

# ESTUDIO DE LA MOVILIDAD DRIFT EN CELDAS SOLARES DE a-Si:H MEDIANTE SIMULACIÓN NUMÉRICA

## STUDY OF THE DRIFT MOBILITY IN a-Si:H SOLAR CELLS WITH NUMERICAL SIMULATIONS

**H. Ramírez, M. de Greef, And 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: hramirezj@santafe-conicet.gov.ar

Recibido 30/03/2012; aprobado 05/12/2012

En este trabajo se evalúan sistemáticamente por medio de simulaciones numéricas las movilidades *drift* en junturas de a-Si:H de simple inyección del tipo m-i-m, donde [m] significa metal. Los valores obtenidos son comparados con los medidos. Se usan como datos de partida los parámetros eléctricos, en particular las movilidades de *scattering* resultantes de ajustes previos de curvas experimentales corriente tensión (J-V) y de respuesta espectral (SR) de junturas p-i-n de a-Si:H. Las simulaciones son realizadas con el código numérico D-AMPS, al cual se le incorporaron varias opciones para poder evaluar la movilidad *drift* teniendo en cuenta el atrapamiento de electrones y huecos en los estados de las colas exponenciales y en los profundos, o bien sólo en las colas exponenciales. Para ambos escenarios fue incorporada una opción que permite incluir en el cálculo de la carga atrapada sólo los niveles de energía de la banda prohibida donde el proceso de atrapamiento y reemisión de los portadores es compatible con los tiempos del experimento.

Palabras Claves: Movilidad drift, Silicio amorfo, Celdas solares

In this paper the drift mobilities in single m-i-m (where m stands for metal) injection structures of a-Si:H are systematically evaluated using numerical simulations. The resulting values are compared with the measured ones. The electrical parameters, in particular the scattering mobilities, resulting of previous fitting of experimental current-voltage (J-V) curves and spectral responses (SR) of a-Si:H based p-i-n structures are used as input data. The simulations were performed with the computer code D-AMPS to which several new options were incorporated in order to evaluate the drift mobility. These new options take into account either the trapping of electrons and holes at exponential band tail and deep states, or only at exponential band tail states. For both scenarios a new option was incorporated that allows the calculation of the trapped charge only at the energy levels of the band gap where trapping and re-emission processes of electrons and holes are compatible with the experimental times.

Key Word: Drift mobility, Amorphous silicon, Solar cells

### I. INTRODUCCIÓN

El transporte eléctrico y el rendimiento de las celdas solares de silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) es muy sensible al valor de las movilidades de los portadores libres, en especial a la de los huecos ya que la magnitud de su movilidad es menor que la de los electrones. Los valores de la movilidad eléctrica y la influencia de los defectos profundos sobre las mismas, han sido temas de gran controversia en la investigación de las propiedades electrónicas de este material. En semiconductores desordenados la técnica más usada para la determinación experimental de las movilidades de portadores libres es la del *tiempo de vuelo* (TOF) o *fotoconductividad transitoria*<sup>(1-8)</sup>. El transporte de portadores en estados extendidos está limitado por el *atrapamiento* y la posterior *re-emisión* (*atrapamiento múltiple*) desde los estados localizados hacia las bandas. Las movilidades medidas con TOF se conocen con el término de *movilidades efectivas de arrastre* o *movilidades drift*. Las múltiples trampas que contienen los semiconductores desordenados afectan el tiempo de tránsito de los portadores libres, es decir, el tiempo en completar el recorrido entre los contactos del dispositivo.

La movilidad *drift* se denomina efectiva porque es función del tiempo en que los portadores permanecen en las trampas durante su trayectoria a lo largo del semiconductor<sup>(9)</sup>. Cuanto más profunda es la trampa, más tiempo precisa el portador para regresar a la banda de estados extendidos y sumarse a la corriente. Los códigos numéricos utilizados para simular celdas solares no emplean como datos de ingreso las movilidades de portadores medidas o *drift* sino las de *scattering* o de estados extendidos, que no tienen en cuenta el atrapamiento de portadores y su posterior re-emisión.

Las relaciones entre las movilidades *drift* y de estados extendidos para electrones y huecos vienen dadas por las siguientes expresiones<sup>(1,7)</sup>, respectivamente:

$$\mu_{d_n} = \mu_{n_0} \frac{n}{n+n_T} \quad (1)$$

$$\mu_{d_p} = \mu_{p_0} \frac{p}{p+p_T} \quad (2)$$

donde  $\mu_{d_n}$  y  $\mu_{d_p}$  son las movilidades *drift* para electrones y huecos;  $\mu_{n_0}$  y  $\mu_{p_0}$  son las movilidades para electrones y huecos libres (o de estados extendidos);  $n$  y  $p$  son las concentraciones de electrones y huecos libres; y

$n_T$  y  $p_T$  son las concentraciones de electrones y huecos atrapados.

Las eficiencias de conversión de las celdas solares de semiconductores desordenados se ven limitadas por la gran cantidad de estados presentes dentro de la banda prohibida. Los defectos inherentes a la estructura desordenada del a-Si:H deterioran sus propiedades electrónicas magnificando la carga atrapada, que a su vez deteriora el campo eléctrico en las zonas intrínsecas de colección de portadores foto-generados y aumenta la recombinación de los pares electrón-hueco.

A los efectos de investigar la intrincada relación existente entre las eficiencias de conversión de las celdas solares y las movilidades experimentales de los portadores libres, hemos incorporado al código D-AMPS (*New Developments* □ *Analysis of Microelectronic and Photonic Structures*) varias opciones que permiten evaluar la movilidad *drift*, donde se tiene en cuenta el atrapamiento de electrones y huecos en todos los estados localizados del gap, o bien sólo en las colas exponenciales, para poder analizar el impacto de los estados profundos sobre los valores de las movilidades *drift*.

Con D-AMPS estudiamos el efecto que algunos de los parámetros eléctricos utilizados, tienen sobre los valores de las movilidades *drift*. Estos son: las energías características o pendientes de las colas exponenciales, las densidades de estado en las gaussianas y las frecuencias de escape o de fonones; además de parámetros experimentales como el tiempo de tránsito.

## II. METODOLOGÍA

En las simulaciones usamos como datos de partida las movilidades de *scattering* resultantes de ajustes previos de curvas experimentales corriente tensión (J-V) bajo iluminación y a oscuras realizadas en junturas p-i-n de a-Si:H obtenidas por E. Klimovsky et al<sup>(10)</sup> (ver Tabla 1).

La densidad de estados descripta para el a-SiH es considerada uniforme a lo largo del dispositivo. Los estados más profundos son modelados con distribuciones Gaussianas y los menos profundos mediante colas exponenciales.

Las opciones implementadas para evaluar las movilidades *drift* se identifican con dos índices: el primero define las concentraciones de electrones y huecos atrapados que son considerados en el cálculo. Las cargas atrapadas presentes (ver ec.(1-2)) pueden evaluarse siguiendo varios criterios: considerando la carga atrapada total en todos los estados localizados del gap (opción 1), la alojada entre los bordes de banda y los quasi-niveles de Fermi de portadores atrapados (opción 2) o bien las presentes en los estados localizados que van desde los bordes de las bandas de conducción (BC) y de valencia (BV) hasta los llamados niveles de demarcación  $E_{DLE}$  y  $E_{DLH}$ , (definidos en las ecuaciones (5,6)), mediante los tiempos  $t_{EM}$  y  $t_{HM}$  que el experimento TOF les fija como tiempos máximos a los electrones y huecos, para ser re-emitidos a sus respectivas bandas (opción 3)<sup>(9)</sup>. Las primeras dos opciones tienden a sub-estimar en exceso las movilidades *drift* mientras que la última permite una conexión entre el formalismo de estado

estacionario de D-AMPS y el carácter transitorio de los experimentos de TOF. Un portador atrapado en algún estado del gap con un nivel de energía  $E$  necesita un tiempo  $t_E(E)$  ó  $t_H(E)$ , para ser re-emitido a la BC en el caso de los electrones, o a la BV para los huecos, dados por las siguientes expresiones<sup>(11)</sup>:

$$t_E(E) = \left( \frac{1}{N_C v_{th} \sigma_N} \right) \exp\left( \frac{E_C - E}{kT} \right) \quad (3)$$

$$t_H(E) = \left( \frac{1}{N_V v_{th} \sigma_P} \right) \exp\left( \frac{E - E_V}{kT} \right) \quad (4)$$

Las energías  $E$  de las trampas en las que los electrones y los huecos se encuentran a los tiempos  $t_E(E)$ ,  $t_H(E)$  pueden derivarse de las ecuaciones anteriores. Para el caso particular en que  $t_E(E) = t_{EM}$  ó,  $t_H(E) = t_{HM}$  podemos escribir que:

$$E = E_C - kT \ln[N_C v_{th} \sigma_N t_E(E)] = E_{DLE} \quad (5)$$

$$E = E_V + kT \ln[N_V v_{th} \sigma_P t_H(E)] = E_{DLH} \quad (6)$$

donde  $E_C$  y  $E_V$  son los bordes de la BC y BV;  $N_C$ ,  $N_V$  son las densidad efectivas de estados en las BC y BV;  $v_{th}$  es la velocidad térmica; y  $\sigma_N$  y  $\sigma_P$  son las secciones eficaces de captura para electrones y huecos, respectivamente.

Los estados en el gap con energías  $E_C \leq E \leq E_{DLE}$  tendrán tiempo suficiente para re-emitir el electrón a la BC, mientras que los estados en el gap con energías  $E_{DLE} < E < E_V$  no tendrán suficiente tiempo. De forma similar, los estados en el gap con energías  $E_C > E > E_{DLH}$  no tendrán tiempo de re-emitir el hueco a la BV, mientras que los estados del gap con energías  $E_V \leq E \leq E_{DLH}$  tendrán suficiente tiempo.

La opción 4 permite definir los niveles de demarcación de manera compacta para electrones y huecos, como:

$$E_{DLE} = kT \ln(\omega_E t_{EM}) \quad (7)$$

$$E_{DLH} = kT \ln(\omega_H t_{HM}) \quad (8)$$

a través de los parámetros  $\omega_E$  y  $\omega_H$  que son del orden de la frecuencia del fonón en  $s^{-1}$ ;  $t_{EM}$  y  $t_{HM}$  son los tiempos (en s) en que se realizan las mediciones de las movilidades *drift*. Hay que tener en cuenta que la medición para los electrones que interactúan con los estados aceptores y para los huecos que interactúan con los estados donores, se realizan en forma separada sobre muestras diferentes.

En la opción 3 los valores para las frecuencias  $\omega_E$  y  $\omega_H$ , vienen determinados por las siguientes expresiones:

$$\omega_E = N_C v_{th} \sigma_N \quad (9)$$

$$\omega_H = N_V v_{th} \sigma_P \quad (10)$$

Asumimos que los estados en las colas decrecen exponencialmente en densidad desde el borde de movilidad para electrones y huecos, con la forma:

$$g_A(E) = G_{A0} \exp\left( \frac{-E}{E_A} \right) \quad (11)$$

$$g_D(E) = G_{D0} \exp\left( -\frac{E}{E_D} \right) \quad (12)$$

donde  $E_A$  y  $E_D$  son las pendientes o anchos de las colas de conducción y valencia, respectivamente;  $G_{A0}$  y  $G_{D0}$  son asumidos de  $1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-3}$ . Las energías  $E$  se asumen positivas desde el borde de banda hacia el interior del gap.

Para el primer índice presentamos los resultados de las opciones (3 y 4) (ver Tablas 2 y 3). El tiempo de tránsito es un parámetro de entrada de D-AMPS en ambas opciones, mientras que las frecuencias  $\omega_E$  y  $\omega_H$  solo pueden ingresarse como parámetros extras en la opción (4).

El segundo índice permite incluir (0) o no (1) los portadores atrapados en los estados más profundos representados con Gaussianas para el cálculo de la carga atrapada. Las movilidades *drift* de electrones (huecos) fueron evaluadas en dispositivos de simple inyección utilizados en los experimentos de TOF del tipo m-i-m, donde  $\square$  se refiere a un metal que establece un contacto no-ohmico<sup>(12)</sup>.

TABLA 1: LISTA DE PARÁMETROS DE ENTRADA<sup>(10)</sup>

Parámetros	(i) a-Si	Descripción
$E_G$ (eV)	1.72	Energía del gap
$N_c, N_v$ (cm <sup>-3</sup> )	$2.0 \times 10^{20}$	Densidad efectiva de estados en la banda de conducción y valencia, respectivamente
$\mu_{n0}$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	20	Movilidad de los electrones
$\mu_{p0}$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	3.5	Movilidad de los huecos
$E_D$ (meV)	50	Pendiente de la cola de valencia
$E_A$ (meV)	30	Pendiente de la cola de conducción
$D^-, D^+$ (cm <sup>2</sup> )	$2.0 \times 10^{15}$	Densidad de estados en las gaussianas con estados de carga -, +.
$D^0$ (cm <sup>2</sup> )	$1.0 \times 10^{15}$	Densidad de estados en la gaussiana con estado de carga 0.
$\sigma_N, \sigma_P$ (cm <sup>2</sup> )	$2.0 \times 10^{-16}$	Secciones eficaces de captura para electrones y huecos en los estados de las colas

### III. RESULTADOS

Para definir un valor inicial de los niveles  $E_{DLE}$  y  $E_{DLH}$ , consideramos los tiempos de tránsito  $t_{EM} = 1.6 \times 10^{-7}$  s y  $t_{HM} = 2.0 \times 10^{-5}$  s de acuerdo a lo reportado por T. Tiedje<sup>(7)</sup>. Para las opciones 40 y 41, fijamos los valores de  $\omega_E$  y  $\omega_H$  en  $4 \times 10^{11}$  s<sup>-1</sup> (ver ec. (9-10)).

Utilizamos como referencia para la movilidad *drift* un valor de  $\sim 1.2$  cm<sup>2</sup>V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup> para electrones y  $(1-3) \times 10^{-3}$  cm<sup>2</sup>V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup> para los huecos<sup>(7,8)</sup>. En las simulaciones obtuvimos una movilidad *drift* que sobreestima los valores de referencia, cuando se incluyen o no los estados más profundos. Sólo al considerar tiempos de tránsito mayores, los valores de la movilidad *drift* resultaron próximos al de la referencia (ver Tabla 2 y 3).

### IV. DISCUSIÓN

#### Movilidad drift de los electrones

##### Influencia de los tiempos de tránsito

En los experimentos de TOF, los electrones son inyectados dentro de la BC mediante un corto flash de luz. Dichos portadores decaen rápidamente al fondo de la BC, donde pueden ser capturados por los estados de la cola o por los más profundos.

En algún tiempo  $t_E(E)$ , en los estados para los cuales  $E_{DLE} < E$  (las energías se miden desde los bordes de banda hacia el interior del gap) los electrones no son re-emitidos, ya que su tiempo medio para la emisión térmica es mucho mayor que  $t_{EM}$ . Mientras que en los estados más superficiales para los cuales  $E \leq E_{DLE}$  los

electrones experimentan en promedio muchos eventos de termalización-emisión-captura.

Para tiempos  $t_{EM}$  cortos, el nivel de energía  $E_{DLE}$  está más próximo al borde de la banda de conducción y los electrones que son térmicamente re-emitidos a la banda son arrastrados por el campo, razón por la cual los valores medidos correspondientes a la movilidad *drift* son mayores. Asimismo, si el tiempo  $t_{EM}$  es mayor, el nivel  $E_{DLE}$  se alejará cada vez más del borde de la BC correspondiendo a los niveles de los estados más profundos, de las colas o de las Gaussianas, donde los electrones requerirán de un tiempo mayor para ser re-emitidos a la banda y ser arrastrados por el campo, dando como resultado una notable disminución en los valores de la movilidad *drift* medidos (ver Fig. 1).

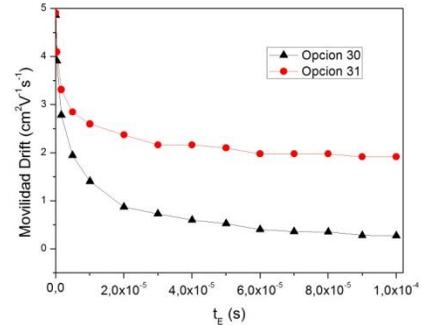


Figura 1: Dependencia de la movilidad drift de los electrones con el tiempo de tránsito  $t_E$ . En el cálculo se consideran las cargas atrapadas presentes en los estados localizados desde  $E_C$  hasta el nivel de demarcación  $E_{DLE}$  (ver ec. 5). Opción 30: incluye las concentraciones de electrones atrapados en los estados más profundos. Opción 31: incluye sólo las concentraciones de electrones atrapados en la cola aceptora.

TABLA 2: MOVILIDAD DRIFT DE ELECTRONES OBTENIDA A DIFERENTES TIEMPOS

$t_E$ (s)	Opción	$\mu_{dn}$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )
$1.6 \times 10^{-7}$	30	4.41
	31	4.48
	40	4.44
	41	4.48
$1.0 \times 10^{-5}$	30	1.40
	31	2.60
	40	1.82
	41	2.60
$1.0 \times 10^{-4}$	30	0.27
	31	1.92
	40	0.51
	41	1.92

##### Influencia de $E_A$ y $G_{AO}$

Los eventos de atrapamiento reducen la movilidad efectiva de los portadores, ya que los mismos permanecen relativamente poco tiempo en los estados de las bandas, donde son móviles, y la mayor parte del tiempo en las trampas, donde están inmóviles<sup>(13)</sup>.

En la ec. (11) se observa que a medida que el valor  $E_A$  disminuye, la función que define la cola exponencial, se vuelve más abrupta. Mientras más pequeño sea este valor, la cola estará más próxima al borde de la BC y la movilidad *drift* aumentará rápidamente, aproximándose cada vez más a la movilidad de la banda. De hecho, dado el caso en que la pendiente  $E_A$  sea 0eV, la movilidad *drift*

será la de la banda,  $\mu_{d_n} = \mu_{n_0}$  cuando se desprecian los estados profundos. Por otra parte, si  $E_A$  va incrementando, la movilidad *drift* disminuye.

A medida que  $G_{AO}$  es reducido, la movilidad *drift* de los electrones aumenta, mientras que el aumento en el valor de dicho prefactor, producirá una disminución de manera exponencial en la movilidad *drift* de los electrones (ver Fig. 2).

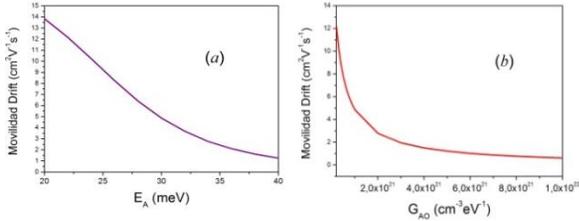


Figura 2: (a) Influencia de  $E_A$  y (b)  $G_{AO}$  en la movilidad *drift* de los electrones.

### Influencia de la densidad de estados profundos

Para explorar el impacto que tienen la densidad de estados profundos sobre la movilidad *drift* definimos el nivel  $E_{DLE}$  con  $t_E = 1.6 \times 10^{-7} s$  y  $\omega_E = 4 \times 10^{11} s^{-1}$ , y usamos la opción 40. En la Fig. 3 podemos observar que debido a los estados localizados en las gaussianas aceptoras, el atrapamiento de electrones en dichos estados provoca una disminución en la movilidad *drift* de los electrones.

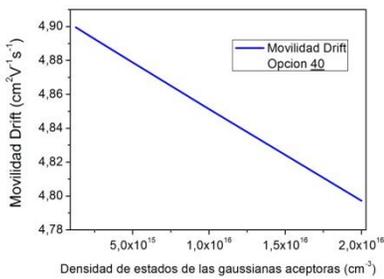


Figura 3: Influencia de la densidad de estados profundos de las gaussianas aceptoras en la movilidad *drift* de los electrones. El nivel  $E_{DLE}$  es definido con  $\omega_E = 4 \times 10^{11} s^{-1}$  y  $t_E = 1.6 \times 10^{-7} s$  (ver ec. 7).

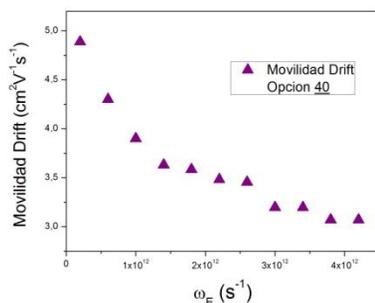


Figura 4: Efecto de la frecuencia de escape en la movilidad *drift* de los electrones. El nivel  $E_{DLE}$  es definido con  $t_E = 1.6 \times 10^{-7} s$  y  $\omega_E$  variable.

### Influencia de la frecuencia de escape

El valor de la frecuencia de escape tiene un efecto notable sobre la movilidad *drift* (ver Fig. 4). Cuando consideramos altos valores de frecuencia, la movilidad *drift* disminuye debido a que los electrones estarán

interactuando con los estados más profundos del gap. Mientras mayor profundidad alcance dicho portador, su movilidad se verá cada vez más limitada por la cantidad de defectos localizados en el gap.

### Movilidad drift de los huecos

Debido a que el a-Si:H es ligeramente tipo *n*-, introdujimos un dopaje de tipo aceptor leve en la capa intrínseca a los efectos de tener en esta capa la misma energía de activación para los huecos que para los electrones. De esta manera logramos que la tensión aplicada se distribuya uniformemente sobre capa intrínseca del dispositivo.

TABLA 3: MOVILIDAD DRIFT DE HUECOS OBTENIDA A DIFERENTES TIEMPOS

$t_H$ (s)	Opción	$\mu_{d_p}$ ( $cm^2V^{-1}s^{-1}$ )
$2.0 \times 10^{-5}$	<u>30</u>	$6.14 \times 10^{-3}$
	<u>31</u>	$6.21 \times 10^{-3}$
	<u>40</u>	$6.18 \times 10^{-3}$
	<u>41</u>	$6.21 \times 10^{-3}$
$1.0 \times 10^{-4}$	<u>30</u>	$2.89 \times 10^{-3}$
	<u>31</u>	$2.99 \times 10^{-3}$
	<u>40</u>	$2.93 \times 10^{-3}$
	<u>41</u>	$2.99 \times 10^{-3}$
$1.0 \times 10^{-3}$	<u>30</u>	$1.02 \times 10^{-3}$
	<u>31</u>	$1.12 \times 10^{-3}$
	<u>40</u>	$1.05 \times 10^{-3}$
	<u>41</u>	$1.12 \times 10^{-3}$

### Influencia de los tiempos de tránsito

Los huecos generados por el flujo de fotones incidente decaen rápidamente al borde de la BV. Los estados localizados en la cola y en las Gaussianas donoras, capturan e inmovilizan los huecos. Éstos permanecen allí hasta que son re-excitados térmicamente dentro de la banda, lo que conduce a una reducción en la movilidad de los huecos.

De acuerdo a la forma en que definimos el nivel de energía  $E_{DLH}$  (ver ec. (6)), hay un acercamiento de éste a la BV para tiempos  $t_{HM}$  más pequeños, y un alejamiento para  $t_{HM}$  mayores, con lo cual se involucran más los niveles de los estados más profundos, donde los huecos permanecen un mayor tiempo en las trampas disminuyendo el valor de la movilidad *drift*.

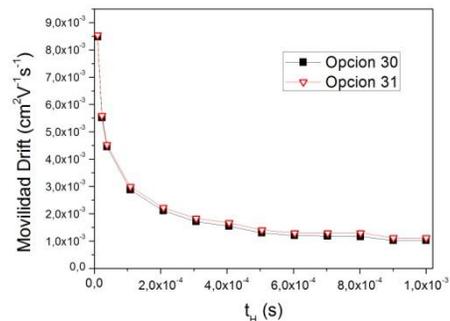


Figura 5: Dependencia de la movilidad *drift* de los huecos con el tiempo de tránsito  $t_H$ . En el cálculo se consideran las cargas atrapadas presentes en los estados localizados desde  $B_V$  hasta el nivel de demarcación  $E_{DLH}$  (ver ec. 6). Opción 30: incluye las concentraciones de huecos atrapados en los estados más profundos. Opción 31: incluye sólo las concentraciones de huecos atrapados en la cola donora.

Cuando incluimos sólo los estados de la cola donora en el cálculo de la movilidad *drift* (ver Fig. 5), observamos que no hay una diferencia significativa con los valores que obtuvimos al tener en cuenta los niveles más profundos. Esto podría deberse a que la cola de valencia es tan ancha que enmascararía la contribución de los estados de la Gaussianas donoras, y por ende la carga atrapada en ambos casos tienen un valor similar.

### Influencia de $E_D$ y $G_{DO}$

La dependencia hallada con respecto  $E_D$  y  $G_{DO}$  es análoga al caso de los electrones. A medida que la cola de la banda de valencia es reducida, la movilidad *drift* del hueco aumenta. Las movilidades *drift* de los huecos a temperatura ambiente, estarán aproximadamente entre  $(1-3) \times 10^{-3} \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$  para tensiones entre 1-4 V. Experimentalmente, la pendiente de banda típica está en el rango de 45-50 meV <sup>(7-8,13)</sup>. En nuestro caso, para el valor inicial de referencia  $E_D = 50 \text{meV}$ , obtuvimos una movilidad *drift* de  $6.18 \times 10^{-3} \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ . Al aumentar el valor de la pendiente de la cola, logramos una notable disminución en la movilidad *drift*. En el caso del  $G_{DO}$  obtuvimos también una importante disminución de la movilidad *drift* al incrementar su valor.

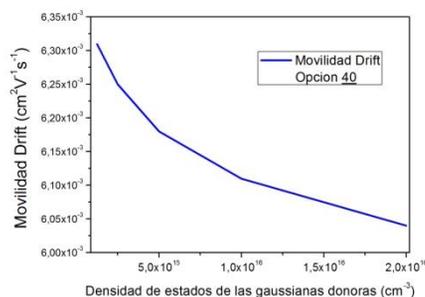


Figura 6: Influencia de la densidad de estados profundos de las gaussianas donoras en la movilidad *drift* de los huecos. El nivel  $E_{DLH}$  es definido con  $\omega_H = 4 \times 10^{11} \text{s}^{-1}$  y  $t_E = 2.0 \times 10^{-5} \text{s}$  (ver ec. 8).

### Influencia de la densidad de estados profundos

Hay una leve influencia de las Gaussianas donoras en la movilidad *drift* de los huecos (ver Fig. 6). No obstante, ya que la cola de la banda de valencia es más ancha que la de conducción, el efecto que tienen dichos estados no resulta muy significativo para la movilidad.

Una quinta opción que hemos incorporado muy recientemente a D-AMPS introduce el concepto de una energía de activación de Meyer-Neldel según la última contribución de Schiff<sup>(14)</sup>. Resultados preliminares indican que esta nueva opción nos permite obtener los valores de movilidades *drift* reportados sin necesidad de utilizar tiempos de tránsitos elevados.

## V. CONCLUSIONES

En nuestro código D-AMPS de simulaciones numéricas de dispositivos, hemos incorporado varias opciones que nos permiten evaluar las movilidades *drift* de acuerdo a un modelo de atrapamiento múltiple que describe el transporte de portadores desde los estados localizados hacia las bandas.

El estudio sistemático de los diversos parámetros que afectan los valores de las movilidades *drift* en junturas de a-Si:H de simple inyección *m-i-m*, nos ha permitido entender más ampliamente la influencia que los estados localizados tienen en el proceso de transporte eléctrico en semiconductores desordenados. Esto nos ha llevado a cuestionar el hecho de que en muchas publicaciones de experimentalistas se desprecie el impacto de los estados profundos sobre los valores de las movilidades *drift*. De acuerdo a los resultados obtenidos en las simulaciones consideramos que se deben tener en cuenta los estados más profundos, al menos en el caso de los electrones (ver Fig. 1) donde observamos diferencias significativas en los valores de las movilidades al incluir o no los niveles más profundos.

Con los parámetros adoptados, el código D-AMPS tiende a sobreestimar las movilidades experimentales *drift* para los tiempos de medición empleados en la técnica TOF. Sólo al considerar tiempos de tránsito mayores, los valores de la movilidad *drift* resultaron próximos a los reportados en mediciones de TOF. Por ello hemos implementado recientemente una quinta opción para evaluar las movilidades *drift* mediante la introducción del concepto de una energía de activación de Meyer-Neldel, que nos permitirá que trampas más profundas participen de la re-emisión de portadores en tiempo para formar parte de la corriente medida y, así elevar las concentraciones de portadores atrapados y disminuir los valores obtenidos para las movilidades *drift* más próximos a los experimentales. Nuestros resultados serán publicados en futuras contribuciones.

## Referencias

- 1 □ J.M. Marshall, Rep. Prog. Phys., **46**, 1235, (1983)
- 2 □ A. Werner and M. Kunst, Physical Review B, **36**, 7567, (1987)
- 3 □ R.A. Street, J. Kakalios, and M. Hack, Physical Review B, **38**, 5603, (1988)
- 4 □ J. Liang and E.A. Schiff, Appl. Phys. Lett. **88**, 063512 (2006)
- 5 □ Qi. Wang, Homer Antoniadis, E.A Schiff and S. Guha, Physical Review B, **47**, 9435, (1993)
- 6 □ S. Dinca, G. Ganguly, Z. Lu, E.A. Schiff, V. Vlahos, C.R. Wronski, Q. Yuan, Mat. Res. Symp. Proc. **762**, A7.1.1, (2003)
- 7 □ T. Tiedje, Semiconductors and Semimetals, **21**, C, 207, (1984)
- 8 □ R.A. Street, J. Zesch, and M.J. Thompson, Appl. Phys. Lett. **43**, 672, (1983)
- 9 □ R.A. Street, Hydrogenated Amorphous Silicon, Cambridge University Press, (1991)
- 10 □ E. Klimovsky, A. Sturiale, F.A. Rubinelli, Thin Solid Films, **515**, 4826, (2007)
- 11 □ J.A. Willems, Modelling of Amorphous Silicon Single- and Multijunction Solar Cells, Technische Universiteit Delft, Ph.D Thesis, (1998).
- 12 □ H. Antoniadis and E.A. Schiff, Physical Review B, **46**, 9482, (1992)
- 13 □ E.A. Schiff, Solar Energy Materials & Solar Cells, **78**, 567, (2003)
- 14 □ E.A. Schiff, Philosophical Magazine, **89**, 2505, (2009)