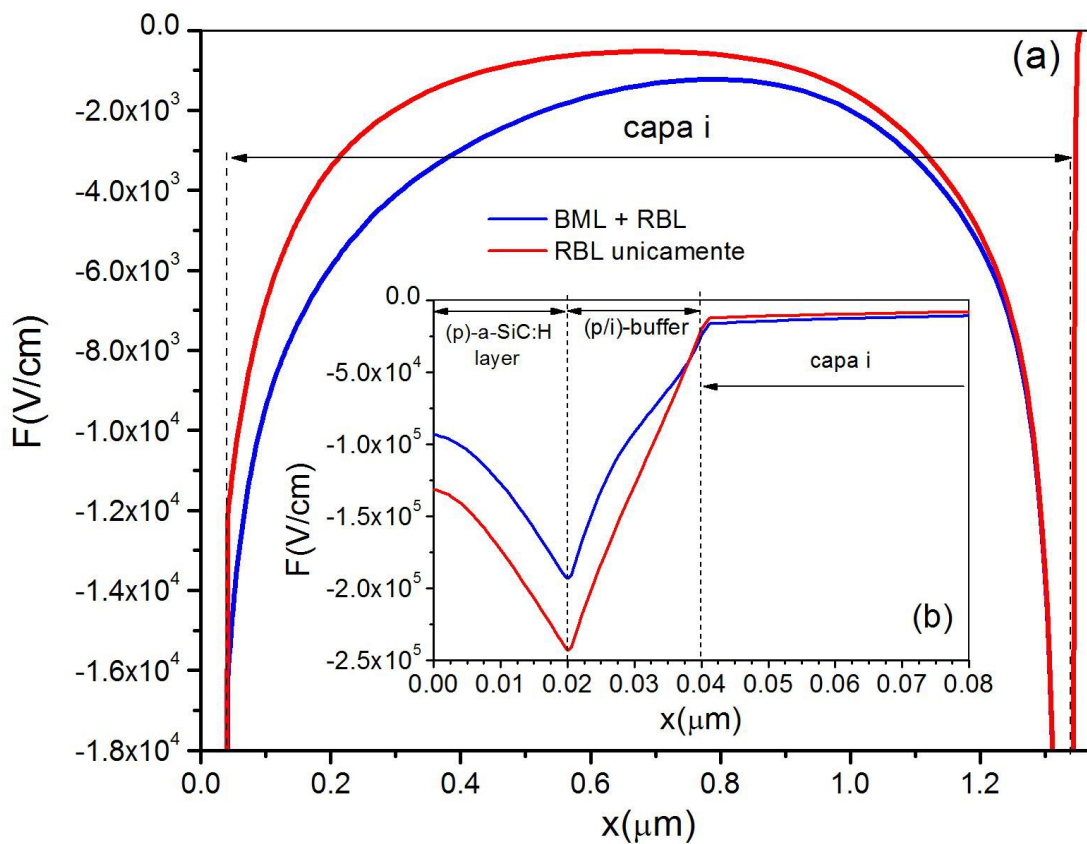
La Figura 6.9 (a) muestra claramente que la velocidad de recombinación en la capa intrínseca es inferior cuando la muestra se ilumina simultáneamente con las luces BML y RBL respecto de cuando sólo se lo hace con la RBL, cumpliéndose la condición necesaria para la predicción de  $SR > 1$  de la Ecuación (6.11). La Figura 6.9 (b) muestra que esta tendencia se invierte dentro de las capas p y buffer, lo que indica claramente que la  $SR > 1$  para longitudes de onda cortas es causada por la modulación de la tasa de recombinación dentro de la capa intrínseca y no dentro de las capas p y buffer.



**Figura 6.9:** Perfil de la tasa de recombinación en un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$  (con capa p de a-SiC:H) con espesor de capa intrínseca de 1300 nm cuando es iluminado con ambas luces BML y RBL (en azul), y cuando se lo ilumina únicamente con la luz RBL (en rojo).



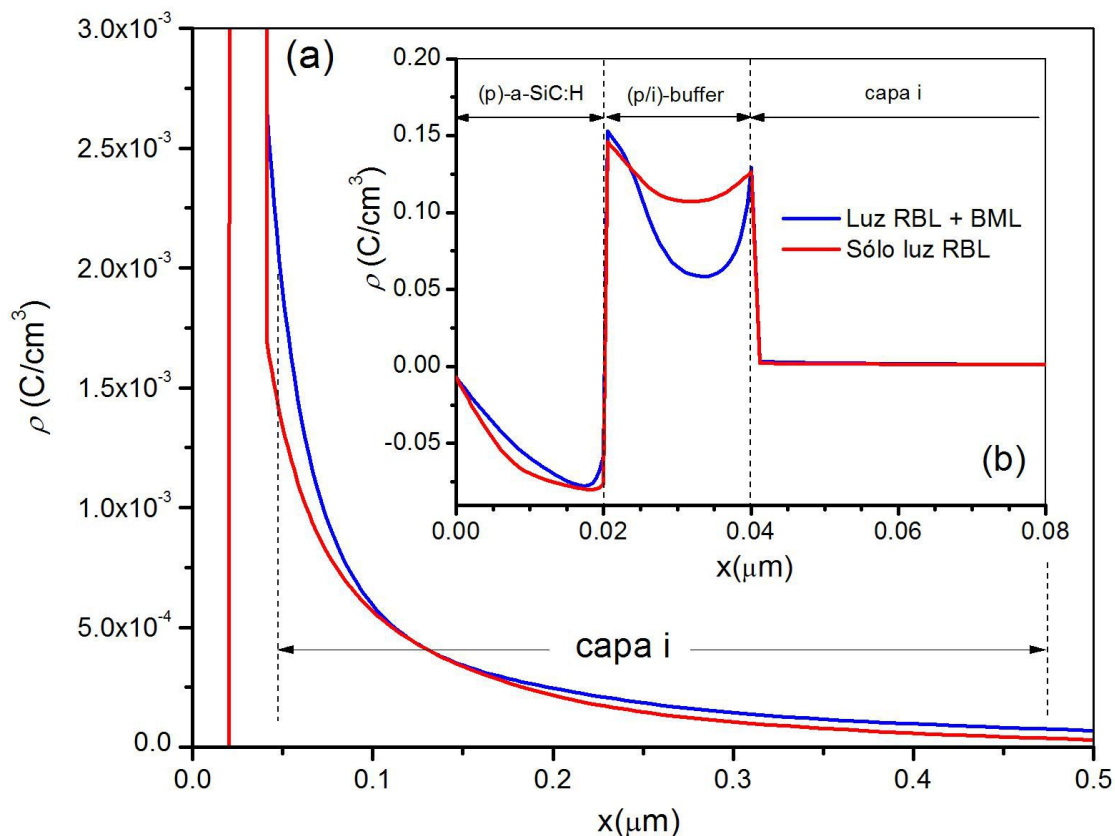
La comparación de los perfiles del campo eléctrico de la Figuras 6.10 es consistente con la de los perfiles de las tasas de recombinación de las Figuras 6.9. Dentro de la capa intrínseca (ver Figura 6.10 (a)) el campo eléctrico se vuelve más intenso cuando la luz BML ilumina la muestra respecto de cuando ésta es bloqueada por el chopper. Una mayor intensidad de campo eléctrico se corresponde con una menor tasa de recombinación debido a que los portadores son empujados más fuertemente hacia los contactos, disminuyendo la probabilidad de recombinarse. En la Figura 6.10 (b), en cambio, la tendencia es la opuesta en las capas frontales, también en concordancia con lo observado en la tasa de recombinación.



**Figura 6.10:** Perfil de campo eléctrico en un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{c-Si:H}$  (con capa p de a-SiC:H) con espesor de capa intrínseca de 1300 nm, cuando es iluminado con ambas luces BML y RBL (en azul), y cuando se lo ilumina únicamente con la luz RBL (en rojo).

Los perfiles de la densidad de carga (ver Figura 6.11) muestran que cuando ambas luces BML y RBL inciden simultáneamente sobre la estructura p-i-n, disminuye la densidad de carga neta positiva atrapada en la capa buffer, en comparación a cuando únicamente el haz RBL ilumina la muestra. Esto se debe a que la luz BML produce en forma simultánea un aumento de la concentración de electrones atrapados por “trapping” y una disminución de la concentración de huecos atrapados por recombinación con electrones (la recombinación está limitada por la

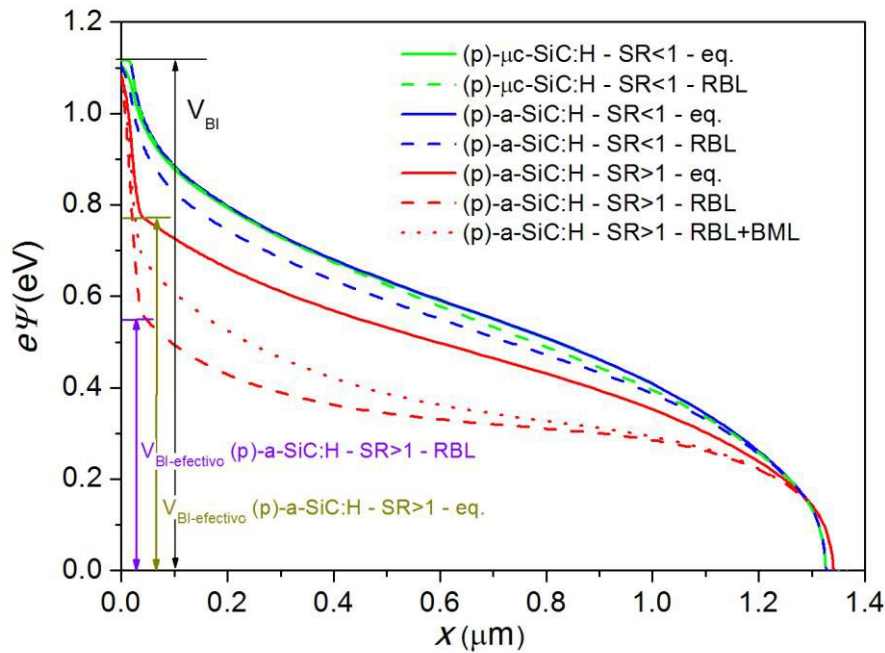
concentración de portadores minoritarios). Un efecto similar, pero de menor intensidad, se produce en la capa p: la carga neta negativa atrapada es menor al incidir ambas fuentes luminosas respecto de cuando sólo lo hace la luz RBL. Esta redistribución de carga es consistente con la disminución del campo eléctrico en las capas frontales, como se muestra en la Figura 6.10(b). En tanto, en la capa intrínseca se observa un aumento de la carga neta positiva atrapada en la zona anterior, también consistente con el aumento del campo eléctrico en la misma zona de la capa intrínseca. En la zona posterior de la capa intrínseca la redistribución de la carga atrapada es mínima porque el haz de prueba azul actúa sólo en los nanómetros más cercanos a la interfaz p/i. La carga positiva atrapada se aloja en los estados de defectos de carácter donador que representan la componente mayoritaria de portadores atrapados en la zona frontal del dispositivo. Lógicamente, la mayor densidad de portadores con carga positiva en la zona p, interfaz p/i y zona frontal de la capa intrínseca sobre la equivalente de la densidad de portadores con carga negativa hace que los mismos controlen la redistribución de carga que introduce el haz de prueba absorbido mayormente en la zona anterior del dispositivo.



**Figura 6.11:** Perfil de la densidad de carga atrapada en un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$  (con capa p de a-SiC:H) con espesor de capa intrínseca de 1300 nm, cuando es iluminado con ambas luces BML y RBL (en azul), y cuando se lo ilumina únicamente con la luz RBL (en rojo).

## 6.6 EPGC en un dispositivo n-i-p con capa p de $\mu\text{c-Si:H}$

Las energías de activación experimentales de las capas (p)-a-SiC:H, (p)- $\mu\text{c-Si:H}$  y (n)- $\mu\text{c-Si:H}$  que se utilizaron en este trabajo, crecidas en la Universidad de Utrecht, son de 0,47 eV, 0,059 eV y 0,025 eV respectivamente [26,79]. Asumiendo que los offsets entre los gaps de movilidad de los distintos materiales se distribuyen simétricamente entre las bandas de conducción y de valencia (es decir, la diferencia de energía tanto entre los bordes de las bandas de valencia como entre los bordes de las bandas de conducción de dos materiales contiguos es igual a la mitad de la diferencia entre los valores de los gaps de los materiales), se puede estimar a partir de los valores de la Tabla 6.1 que el potencial built-in de las estructuras n-i-p con capa (p)-a-SiC:H y con capa (p)- $\mu\text{c-Si:H}$  son 1,104 eV y 1,115 eV respectivamente. Si bien el potencial built-in de la estructura n-i-p original con capa (p)- $\mu\text{c-Si:H}$  es apenas menor que su equivalente en la estructura n-i-p alternativa con la capa (p)-a-SiC:H, los offsets en la interfaces p/i son considerablemente mayores en la estructura n-i-p alternativa. Por otra parte, la energía de activación es mayor en la estructura con capa (p)-a-SiC:H en comparación con el dispositivo con capa (p)- $\mu\text{c-Si:H}$ . Estas diferencias entre los offsets y las energías de activación provocan que la salida de los huecos por el contacto frontal presente una mayor dificultad en la estructura alternativa que en la original. En el dispositivo con capa (p)-a-SiC:H una fracción considerable de los huecos será atrapada por las trampas del gap, que tenderán a apantallar el campo eléctrico en la zona intrínseca debilitándolo aun más, resultando el potencial built-in efectivo menor al evaluado anteriormente. La disminución del potencial o del campo eléctrico efectivo presente en la capa intrínseca de un dispositivo n-i-p, por problemas de un bloqueo parcial en el flujo de huecos hacia el exterior por un contacto frontal de baja calidad, ya fue estudiada en la literatura [50]. Cuando en la sección anterior la capa (p)- $\mu\text{c-Si:H}$  fue reemplazada por una capa (p)-a-SiC:H, la presencia del offset en la interface p/i fue indispensable para crear las condiciones necesarias para la aparición del efecto EPGC, es decir, para hacer más eficiente la modulación de carga y campo eléctrico a partir de la luz BML. En la Figura 6.12 se muestran los cambios que sufre el perfil de potencial electrostático a partir del apantallamiento del campo eléctrico introducido por la capa defectuosa en condiciones de equilibrio y cómo se acentúa este apantallamiento cuando se ilumina la muestra con la luz RBL. SR mayores a uno pueden obtenerse debido a que la luz RBL reduce considerablemente el potencial built-in efectivo mientras que la luz BML lo vuelve a mejorar, recuperándose parcialmente, e incrementando así el campo eléctrico.

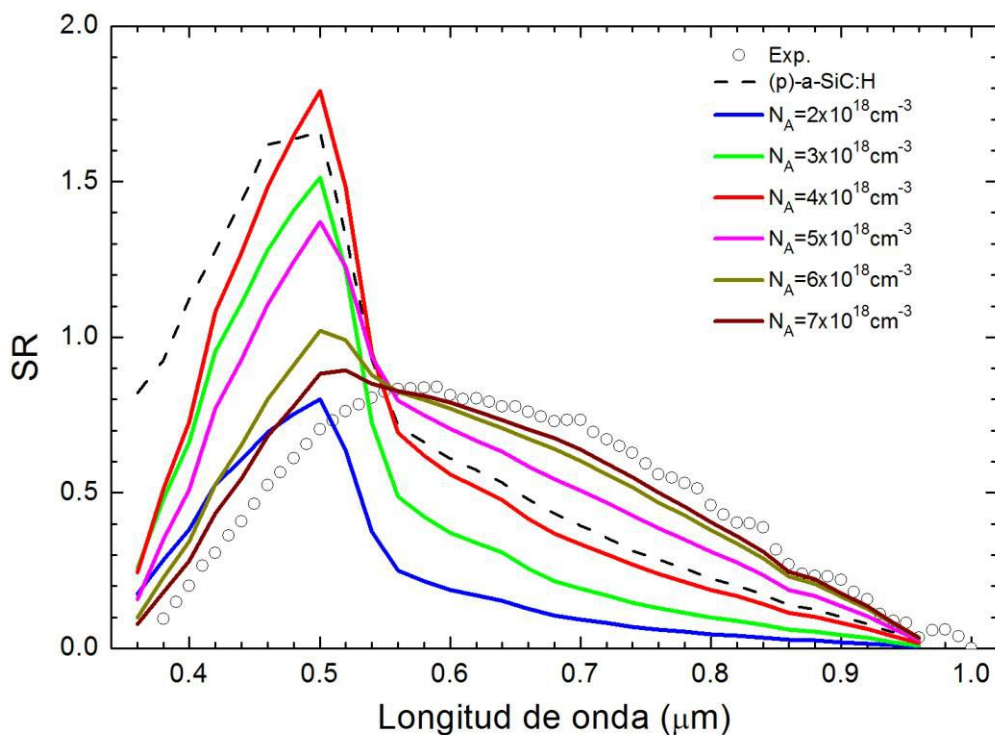


**Figura 6.12:** Perfil de potencial eléctrico para dos dispositivos n-i-p de  $\mu\text{c-Si:H}$ , uno con capa p de a-SiC:H y el otro una capa p de  $\mu\text{c-Si:H}$ , en condiciones de equilibrio y cuando son iluminados con luz RBL, cuyas SR son menores a la unidad. Se muestran también los potenciales del positivo con capa p de a-SiC:H cuando la SR es mayor a 1, en equilibrio, cuando se lo ilumina únicamente con la luz RBL, y cuando se lo hace con ambas luces RBL+BML. Se incluye, además, los potenciales built-in efectivos en los casos donde la SR>1. El espesor de capa intrínseca es de 1300 nm.

Simulaciones realizadas que no fueron incluidas aquí, indican que si se disminuye progresivamente el gap de movilidad de la capa p, ajustando simultáneamente el dopaje para mantener una energía de activación igual a 0,47 eV, el máximo de SR decrece, pero el EPGC no desaparece completamente. Por otra parte, cuando se mantiene constante el gap de movilidad de la capa p igual a 2 eV y se aumenta el nivel de dopaje para disminuir la energía de activación, el EPGC finalmente desaparece para energías de activación cercanas a 0,3 eV (valor muy difícil de alcanzar en la práctica). Cabe destacar que en estas simulaciones se asumió la condición de bandas planas en ambos contactos.

Estas observaciones abren la posibilidad de analizar el escenario de estructuras n-i-p con capas p de  $\mu\text{c-Si:H}$  donde se logró una menor eficiencia en la incorporación del boro a los efectos de debilitar el campo eléctrico dentro de la zona intrínseca y así explorar si es posible obtener también el EPGC cuando la capa p de a-SiC:H es reemplazada por una de  $\mu\text{c-Si:H}$ . La Figura 6.13 muestra cómo la SR cambia cuando se disminuye la concentración de dopante en la capa p, o sea

cuando se aumenta la energía de activación de la misma. Se observa un aumento considerable del máximo de SR a medida que se disminuye la densidad de boro en la capa p de  $\mu\text{c-Si:H}$  apareciendo el efecto EPGC para densidades por debajo de  $7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , que se corresponde con una energía de activación de aproximadamente 0,13 eV. La máxima SR se obtiene para una longitud de onda de  $\sim 500 \text{ nm}$  con una densidad de dopaje de  $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , decreciendo el máximo de SR para densidades de boro más bajas, hasta que finalmente cae por debajo de la unidad cuando la densidad de dopaje es  $2,3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  o menor. En estas simulaciones también se asumió la condición de bandas planas en ambos contactos. Cuando las densidades de boro son muy bajas tiende a prevalecer la recombinación de foto-portadores sobre el atrapamiento de carga en la capa intrínseca perdiéndose la modulación del campo eléctrico que provoca la luz BML. Cuando las densidades de boro son elevadas el campo eléctrico se vuelve más intenso y la luz de prueba no es capaz de modularlo eficientemente a través del atrapamiento de cargas en la capa buffer defectuosa.



**Figura 6.13:** Respuestas espectrales predichas con D-AMPS para distintas concentraciones de boro (dopaje) en la capa (p)- $\mu\text{c-Si:H}$  de un dispositivo n-i-p de  $\mu\text{c-Si:H}$  en condiciones de cortocircuito. Los parámetros de la capa buffer se listan en la Tabla 6.2. A modo de comparación, se muestran la SR de un dispositivo similar con una capa (p)-a-Si:H y con una energía de activación de 0,47 eV (línea de puntos), y los valores experimentales de la SR (círculos vacíos) a partir de los cuales se realizó el ajuste.

Por último, siguiendo un procedimiento enteramente similar se estudió la dependencia de la  $SR > 1$  con respecto a la densidad de dopaje en la capa n, o sea con respecto a la densidad de fósforo en esa capa. Cuando se disminuye la densidad de dopaje, aumenta la energía de activación y el campo eléctrico se debilita, haciéndose más sensible a las condiciones de iluminación. Las simulaciones se realizaron para un rango de energías de activación entre 0,026 eV y 0,43 eV mostraron que la SR es poco sensible a este parámetro.

## 6.7 Conclusión

El efecto photogating complementario de respuestas espectrales inusualmente elevadas por encima de la unidad, para longitudes de onda en el azul cuando se ilumina un dispositivo de película delgada con una luz de polarización roja y/o IR (RBL), no aparece en dispositivos p-i-n de  $\mu\text{-Si:H}$  optimizados para aplicaciones fotovoltaicas o para la detección de luz en el espectro óptico. Utilizando simulaciones numéricas fue posible predecir la aparición del efecto EPGC para interfaces p/i, con una densidad elevada de defectos (entre  $6,8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  y  $2,2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ), un espesor relativamente pequeño (entre 16 nm y 38 nm) y un gap de movilidad apropiado (entre 1,55 eV y 2,2 eV). Una interfaz con estas condiciones provoca un apantallamiento o debilitamiento del campo eléctrico dentro de la capa intrínseca lo suficientemente importante como para que la luz RBL primero y el haz de prueba después puedan alterar su distribución con cierta facilidad. Cuando el haz de prueba con longitudes de ondas cortas (BML) y la luz RBL iluminan simultáneamente la muestra, la tasa de recombinación en la capa intrínseca es menor a cuando únicamente la luz auxiliar RBL está presente. Por lo tanto, cuando ambas luces, RBL y BML, inciden sobre el dispositivo se predice una tasa de recombinación neta negativa, es decir una ganancia que dan lugar respuestas espectrales mayores a la unidad.

Nuestro código predice el EPGC en dispositivos n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$  tanto para capas p con altos valores de gap ( $\text{a-SiC:H}$ ) como para capas p con bajos valores de gap ( $\mu\text{-Si:H}$ ). En este último caso la densidad de boro en la capa p no debe ser relativamente alta, es decir no debe existir una incorporación eficiente de boro. Las  $SR > 1$  son muy sensibles a los parámetros eléctricos de la interfaz p/i, como el gap de movilidad, el espesor, la densidad de defectos, y también a la densidad de boro en la capa p y en general a las movilidades y secciones eficaces de captura. Presenta una dependencia suave con respecto al espesor de la capa intrínseca para espesores superiores a 1000 nm y una mayor sensibilidad a espesores menores que tienden a disminuir el valor de  $SR > 1$ . Las respuestas anómalas también muestran una gran sensibilidad al contenido espectral y a la intensidad de la luz de polarización, mientras que presentan poca sensibilidad a la intensidad del haz de prueba y a los parámetros de la capa n. Las estructuras n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$  pueden utilizarse como fotodiodos con ganancia interna mayor a uno.

## Capítulo 7

### Conclusiones generales y perspectivas

Se estudiaron los alcances de la Aproximación de Simmons-Taylor (AST) en el modelado de curvas características de dispositivos opto-electrónicos de silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) y de silicio micro-cristalino (uc-Si:H). La aproximación AST consiste en desprestigiar en el formalismo de SRH (Shockley-Read-Hall) el proceso de emisión de electrones o de huecos para los estados del gap que se ubican respectivamente por debajo o por encima del nivel de trampas intrínseco, ubicado muy cerca del medio del gap. La AST permite definir los cuasi-niveles de Fermi de los portadores atrapados, conceptos equivalentes al del nivel del Fermi de equilibrio, pero que se aplican a la función de ocupación bajo condiciones de no equilibrio en el estado estacionario. Los cuasi-niveles de Fermi de los portadores atrapados corresponden a las energías para las cuales la función de ocupación presenta un valor intermedio entre la ocupación más elevada, la intermedia y la menor. A partir del ajuste de curvas experimentales corriente-tensión realizadas con el código D-AMPS en dispositivos p-i-n con diferentes espesores de capa intrínseca se modificaron algunos parámetros eléctricos para poder simular diferentes dispositivos y condiciones de funcionamiento y así poder testear la exactitud de la AST bajo distintos escenarios. Se pudo verificar que la aproximación AST puede ser utilizada para simplificar el modelado de celdas solares y sensores ópticos de doble o de simple inyección, sin perder precisión, cuando el dispositivo opera bajo condiciones de iluminación tanto a tensiones directas como inversas. Por otro lado, cuando el dispositivo opera bajo condiciones de oscuridad la AST puede ser utilizada en rigor sólo cuando se le aplican tensiones directas. En ambos casos la AST es válida para un amplio rango de temperaturas ( $\sim 250$  K – 400 K), espesores de capas intrínsecas (200 nm – 3000 nm) y diferentes gaps de movilidades. Bajo condiciones de oscuridad y tensiones inversas la AST tiende a sobre-estimar la corriente ( $\sim 20\%$ ), pero reproduce satisfactoriamente la forma de la curva J-V. Para bajos niveles de iluminación con intensidades del orden de  $10^{10}$  fotones/cm<sup>2</sup>/seg o mayores este error desaparece. A su vez, se comprobó que la aproximación Simmons-Taylor “0K” (AST0K), que consiste en aproximar las funciones de ocupación y la tasas de recombinación por funciones del tipo escalón con

transiciones abruptas en los cuasi-niveles de Fermi de los portadores atrapados, también puede ser utilizada para describir el comportamiento de los mismos dispositivos aunque con algunas restricciones extras. La ASTOK tiende a sobre-estimar el factor de llenado (FF) de celdas solares especialmente para capas intrínsecas con gaps de movilidades más bajos (como en a-SiGe:H) y las corrientes de sensores que operan a bajas temperaturas ( $\sim 200$  K). La ASTOK no puede utilizarse para evaluar la curva J-V de dispositivos de doble inyección que operan en condiciones de oscuridad y con tensiones inversas aplicadas. Además presenta también inconvenientes cuando se intenta evaluar la curva J-V de dispositivos de simple inyección. El nivel mínimo de iluminación necesario para poder aplicar la ASTOK es del orden de  $10^{11}$  fotones/cm<sup>2</sup>/seg. Estas afirmaciones son válidas tanto para cuando la densidad de defectos se representa con el modelo de Defect Pool Model (DPM) como para cuando se recurre al modelo de Densidad Uniforme de Estados (UDM). En el primer caso la densidad de defectos crece exponencialmente cerca de las interfaces de la capa intrínseca con las dopadas mientras que en el segundo caso es uniforme o constante en toda la capa intrínseca. Existen, sin embargo, algunas diferencias sutiles entre los resultados obtenidos con ambos modelos: en el DPM los estados de defectos al ser asumidos anfotéricos deben, necesariamente, aproximarse por pares de estados desacoplados (uno donador y otro aceptor) para poder aplicar las aproximaciones AST o ASTOK. Curiosamente la aplicación simultánea de las dos aproximaciones (AST + estados desacoplados) introduce un efecto de compensación de errores que hace que los errores finales cometidos al utilizar la AST con el modelo de DPM sean en general menores que con el modelo de UDM. La aplicación de las aproximaciones AST y en especial la ASTOK permiten simplificar considerablemente la descripción del transporte de cargas y en particular las expresiones de densidades de cargas atrapadas y de la velocidad de recombinación de los dispositivos fabricados con semiconductores desordenados. En algunos casos, cuando se implementa la aproximación ASTOK, es posible encontrar incluso expresiones analíticas para las curvas características J-V.

Se presentó un nuevo algoritmo, identificado con la sigla ARDOK, que simplifica la evaluación de las curvas características corriente-tensión de dispositivos de película delgada cuando operan en condiciones de oscuridad y bajo tensiones inversas. El algoritmo ARDOK fue diseñado para reemplazar a la aproximación ASTOK que no puede ser aplicada en las condiciones mencionadas debido a que los cuasi-niveles de portadores atrapados se invierten para tensiones inversas que no sean muy bajas. La aproximación ARDOK consiste en despreciar los procesos de captura del formalismo de SRH para evaluar la tasa de generación de portadores entre los cuasi-niveles de Fermi de portadores atrapados cuando los mismos se encuentran invertidos. Cuando la tensión inversa aplicada es baja ( $V < 0,1$  V) la ARDOK debe combinarse con la aproximación ASTOK para alcanzar resultados satisfactorios, ya que en este escenario, las



condiciones que provocan la pérdida de la validez de la ASTOK todavía no se alcanzan totalmente. A tensiones inversas más elevadas la aproximación ARDOK es capaz de reproducir la curva J-V sin necesidad de la aproximación ASTOK, especialmente si se desprecian las contribuciones de los pares e-h desde los estados localizados a menos de  $0,2kT$  del nivel de trampas intrínseco y  $0,75kT$  más allá de los cuasi-niveles de Fermi de los portadores atrapados. La aproximación ARDOK puede ser implementada cuando la densidad de estados de defecto se modela tanto con el modelo de UDM como con el modelo DPM, obteniéndose, con este último, menores errores en los cálculos de la densidad de corriente (10%). La ARDOK se puede aplicar en particular a los detectores y celdas solares, y en general a cualquier dispositivo de película delgada de semiconductores desordenados como las estructuras p-i-n, barreras Schottkies, múltiples junturas tandems, etc. que operan bajo condiciones de oscuridad o a muy bajos niveles de iluminación.

Se realizó un análisis del efecto photogating complementario (EPGC) en dispositivos n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$ . El efecto EPGC se refiere al fenómeno de respuestas espectrales (SR) inusualmente elevadas por encima de la unidad para longitudes de ondas en la zona azul del espectro cuando se ilumina un dispositivo de película delgada con una luz de polarización de color rojo. Se determinaron las condiciones necesarias para obtener el efecto EPGC en dispositivos n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$  para capas p tanto con altos valores de gap ( $\text{a-SiC:H}$ ) como para capas p con bajos valores de gap ( $\mu\text{-Si:H}$ ). También se estudió la sensibilidad de la SR a determinados parámetros del dispositivo y se determinó cuáles son los más significativos.

Se determinó que cuando el dispositivo cuenta con una capa (p)- $\text{a-SiC:H}$  la condición necesaria para predecir  $\text{SR} > 1$  para longitudes de onda del haz de prueba correspondientes al azul es la existencia de una capa buffer en la interfaz p/i con una densidad de defectos significativa del orden de  $\sim 10^{18}\text{cm}^{-3}$ , un gap de movilidad entre 1,55 eV y 2,2eV y un espesor entre 16nm y 38nm. La capa defectuosa buffer por un lado debilita considerablemente el campo eléctrico dentro de la capa intrínseca generando un incremento significativo de las pérdidas por recombinación, y por otro lado la alta densidad de trampas presente en la capa buffer hace que los fenómenos de atrapamiento y de re-emisión de huecos introducidos por la luz de prueba azul alterna den lugar a una modulación del campo eléctrico que resulta reforzado ante la presencia de la luz monocromática azul. El resultado final es una pérdida neta por recombinación negativa, o sea una ganancia neta, ya que las pérdidas por recombinación son menores cuando ambas luces, la de prueba y la de polarización están presentes que cuando sólo la de polarización esta activa.

En cambio, cuando el dispositivo contiene una capa (p)- $\mu\text{-Si:H}$ , además de la capa buffer defectuosa es necesario que la energía de activación de capa (p)- $\mu\text{-Si:H}$  no esté optimizada a los

valores utilizados normalmente en las celdas solares de  $\mu\text{-Si:H}$  ( $\sim 0,06 - 0,07$  eV), es decir, que el boro no sea eficientemente incorporado y así la energía de activación sea más elevada ( $> 0,13$  eV). De esta manera, el campo eléctrico en la capa intrínseca puede ser convenientemente modulable por la luz de prueba azul dando lugar a  $\text{SR} > 1$ . Las respuestas anómalas muestran gran sensibilidad al contenido espectral y a la intensidad de la luz de polarización y poca sensibilidad a la intensidad del haz de prueba y a los parámetros de la capa (n).

Las aproximaciones AST y ASTOK y el desarrollo del algoritmo ARDOK nos facilitarán el análisis de los mecanismos de transporte de portadores que definen la forma final de las curvas J-V en los dispositivos de película delgada, sin sacrificar la exactitud de los cálculos. Los mismos constituyen un avance sobre la comprensión y en el modelado de dispositivos de película delgada porque nos permiten interpretar de manera más sencilla e intuitiva la física interna que controla la performance de estos dispositivos.

En lo que respecta al efecto photogating sería interesante investigar si es posible obtener valores de SR elevados en junturas n-i-p de  $\mu\text{-Si:H}$  que contengan capas intrínsecas de espesores considerables (3 - 4  $\mu\text{m}$  o más) como ya han sido reportados en junturas p-i-n equivalentes de a-Si:H [74]. Para estos dispositivos de a-Si:H se han reportado valores de hasta  $\text{SR} \sim 50$  [74] con el efecto photogating convencional, es decir, cuando se utiliza un haz de prueba en la zona roja del espectro y se ilumina el dispositivo con una luz de polarización de color azul. Es probable que en estructuras análogas de  $\mu\text{-Si:H}$  sea posible superar estos valores debido a que el  $\mu\text{-Si:H}$  presenta un gap de movilidad inferior al del a-Si:H.

## Bibliografía

- [1] R. E. I. Schropp, M. Zeman, *Amorphous and Microcrystalline Silicon Solar Cells. Modeling, Materials and Device Technology*, Kluwer Academic Publishers (1998).
- [2] J. Meier, S. Dubail, R. Flückiger, D. Fischer, H. Keppner, and A. Shah, *Intrinsic microcrystalline silicon ( $\mu\text{-Si:H}$ )- a promising new thin film solar cell material*, Proceedings of the 1st WCPEC, **1** (1994) 409-412.
- [3] J. Meier, S. Dubail, J. Cuperus, U. Kroll, R. Platz, P. Torres, J. Anna Selvan, P. Pernet, N. Beck, N. Pellaton Vaucher, Ch. Hof, D. Fischer, H. Keppner, A. Shah, *Recent progress in micromorph solar cells*, J. Non-Cryst. Solids, **227-230** (1998) 1250-1256.
- [4] R. R. Arya, *Amorphous Silicon Based Solar Cell Technologies: Status, Challenges, and Opportunities*, MRS Proceedings, **808** (2004) 533-544.
- [5] C. Feser, J. Lacombe, K.V. Maydell and C. Agert, *A simulation study towards a new concept for realization of thin film triple junction solar cells based on group IV elements*, Progress in Photovoltaics, **20** (2012) 74-81.
- [6] B. Yan, G. Yue, L. Sivec, J. Yang, S. Guha and Ch-S. Jiang, *Innovative dual function nc-SiOx:H layer leading to a >16% efficient multi-junction thin film silicon solar cell*, Appl. Phys. Lett., **99** (2011) 113512-1 – 113512-3.
- [7] S. Klein, J. Wolff, F. Finger, R. Carius, H. Wagner and M. Stutzmann, *Microcrystalline Silicon Prepared by Hot-Wire Chemical Vapour Deposition for Thin Film Solar Cell Applications*, Jpn. J. Appl. Phys., **41** (2002) L10-L12.
- [8] G. de Cesare, E. Irrera, M. Tucci, *Amorphous/Crystalline Silicon Two Terminal Visible  $\alpha$ nfrared Tunable Photodetector: Modeling and Realization*, MRS Proceedings **467**, 937(1997).
- [9] J. A. Willemen, J.A.M. Zeeman, J.W. Metselaar, *Computer Modeling of Amorphous Silicon Tandem Cells*, Proceedings of the 1st WCPEC, **1** (1994) 599-602.
- [10] J. L. Gray, *A computer model for the simulation of thin-film silicon hydrogen alloy solar cells*, IEEE Transactions on Electron Devices, **36** (1989) 906-912
- [11] P. J. Mc Elheny, J. K. Arch, H.-S. Lin, and S. J. Fonash, *Range of validity of the surface-photovoltage diffusion length measurement: A computer simulation*, J. Appl. Phys., **64** (1988) 1254-1265.

- [12] M. Topič, F. Smole and J. Furlan, *Computer Model for Simulation of Amorphous Silicon Solar Cell Structures*, IEEE Electrotechnical Conference, 1994. Proceedings., 7th Mediterranean, **2** (1994) 621-624
- [13] [http://www.helmholtz-berlin.de/forschung/enma/si-v/projekte/asicsi/aforschet/index\\_en.html](http://www.helmholtz-berlin.de/forschung/enma/si-v/projekte/asicsi/aforschet/index_en.html)
- [14] <https://wiki.engr.illinois.edu/display/solarcellsim/Simulation+Software>
- [15] [http://www.silvaco.com/products/tcad/device\\_simulation/atlas/atlas.html](http://www.silvaco.com/products/tcad/device_simulation/atlas/atlas.html)
- [16] <http://lics.ee.ucr.edu/cad/tcad-medici.pdf>
- [17] F. Rubinelli, J. Rath, R. Schropp, *Microcrystalline n-i-p tunnel junction in a-Si:H/a-Si:H tandem cells*, J. Appl. Phys. **89** (2001) 4010.
- [18] S.J. Fonash, "*Solar cell device physics*", 2nd ed. Elsevier Inc., USA (2010).
- [19] F.A. Rubinelli, J.K. Arch, and S.J. Fonash, *Effect of contact barrier heights on a-Si:H p-i-n detector and solar-cell performance*, J. Appl. Phys., **72** (1992) 1621-1630.
- [20] R.A. Street, L.E. Antonuk, *Comparison of Current and Light Induced Defects in a-Si:H*, MRS Online Proceeding Library Archive, **297** (1993).
- [21] N. Palit and P. Chatterjee, *Computer analysis of a-Si:H p-i-n solar cells with a hydrogenated microcrystalline silicon p layer*, J. Appl. Phys. **86** (1999) 6879-6889.
- [22] R.A. Street, *Hydrogenated Amorphous Silicon*, Cambridge University Press, (1991).
- [23] V. Halpern, *The statistics of recombination via dangling bond in amorphous silicon*, Philos. Mag. B., **54** (1986) 473-482.
- [24] V. Suntharalingam and H.M. Branz, *On Modeling Trivalent Dangling Bonds with Bivalent Levels*, in: Amorphous Silicon Technology. Proceedings of Materials Research Society., **336** (1994) 153-158.
- [25] J.A. Willemen, *Modelling of Amorphous Silicon Single- and Multi Junction Solar Cells*, Ph.D. thesis Delft University of Technology, 1998.
- [26] E. Klimovsky, J.K. Rath, R.E.I. Schropp, F.A. Rubinelli, *Errors introduced in a-Si:H-based solar cell modeling when dangling bonds are approximated by decoupled states*, Thin Solid Films, **422** (2002) 211-219.
- [27] M. Stutzmann, *The defect density in amorphous silicon*, Philos. Mag. B., **60** (1989) 531-546.
- [28] M.J. Powell and S.C. Deane, *Improved defect-pool model for charged defects in amorphous silicon*, Phys. Rev. B, **48** (1993) 10815-10827.

- [29] M. J. Powell and S.C. Deane, *Defect-pool model and the hydrogen density of states in hydrogenated amorphous silicon*, Phys. Rev. B, **53** (1996) 10121-10132.
- [30] E. Klimovsky, A. Sturiale y F.A. Rubinelli, *Characteristic curves of hydrogenated amorphous silicon based solar cells modeled with the defect pool model*, Thin Solid Films, **511** (2007) 4826-4833.
- [31] D. A. Neamen, "Semiconductor Physics and Devices. Basic Principles", Richard D. IRWIN, INC., USA (1992).
- [32] G. Moddel, *Derivation of the low-energy optical-absorption spectra of a-Si: H from photoconductivity*, Phys. Rev. B, **22** (1980)
- [33] H. Curtins, M. Favre, Y. Ziegler, N. Wyrsh and A.V. Shah, *Comparison of Light-Induced Degradation in Low and High-Rate Deposited VHF-GD a-Si:H: Effect of Film Inhomogeneities*, MRS Proceedings, Volume **118** (1988) 159
- [34] S .O. Kasap, "Optoelectronics and photonics. Principles and practices", Prentice Hall, 1<sup>a</sup> ed. (2000).
- [35] J. Tauc, R. Grigorovici, A. Vancu, *Optical Properties and Electronic Structure of Amorphous Germanium*, Phys. Status Solidi B., **15** (1966) 627-637.
- [36] L. Ley, *Photoemission and Optical properties, The Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon*, Vol II, J.D. Joannopoulos & G. Lucovski (1983).
- [37] G.D. Cody, B.G. Brooks and B. Abeles, *Optical absorption above the optical gap of amorphous silicon hydride*, Solar Energy Materials, **8** (1982) 231-240.
- [38] R.W. Collins, I. An, H.V. Nguyen, Y. Lu, Real time spectroscopic ellipsometry for characterization of nucleation, growth, and optical functions of thin films, Thin Solid Films, **233** (1993) 244-254.
- [39] E. Klimosvky, "Caracterización y optimización de celdas solares de a-Si:H", tesis doctoral Universidad Nacional del Litoral, 2004.
- [40] F. A. Rubinelli, R. Jiménez, J. K. Rath, and R. E. I. Schropp, *Using computer modeling analysis in single junction a-SiGe:H p-i-n solar cells*, J. Appl. Phys., **91** (2002) 2409-2416.
- [41] M. Vukadinović, F. Smole, M. Topič, R.E.I. Schropp and F. A. Rubinelli, *Transport in tunneling recombination junctions: A combined computer simulation study*, J. Appl. Phys. **96** (2004) 7289.
- [42] F. A. Rubinelli, *Simulation of forward dark current voltage characteristics of tandem solar cells*, Thin Solid Film, **520** (2012) 4449-4454

- [43] S. J. Fonash, J. Arch, J. Hou, W. Howland, P. McElheny, A. Moquin, M. Rogosky, F. A. Rubinelli, T. Tran and H. Zhu, *A manual for AMPS-1D, A One-Dimensional Device Simulation Program for the Analysis of Microelectronic and Photonic Structures*, The Center for Nanotechnology Education and Utilization, The Pennsylvania State University, 1997.
- [44] R. N. Hall, *Germanium rectifier characteristics*, Phys. Rev., **83** (1951) 228.
- [45] R. N. Hall, *Electron-Hole Recombination in Germanium*, Phys. Rev., **87** (1952) 387.
- [46] W. Shockley and W.T. Read, Jr., *Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons*, Phys. Rev., **87** (1952) 835-842.
- [47] C. Sah and W. Shockley, *Electron-hole recombination statistics in semiconductors through flaws with many charge conditions*, Phys. Rev., **109** (1958) 1103.
- [48] W. Shockley and J. T. Last, *Statistics of the Charge Distribution for a Localized Flaw in a Semiconductor*, Phys. Rev., **107** (1957) 392.
- [49] H. Okamoto, H. Kida, and Y. Hamakawa, *Steady-state photoconductivity in amorphous semiconductors containing correlated defects*, Phil. Mag., **49** (1984) 231-247.
- [50] J. K. Arch, F.A. Rubinelli, J.Y. Hou and S.J. Fonash, *Computer analysis of the role of p-layer quality, thickness, transport mechanisms, and contact barrier height in the performance of hydrogenated amorphous silicon p-i-n solar cells*, J. Appl. Phys., **69** (1991) 7057.
- [51] T. Jamali-Beh, I.S. Chen, H. Liu, Y. Lee and C. R. Wronski, *Effect of White and Red Light Illumination on the Degradation of a-Si:H Solar Cells*, MRS Proceedings, Volume **377** (1995) 626.
- [52] K. Lips and W. Fuhs, *Transport and recombination in amorphous p-i-n-type solar cells studied by electrically detected magnetic resonance*, J. Appl. Phys., **74** (1993) 3993
- [53] P. Sichenugrist, M. Konagai, K. Takahashi, *Theoretical analysis of amorphous silicon solar cells: Effects of interface recombination*, J. Appl. Phys., **55** (1984) 1155-1161.
- [54] R.R. Arya, A. Catalano, R.S. Oswald, *Amorphous silicon p-i-n solar cells with graded interface*, Appl. Phys. Lett., **49** (1986) 1089-1091.
- [55] F. Smole and J. Furlan, *Effects of abrupt and graded a-Si:C:H/a-Si:H interface on internal properties and external characteristics of p-i-n a-Si:H solar cells*, J. Appl. Phys. **72** (1992) 5964-5969.

- [56] J. Simmons and G. Taylor, *Nonequilibrium Steady-State Statistics and Associated Effects for Insulators and Semiconductors Containing an Arbitrary Distribution of Traps*, Phys. Rev. B, **4** (1971) 502.
- [57] R. C. Gonzales, R.E. Woods, "Digital Image Processing", Second Edition, Prentice Hall, New Jersey (2002).
- [58] M. Hack y M. Shur, *Physics of amorphous silicon alloy p-i-n solar cells*, J. Appl. Phys. **58** (1985) 997.
- [59] A. Mittiga, P. Fiorini, M. Falconieri, F. Evangelisti, Dark J-V characteristic of p-i-n a-Si:H solar cells, J. Appl. Phys., **66** (1989) 2667-2674.
- [60] M. Block, "Modellierung von Dünnschichsolarzellen aus amorphem Silizium, Ph.D thesis Fachbereich Physic der Phillips-Universität Marburg, 1993.
- [61] G. Schumm, *Chemical equilibrium description of stable and metastable defect structures in a-Si:H*, Phys. Rev. B., **49** (1994) 2427-2440.
- [62] J. J. H. Strengers, F. A. Rubinelli, J. K. Rath, R. E. I. Schropp, *A combined experimental and computer simulation study of HWCVD nip microcrystalline silicon solar cells*, Thin Solid Films **501** (2006) 291-294.
- [63] J. L. Gray, *A computer model for the simulation of thin-film siliconhydrogen alloy solar cells*, IEEE Transactions on Electron Devices, **36** (1989) 906-912
- [64] A. Sturiale and F.A. Rubinelli, *Evidences of the defect pool model in the dark current-voltage characteristics of hydrogenated amorphous silicon based p-i-n devices*, Thin solid Film, **516** (2008) 7708-7714.
- [65] M. A. Kroon and R.A.C.M.M. van Swaaij, *Spatial effects on ideality factor of amorphous silicon pin diodes*, J. Appl. Phys. **90** (2001) 994.
- [66] M. G. De Greef, R. A. Rubinelli, R. A .C. M. M. van Swaaij, Thin Solid Films, **540** (2013) 227.
- [67] F.A. Rubinelli, H. Liu and C.R. Wronski, *A comparison of the hydrogenated amorphous Si Schottky barrier and the hydrogenated amorphous Si p-i-n dark forward-bias current density-voltage characteristics*, Phil. Mag., **74** (1996) 407-426.
- [68] Cohen, Phys Rev B, 1982; Archibald, Philos Mag, 1986
- [69] M.G. De Greef, F.A. Rubinelli, *Evaluation of the characteristic curves of a-Si:H based devices with the Simmons–Taylor approximation when the defect pool model is used*, Phys. Status Solidi B., **252** (2015) 170-180.

- [70] A. Rose, "Concepts in photoconductivity and allied problems". RCA Laboratories, Robert E. Krieger Publishing CO. Huntington, New York, USA, (1978).
- [71] H. P. Maruska, M. C. Hicks, T.D. Moustakas, and R. Froiedman, *Optically controlled amorphous silicon photosensitive device*, IEEE Trans. Electron Devices, **31** (1984) 1343.
- [72] H. Hou, S. J. Fonash, *Quantum efficiencies greater than unity: A computer study of a photogating effect in amorphous silicon p-i-n devices*, Appl. Phys. Lett., **61** (1992) 186.
- [73] F. A. Rubinelli, *The origin of quantum efficiencies greater than unity in a-Si:H Schottky barriers*, J. Appl. Phys., **75** (1994) 998.
- [74] C. Main, J. H. Zollondz, S. Reynolds, W. Gao, R. Brüggemann, M. J. Rose, *Investigation of collection efficiencies much larger than unity in a-Si:H p-i-n structures*, J. Appl. Phys., **85** (1999) 296.
- [75] S. H. Bae, S. J. Fonash, *Impact of structure on photogating*, J. Appl. Phys., **79**, (1996) 2213.
- [76] P. Chatterjee, *Origin of the modulated photocurrent in the presence of bias light in quantum efficiency measurements*, J. Appl. Phys., **75** (1994) 1093.
- [77] H. Li, R. E. I. Schropp, F. A. Rubinelli, *Photogating effect as a defect probe in hydrogenated nanocrystalline silicon solar cells*, J. Appl. Phys., **108** (2010) 014509.
- [78] S. H. Bae, S. J. Fonash, *Examination of optimized structures for a-Si:H based triple junction solar cells*, IEEE Xplore (1995).
- [79] M. W. M. van Cleef, J. K. Rath, F. A. Rubinelli, C. H. M. van der Werf, R. E. I. Schropp, W. F. van der Weg, *Performance of heterojunction p+ microcrystalline silicon n crystalline silicon solar cells*, J. Appl. Phys., **82** (1997) 6089.



# Nomenclatura

## Abreviaturas

a-Si:H	Silicio amorfo hidrogenado
c-Si	Silicio cristalino
$\mu$ c-Si:H	Silicio micro-cristalino
nc-Si:H	Silicio nano-cristalino
DOS	Densidad de estados
DB	Enlaces colgantes (Dangling Bond)
SRH	Schockley-Read-Hall
DPM	Modelo de Defect Pool
UDM	Modelo de Densidad Uniforme de estados
FF	Factor de llenado (Fill Factor)
SR	Respuesta Espectral
$k$	Constante de Boltzman
$e$	Carga del electrón
e-h	electrón-hueco
IR	Infrarrojo
UV	ultravioleta
TCO	Óxido conductor transparente
CNFA	Cuasi-niveles de Fermi para cargas atrapadas
RBL	Luz auxiliar de polarización roja (Red Bias Light)
RML	Haz de luz monocromática roja (Red Monochromatic Light)
BBL	Luz auxiliar de polarización azul (Blue Bias Light)
BML	Haz de luz monocromática azul (Blue Monochromatic Light)
EPG	Efecto photogating
EPGC	Efecto photogating complementario
DBP	Dual Bean Photoconductivity

## Símbolos

Símbolo	Descripción	Unidad
$D$	Densidad de estado encerrada por una gaussiana	$\text{cm}^{-3}$
$D_n$	Coeficiente de difusión de electrones	$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$
$D_p$	Coeficiente de difusión de huecos	$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$
$E$	Energía	-
$E^{+/0}$	Nivel de energía de transición +/0	eV
$E^{0/-}$	Nivel de energía de transición 0/-	eV
$E_A$	Energía característica de la cola de la banda de conducción	eV
$E_c$	Energía del borde de la banda de conducción	eV
$E_D$	Energía característica de la cola de la banda de valencia	eV
$E_f$	Nivel de energía de Fermi	eV
$E_{fn}$	Cuasi-nivel de Fermi para electrones	eV
$E_{fnt}$	Cuasi-nivel de Fermi para electrones atrapados	eV
$E_{fp}$	Cuasi-nivel de Fermi para huecos	eV
$E_{fpt}$	Cuasi-nivel de Fermi para huecos atrapados	eV
$E_G$	Energía del gap	eV
$e_n$	Coeficiente de emisión de electrones	$\text{s}^{-1}$
$e_p$	Coeficiente de emisión de huecos	$\text{s}^{-1}$
$E_{PD}$	Energía del pico de la distribución gaussiana de Defect Pool	eV
$E_{PG}$	Posición (en energía) del pico de la distribución gaussiana	eV
$E_t$	Nivel de energía de una trampa	eV
$E_{t0}$	Nivel de trampa intrínseco	eV
$E_v$	Energía del borde de la banda de valencia	eV
$F$	Campo eléctrico	$\text{V cm}^{-1}$
$F^-$	Probabilidad de ocupación de DB con carga negativa	-
$F^+$	Probabilidad de ocupación de DB con carga positivas	-
$F^0$	Probabilidad de ocupación de DB con carga neutra	-
$f_a$	Función de ocupación de estados aceptores	-
$f_d$	Función de ocupación de estados donores	-
$f_n$	Función de ocupación de electrones	-
$f_p$	Función de ocupación de huecos	-

<b>Símbolo</b>	<b>Descripción</b>	<b>Unidad</b>
$G$	Tasa de generación	$\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$
$g_a$	Densidad de estados aceptores dentro del gap	$\text{cm}^{-3}$
$g_{bc}$	Densidad de estados en la banda de conducción	$\text{cm}^{-3}$
$G_{BL}$	Tasa de generación generada por la luz auxiliar	$\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$
$g_{bv}$	Densidad de estados en la banda de valencia	$\text{cm}^{-3}$
$g_{c0}$	Densidad de estados en el borde de la banda de conducción	$\text{cm}^{-3}$
$g_{cc}$	Densidad de estados en la cola de la banda de conducción	$\text{cm}^{-3}$
$g_{cv}$	Densidad de estados en la cola de la banda de valencia	$\text{cm}^{-3}$
$g_d$	Densidad de estados donores dentro del gap	$\text{cm}^{-3}$
$g_{DB}$	Densidad de defectos o DBs dentro del gap	$\text{cm}^{-3}$
$g_{v0}$	Densidad de estados en el borde de la banda de valencia	$\text{cm}^{-3}$
$I$	Corriente	A
$J$	Densidad de corriente	$\text{A cm}^{-2}$
$J_{BL}$	Densidad de corriente generada por la luz auxiliar	$\text{A cm}^{-2}$
$J_n$	Densidad de corriente de electrones	$\text{A cm}^{-2}$
$J_p$	Densidad de corriente de huecos	$\text{A cm}^{-2}$
$J_{sc}$	Densidad de corriente de corto circuito	$\text{A cm}^{-2}$
$n$	Concentración de electrones libres	$\text{cm}^{-3}$
$N_a$	Concentración de impurezas ionizadas aceptoras	$\text{cm}^{-3}$
$N_c$	Densidad efectiva de estados en la banda de conducción	$\text{cm}^{-3}$
$N_d$	Concentración de impurezas ionizadas donoras	$\text{cm}^{-3}$
$n_i$	Concentración de portadores intrínseca	$\text{cm}^{-3}$
$n_t$	Concentración de electrones atrapados	$\text{cm}^{-3}$
$N_v$	Densidad efectiva de estados en la banda de valencia	$\text{cm}^{-3}$
$p$	Concentración de huecos libres	$\text{cm}^{-3}$
$p_t$	Concentración de huecos atrapados	$\text{cm}^{-3}$
$R$	Tasa de recombinación	$\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$
$R_{BL}$	Tasa de recombinación generada por la luz auxiliar	$\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$
$T$	Temperatura	$^{\circ}\text{C}$ o K
$t_n$	Sección eficaz de captura de electrones en las colas	$\text{cm}^2$
$t_p$	Sección eficaz de captura de huecos en las colas	$\text{cm}^2$
$U$	Energía de correlación	eV

<b>Símbolo</b>	<b>Descripción</b>	<b>Unidad</b>
$V$	Voltaje	V
$V_{oc}$	Voltaje de circuito abierto	V
$v_{th}$	Velocidad térmica	cm s <sup>-1</sup>
$W$	Espesor	nm
$\alpha$	Coefficiente de absorción	cm <sup>-1</sup>
$\varepsilon$	Error relativo	-
$\eta_R$	Eficiencia de recombinación	s <sup>-1</sup>
$\lambda$	Longitud de onda	nm
$\mu_n$	Movilidad de electrones	cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
$\mu_p$	Movilidad de huecos	cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
$\rho$	Densidad de carga espacial	C cm <sup>-3</sup>
$\sigma_0$	Sección eficaz de captura de electrones	cm <sup>2</sup>
$\sigma_{CH}$	Sección eficaz de captura de trampas cargadas	cm <sup>2</sup>
$\sigma_{DP}$	Desviación estándar de la distribución gaussiana de Defect Pool	eV
$\sigma_{elec}$	Conductividad eléctrica	
$\sigma_n$	Sección eficaz de captura de electrones	cm <sup>2</sup>
$\sigma_{na}$	Sección eficaz de captura de electrones para trampas aceptoras	cm <sup>2</sup>
$\sigma_{nd}$	Sección eficaz de captura de electrones para trampas donoras	cm <sup>2</sup>
$\sigma_p$	Sección eficaz de captura de huecos	cm <sup>2</sup>
$\sigma_{pa}$	Sección eficaz de captura de huecos para trampas aceptoras	cm <sup>2</sup>
$\sigma_{pd}$	Sección eficaz de captura de huecos para trampas donoras	cm <sup>2</sup>
$\varphi_{BO}$	Barrera de potencial en el contacto frontal	eV
$\varphi_{BL}$	Barrera de potencial en el contacto posterior	eV
$\phi_{BL}$	Densidad de flujo de fotones de luz auxiliar	cm <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup>
$\phi_{ML}$	Densidad de flujo de fotones de luz monocromática	cm <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup>
$\chi$	Afinidad electrónica	eV
$\psi$	Potencial eléctrico	V

## Publicaciones

1. (2012) M. G. De Greef, H. Ramírez, F. A. Rubinelli, "Estudio de los alcances y la validez de la aproximación de Simmons-Taylor en el modelado de dispositivos de semiconductores desordenados", ANALES AFA, Vol. 23 N.2, 60-65.
2. (2012) H. Ramírez, M. De Greef, and F. A. Rubinelli, "Estudio de la movilidad drift en celdas solares de a-Si:H mediante simulación numérica", ANALES AFA, Vol. 23 N.2,80-84.
3. (2013) M. G. De Greef, F. A. Rubinelli, R. van Swaaij, "Modeling characteristic curves of solar cells and optical detectors with the Simmons-Taylor approximation", Thin Solid Films **540**, 227-234.
4. (2015) M. G. De Greef, F. A. Rubinelli, "Evaluation of the characteristic curves of a-Si:H based devices with the Simmons-Taylor approximation when the defect pool model is used", Physica Status Solidi (B), **252** (1), 170-180.
5. (2015) F. A. Rubinelli, M. G. De Greef, "Simplified method for the evaluation of the reverse dark current-voltage characteristic of thin film devices", Physica Status Solidi (B), **252** (9), 2129-2141.
6. (2016) F. A. Rubinelli, M. G. De Greef, "Respuestas espectrales mayores a uno en junturas n-i-p de  $\mu\text{c-Si:H}$ ", ANALES AFA, Vol. 27 N.1