

# ESTUDIO DE LOS ALCANCES Y LA VALIDEZ DE LA APROXIMACIÓN DE SIMMON-TAYLOR EN EL MODELADO DE DISPOSITIVOS DE SEMICONDUCTORES DESORDENADOS

## STUDY OF THE SCOPES AND THE VALIDITY OF THE SIMMON-TAYLORS APPROACH IN THE MODELING OF DISORDERED SEMICONDUCTOR DEVICES

M. De Greef, H. Ramirez, F. A. Rubinelli

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC) - Universidad Nacional del Litoral – CONICET  
Güemes 3450, (3000), Santa Fe, Argentina  
e-mail: frubinelli@santafe-conicet.gov.ar , mdgreef@santafe-conicet.gov.ar , hramirezj@santafe-conicet.gov.ar

Recibido 30/03/2012; aprobado 10/12/2012

La performance de los dispositivos electrónicos de materiales amorfos es altamente dependiente de la densidad de estados presente dentro de la banda prohibida (gap) que contiene una distribución continua compuesta de dos colas exponencialmente decrecientes y estados profundos. La carga atrapada en los estados localizados y la recombinación de los pares electrón-huecos a través de estos estados se describe usualmente con el formalismo de Shockley-Read-Hall (SRH). Las ecuaciones de SRH pueden simplificarse considerablemente con la aproximación propuesta por Simmon-Taylor, en particular con la aproximación de dichos autores conocida como "0K". Si bien la validez de estas aproximaciones ha sido discutida en la literatura para materiales semiconductores, según nuestro conocimiento no se ha realizado un estudio sistemático que contemple la inclusión de dichos algoritmos en un código numérico de dispositivos donde se puedan comparar los resultados de hacerlas o no. En este trabajo se implementaron las aproximaciones de Simmon-Taylor en nuestro código D-AMPS y se cotejaron las curvas corriente tensión y respuesta espectral obtenidas con y sin dicha aproximación para distintos escenarios y para una amplia gama de posibles parámetros eléctricos. Nuestros resultados indican que la aproximación de Simmon-Taylor es aceptable para tensiones directas mientras que la de 0K presenta algunos problemas.

Palabras Claves: aproximación Simmon-Taylor, semiconductores amorfos, celdas solares, DAMPS

The performance of amorphous materials based electronic device is highly dependent on the density of states present in the band gap. This density of states contains two exponentially decreasing tails and deep states. Charge trapping in localized gap states and recombination of electron-hole pair through these states are usually described by the Shockley-Read-Hall (SRH) formalism. The equations derived in the SRH statistics can be simplified by Simmon-Taylor's approach, especially using so called "0K" approximation. Although the validity of these approaches were discussed in the literature on semiconductor materials, there is no a systematical study where these algorithms were included in a device oriented numerical code in order to compare the differences introduced by the approximations. In this paper, the approaches of Simmon-Taylor were implemented in our code D-AMPS and the current-voltage and spectral responses curves were obtained with and without these approximations under different sceneries and other electric parameters. Our results indicate that the Simmon-Taylor approach is acceptable when the device is forward biased, while the 0K approach presents some problems.

Key Word: Simmon-Taylor approach, amorphous semiconductors, solar cells, DAMPS

### I. INTRODUCCIÓN

Los materiales amorfos se caracterizan por la falta de orden de largo alcance que presenta su estructura atómica. Estos materiales tienen propiedades intrínsecas diferentes a la de los cristalinos y no pueden aplicarse las herramientas teóricas de la física de los sólidos que suponen cierta simetría en la distribución de los átomos.

La performance de muchos dispositivos electrónicos construidos a partir de materiales semiconductores amorfos depende fuertemente de la densidad de estados en el gap. 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.

Shockley-Read-Hall (SRH) formularon en el año 1952 una estadística que describe el proceso de atrapamiento de cargas y de recombinación utilizando estados o trampas que permiten albergar hasta un portador<sup>1</sup>. En el año 1971 Simmon-Taylor presentaron una aproximación (AST) al modelo de SRH que simplifica significativamente las ecuaciones de este modelo<sup>2</sup>.

En este trabajo se estudia la validez de la idea propuesta por Simmon-Taylor comparando los resultados que arroja un código numérico que modela dispositivos electrónicos cuando la estadística de SRH se reemplaza por los algoritmos que describen las aproximaciones. De esta manera se puede realizar un estudio sistemático comparando los resultados de

aplicar o no dichas aproximaciones en distintos escenarios propuestos. Según nuestros conocimientos la validez de la AST nunca fue testeada directamente en dispositivos electrónicos que pueden operar en condiciones muy diversas.

### Modelo de Shockley-Read-Hall (SRH)

La derivación original de SRH se realizó para semiconductores ordenados donde en los estados dentro del gap son discretos. El modelo de SRH considera la presencia de cuatro procesos básicos entre las trampas y las bandas de estados extendidos: (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 hueco hacia la banda de valencia.

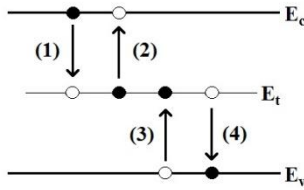


Figura 1: Esquema ilustrativo de los procesos básicos que intervienen en el modelo de SRH.

Aplicando el principio de balance detallado en el equilibrio termodinámico y asumiendo que el semiconductor alcanza un estado estacionario los autores obtienen la siguiente expresión para la función de ocupación de electrones para una trampa dentro del gap de energía  $E_t$ <sup>1</sup>:

$$f^n(E_t) = \frac{n v_{th} \sigma_n + e_p}{n v_{th} \sigma_n + p v_{th} \sigma_p + e_n + e_p} \quad (1)$$

donde  $E_t$  es el nivel de energía de la trampa,  $n$  y  $p$  son la concentración de portadores libres,  $v_{th}$  es la velocidad térmica,  $\sigma_n$  y  $\sigma_p$  la sección eficaz de captura de electrones y huecos, y  $e_n$  y  $e_p$  los coeficientes de emisión de electrones y huecos respectivamente. Esta ecuación, al igual que en las demás ecuaciones del presente trabajo, se expresa en términos generales sin especificar el estado de carga de las secciones eficaces de captura ni la de los coeficientes de emisión que corresponden según sea una trampa donora o una trampa aceptora.

A partir de la función definida en (1) se puede calcular la concentración de huecos atrapados  $p_t(E,x)$  en las trampas donoras y de electrones atrapados  $n_t(E,x)$  en las trampasceptoras y la correspondiente velocidad de recombinación  $R(E,x)$  donde  $x$  es la coordenada espacial. En semiconductores desordenados integrando sobre todos los estados presentes en el gap se obtienen las concentraciones de cargas atrapadas  $p_t(x)$   $n_t(x)$  y la velocidad de recombinación  $R(x)$ .

### Aproximación de Simmon-Taylor (AST)

Simmon y Taylor definen el nivel  $E_{t0}$  que corresponde a la energía en la cual el coeficiente de emisión de electrones y el de huecos resultan iguales<sup>2</sup>. Como los coeficientes de emisión aumentan

exponencialmente con la energía de la trampa (el de electrones hacia la banda de conducción y el de huecos hacia la banda de valencia) es razonable suponer que por encima (debajo) de ese nivel se desprecie el coeficiente de emisión de huecos (electrones). Aplicando la AST, la ecuación (1) puede expresarse en función de la función de ocupación de Fermi-Dirac en equilibrio como<sup>2</sup>:

$$f^n = \frac{n \sigma_n}{n \sigma_n + p \sigma_p} \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_t - E_{fnt}}{KT}\right) \right]^{-1} \quad (2)$$

donde  $E_{fnt}$  es el cuasi nivel de Fermi para electrones atrapados, que se define como el nivel de energía en el cual un electrón atrapado en una trampa tiene la misma probabilidad de ser emitido a la capa de conducción que de recombinarse<sup>2</sup>.

Análogamente, se puede expresar la función de ocupación de huecos como:

$$f^p = 1 - f^n = \frac{n \sigma_p}{n \sigma_n + p \sigma_p} \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_{fp} - E_t}{KT}\right) \right]^{-1} \quad (3)$$

donde  $E_{fp}$  es el cuasi nivel de Fermi para huecos atrapados, que se define en forma equivalente a  $E_{fnt}$ .

Una de las principales características de esta aproximación es que la función de ocupación es una función del tipo escalón con dos transiciones suaves alrededor de los niveles  $E_{fp}$  y  $E_{fnt}$  entre los cuales alcanza el valor  $(n \sigma_p)/(n \sigma_n + p \sigma_p)$  para trampas donoras. Para energías inferiores a  $E_{fp}$  adquiere el valor "1" y para energías superiores a  $E_{fnt}$  adquiere el valor "0".

En la **aproximación de Simmon-Taylor 0K (AST0K)** esta transición suave cerca de los cuasi niveles de Fermi para cargas atrapadas, se reemplaza por una transición abrupta. De esta manera la función de ocupación queda como:

$$f^n(E_t) = \begin{cases} 1 & \text{para } E_t < E_{fp} \\ \frac{n \sigma_p}{n \sigma_n + p \sigma_p} & \text{para } E_{fp} < E_t < E_{fnt} \\ 0 & \text{para } E_t > E_{fnt} \end{cases} \quad (4)$$

## II. MODELADO

Las simulaciones se realizaron con el código D-AMPS cuya descripción puede hallarse en publicaciones previas<sup>3</sup>. Las ecuaciones que evalúan las cargas atrapadas y la recombinación fueron convenientemente modificadas y el usuario puede escoger entre los formalismos SRH, AST y AST0K simplemente cambiando un parámetro. El dispositivo básico que se modeló con los tres formalismos es una juntura p-i-n de de silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) que encuentra aplicación en celdas solares.

Los parámetros eléctricos y ópticos utilizados en las diferentes capas resultaron de calibrar el código mediante ajustes de curvas corriente tensión (J-V) a oscuras y bajo iluminación AM1.5 y de información experimental provista por el grupo a cargo de René van Swaaij de Delft University, en Holanda, donde se

crecieron y caracterizaron las muestras. Los resultados de los ajustes se muestran en las Figura 2 y 3.

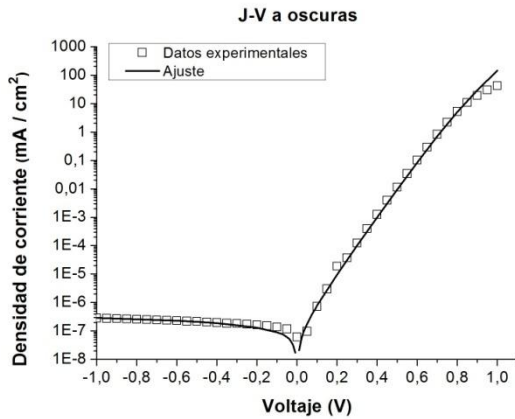


Figura 2: Ajuste de la curva J-V a oscuras.

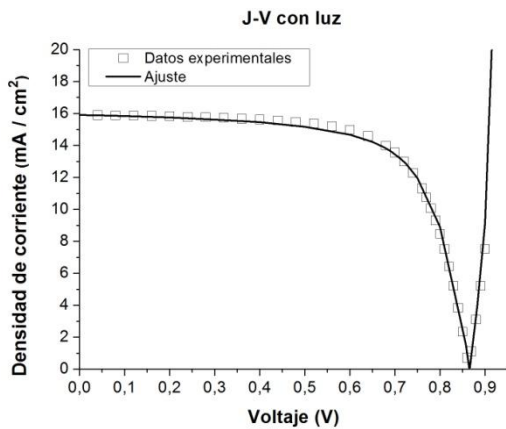


Figura 3: Ajuste de la curva J-V con luz.

Los espesores de las capas dopadas e intrínsecas se pueden encontrar en la Tabla 1. La densidad de estados en el a-Si:H se modela con dos colas exponencialmente decrecientes desde los bordes de banda hacia el medio del gap y se asume una densidad uniforme de estados profundos. Todas las trampas son simples, es decir, pueden contener un solo electrón, y pueden ser donoras o aceptoras. Los estados profundos se representan con gaussianas: tres con estados donores y tres con estados aceptores separadas entre sí por una energía de correlación,  $U$ , de 0,2 eV.

Los principales parámetros de entrada utilizados se listan en la Tabla 1. La nomenclatura utilizada en esta tabla es la siguiente:  $W$  es el ancho de la capa,  $G_P$  el gap,  $N_c$  y  $N_v$  son las densidades efectivas de estados en la banda de conducción y de valencia respectivamente,  $\sigma_N$  y  $\sigma_P$  las movilidades de electrones y huecos,  $E_D$  y  $E_A$  las pendientes de la cola donora y de la aceptora,  $t_N$  y  $t_P$  las secciones eficaces de electrones y huecos en los estados de las colas; los signos  $+$ ,  $-$  y  $\theta$  indican la carga de los estados;  $D^-$ ,  $D^0$  y  $D^+$  son las densidades de estados dentro de las tres Gaussianas,  $E_D^-$ ,  $E_D^0$  y  $E_D^+$  las posiciones de los picos de las Gaussianas;  $\sigma_D$  las desviaciones estándar;  $\sigma_N$  y  $\sigma_P$  son las secciones eficaces de electrones y huecos de las Gaussianas.

TABLA 1: PRINCIPALES PARÁMETROS DE ENTRADA DEL MODELO.

Parámetro	P(a-SiC)	I (a-Si)	N(a-Si)
$W$ (nm)	10	600	20
$G_P$ (eV)	2	1,72	1,72
$N_c N_v$ (cm <sup>-3</sup> )	$2.10^{20}$	$2,5.10^{20}$	$2.10^{20}$
$\mu_N$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	10	30	30
$\mu_P$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	0,4	3	5
$E_D$ (meV)	80	45	45
$E_A$ (meV)	45	25	30
$t_N^+ t_P^-$ (cm <sup>2</sup> )	$1.10^{-15}$	$1.10^{-15}$	$1.10^{-15}$
$t_N^0 t_P^0$ (cm <sup>2</sup> )	$1.10^{-17}$	$1.10^{-17}$	$1.10^{-17}$
$D^-$ (cm <sup>-3</sup> )	$3.10^{12}$	$2.10^{-15}$	$1,51.10^{12}$
$D^0$ (cm <sup>-3</sup> )	$2.10^{16}$	$1.10^{-15}$	$1,6.10^{15}$
$D^+$ (cm <sup>-3</sup> )	$5,25.10^{18}$	$2.10^{-15}$	$1,6.10^{18}$
$E_D^-$ (eV)	0,7	0,55	0,6
$E_D^0$ (eV)	1	0,85	0,9
$E_D^+$ (eV)	1,3	1,15	0,12
$\sigma_D$ (eV)	0,13	0,13	0,13
$\sigma_N^+ \sigma_P^-$ (cm <sup>2</sup> )	$1.10^{-15}$	$1,2.10^{-14}$	$5.10^{-15}$
$\sigma_N^0 \sigma_P^0$ (cm <sup>2</sup> )	$2.10^{-16}$	$1,2.10^{-15}$	$5.10^{-16}$

### III. METODOLOGÍA

Se propusieron distintos escenarios modelados con el código D-AMPS y para cada uno de ellos se compararon los resultados arrojados por las AST y AST0K tomando como referencia el modelo de SRH. En la Tabla 2 se resumen los casos más significativos estudiados.

TABLA 2: PARÁMETROS DE LOS DISTINTO ESCENARIOS

	Junt	Gap (eV)	T (K)	$\sigma_N^+ \sigma_P^-$ (cm <sup>2</sup> )	$\sigma_N^+ \sigma_P^-$ (cm <sup>2</sup> )	$W_I$ (nm)
1	P I N	1,72	300	$4x10^{-15}$	$4x10^{-16}$	500
2	<u>N I N</u>	1,72	300	$4x10^{-15}$	$4x10^{-16}$	500
3	<u>P I P</u>	1,72	300	$4x10^{-15}$	$4x10^{-16}$	500
4	P I N	<u>1,48</u>	300	$4x10^{-15}$	$4x10^{-16}$	<u>3000</u>
5	P I N	1,72	<u>250</u>	$4x10^{-15}$	$4x10^{-16}$	500
6	P I N	1,72	<u>400</u>	$4x10^{-15}$	$4x10^{-16}$	500
7	P I N	1,72	300	<u><math>4x10^{-16}</math></u>	<u><math>4x10^{-15}</math></u>	500
8	P I N	1,72	300	$4x10^{-15}$	$4x10^{-16}$	<u>3000</u>

donde **Junt** indica el tipo de juntura analizada y  $W_I$  el espesor de la capa intrínseca. Se resaltan los parámetros que se variaron en los distintos escenarios.

A continuación se presentan los resultados más trascendentes.

#### IV. RESULTADOS

Para los escenarios en los que se modificó la temperatura, las curvas J-V con y sin luz para tensiones directas muestran un comportamiento casi idéntico entre los resultados predichos por el modelo de SRH y por la AST.

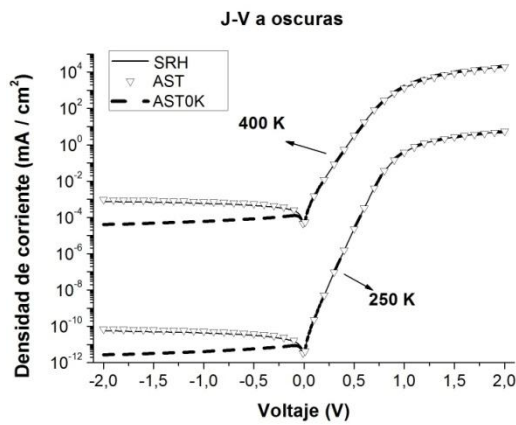


Figura 4: Curvas J-V a oscuras para los escenarios 5 y 6.

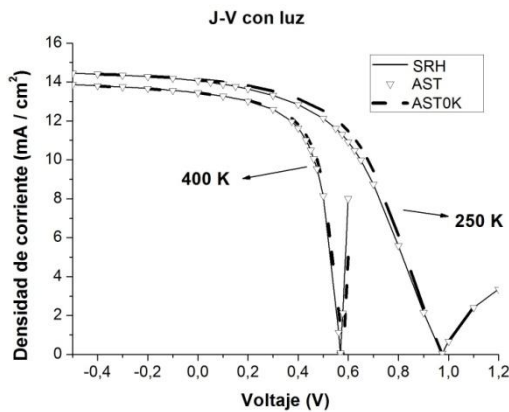


Figura 5: Curvas J-V con luz para los escenarios 5 y 6.

Para la ASTOK, en cambio, se observan algunas desviaciones, tomando como referencia el modelo de SRH, cerca del punto de máxima potencia FF (fill factor). Esta diferencia se debe a que esta aproximación subestima la recombinación para tensiones cercanas a la correspondiente al FF, como muestra la Figura 6.

Curiosamente para tensiones inversas y a oscuras, la aproximación AST sigue de muy cerca a la curva SRH a pesar de que fue definida para evaluar la recombinación y el atrapamiento cuando un dispositivo es sometido a tensiones directas. En cambio la aproximación ASTOK muestra desviaciones importantes.

En las figuras 7 y 8 se puede observar que, en tensiones directas, las curvas predichas por el modelo de SRH y por la AST tampoco presentan diferencias ante la variación del gap y del espesor de la capa intrínseca. Al mismo tiempo, la ASTOK muestra algunas desviaciones respecto de la estadística de SRH en tensiones directas altas a oscuras; como así también, cerca de la zona de máxima potencia y a tensiones directas altas, bajo iluminación.

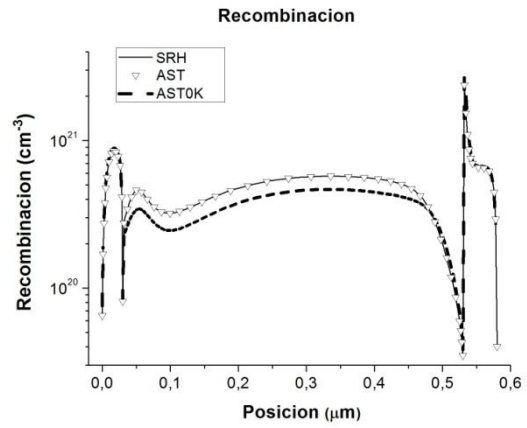


Figura 6: Velocidad de recombinación para el escenario 5 bajo iluminación AM1.5 con tensión directa de 0.6 V.

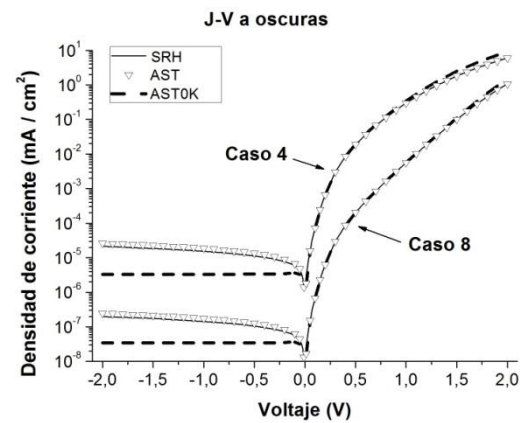


Figura 7: Curvas J-V a oscuras para los escenarios 4 y 8.

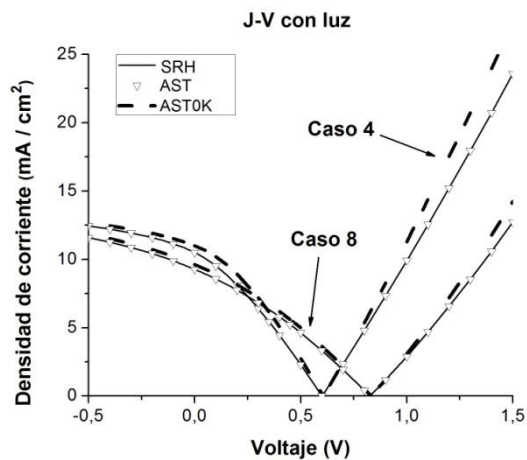


Figura 8: Curvas J-V con luz para los escenarios 4 y 8.

Para tensiones inversas, el comportamiento es similar al de los escenarios 5 y 6: la curva de la AST se “despega” de la curva de SRH, pero sigue la misma tendencia; mientras que la ASTOK presenta desviaciones importantes.

Para los demás escenarios no se observaron desviaciones significativas o el comportamientos de las aproximaciones es semejantes a los aquí expuestos.

Las respuestas espectrales (SR) evaluadas con SRH y con las aproximaciones resultaron muy similares.

Sorprendentemente la aproximación AST0K nos brinda buenos resultados en algunas de las condiciones estudiadas, a pesar de que en todos los escenarios presentados las pendientes de las colas ( $E_D$  y  $E_A$ ) son mayores a  $2KT$ , lo cual, a priori, sugiere incurrir en errores considerables<sup>4</sup>.

## V. CONCLUSIONES

En condiciones de oscuridad para tensiones inversas observamos que la aproximación de Simmon-Taylor arroja diferencias en relación al modelo de SRH, pero reproduce la forma de la curva J-V, mientras que la de OK muestra desviaciones considerables. Para tensiones directas la primera aproximación se ajusta casi perfectamente al modelo tomado como referencia en los distintos escenarios, incluso en tensiones bajas, donde se considera podría mostrar diferencias más marcadas<sup>4</sup>. Esto indica que su utilización no introduciría errores significativos en los cálculos.

Bajo condiciones de iluminación la aproximación Simmon-Taylor también se ajusta casi perfectamente al modelo de SRH para todo el rango de tensiones,

mientras que la aproximación OK muestra algunas desviaciones en tensiones directas debido los errores en la predicción en la recombinación.

En consecuencia, gracias a las simplificaciones algebraicas introducidas por la aproximación OK, sería razonable su inclusión en ocasiones en que, trabajando con tensiones directas, no se necesite resultados tan exactos y no se cuente con gran capacidad de cálculo para evaluar el rendimiento y la SR de celdas solares de film delgado, cuando la densidad de estados se asume uniforme dentro de las capas del dispositivo.

## Referencias

- 1 - Neaman, D.A. Semiconductor Physics and Devices, IRWIN, Burr Ridge, Illinois, USA, (1992).
- 2 - Simmons, J.G., G.W. Taylor, Physical Review B, 4, 502 (1971).
- 3 - Klimovsky, E., A. Sturiale, F.A. Rubinelli, Thin Solid Films 515, 4826-4833, (2007).
- 4 - Willemen, J.A., "Modelling of Amorphous Silicon Single- and Multi-Junction Solar Cells", Tesis de Doctorado, Technische Universiteit Delft, (1998).