

MODELO NUMERICO PARA DESCRIBIR LA INCIDENCIA DEL ISOPROTERENOL EN LA FOSFORILACION DE UNA PROTEINA INVOLUCRADA EN LA REGULACION DE LA CONTRACCION CARDIACA.

D.G. Renzi^{1,2}, S.E. Rodríguez², A. Mattiazzi³, F. Vericat^{1,2,*}

¹Area Física, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario

²Grupo de Aplicaciones Matemáticas y Estadísticas de la Facultad de Ingeniería (GAMEFI), Universidad Nacional de La Plata

³Centro de Investigaciones Cardiovasculares, Facultad de Ciencias Médicas, Universidad Nacional de La Plata.

vericat@ifysib.unlp.edu.ar

En este trabajo presentamos un modelo teórico que ayuda a sostener una hipótesis acerca de la influencia de la droga estimulante isoproterenol sobre la relajación y contracción cardíaca. Nuestros resultados indican que el isoproterenol no sólo participa favoreciendo la fosforilación, sino que además reduce la actividad de la proteína que cataliza la desfosforilación del fosfolambán.

El fosfolambán es una proteína localizada en el retículo sarcoplasmático cardíaco que participa de forma esencial en la regulación de la contracción y relajación cardíaca. Esta proteína incorpora, en condiciones adecuadas, ³²P induciendo variaciones en la relajación y contracción del músculo cardíaco^(1,2).

Experimentos *in vitro* indican que la proteína kinasa A (PKA) cataliza la fosforilación del fosfolambán mientras que la proteína fosfatasa (PP1) favorece la desfosforilación. Se ha conjeturado que la presencia de la droga estimulante isoproterenol (Iso) aumentaría la actividad k_1 de la PKA como fosforilante al tiempo que disminuiría la actividad k_2 de la fosfatasa PP1 como desfosforilante.

Debido a las dificultades para diseñar experimentos en los cuales las dos actividades estén controladas, consideramos conveniente realizar un modelo matemático simple que permite, mediante un algoritmo adecuado, predecir el comportamiento de las actividades k_1 y k_2 en función de la concentración de isoproterenol, de manera de reproducir los datos experimentales disponibles.

En nuestro modelo, aquellos sitios en el fosfolambán capaces de incorporar ³²P son designados como 1, 2, ...N, donde N es número de tales sitios. Al sitio s (donde s indica genéricamente cualquiera de los sitios 1, 2, ...N) asociamos un número de ocupación $q(s)$ tal que:

$$q(s) = \begin{cases} 1 & \text{si el sitio está fosforilado.} \\ 0 & \text{si el sitio no está fosforilado.} \end{cases}$$

Consideramos que, inicialmente, todos los sitios están vacíos, esto es, $q(s) = 0$ para $s = 1, 2, \dots, N$.

Supongamos, por el momento, que las actividades k_1 y k_2 son funciones conocidas de la concentración de isoproterenol $[Iso]$, es decir, $k_1 = k_1([Iso])$ y $k_2 = k_2([Iso])$. Entonces, para un dado valor de $[Iso]_\alpha$ y por tanto de las correspondientes actividades $k_1([Iso]_\alpha)$ y $k_2([Iso]_\alpha)$, tomamos de a un sitio por vez y procedemos como sigue: elegimos primeramente al azar un número n_s perteneciente al intervalo $[0, 1]$. Luego, si $n_s > k_1([Iso]_\alpha)$, dejamos $q(s) = 0$, pero si $n_s \leq k_1([Iso]_\alpha)$, entonces hacemos $q(s) = 1$. En este último caso elegimos un

segundo número aleatorio n_s' también en el intervalo $[0, 1]$. Ahora, si $n_s' > k_2([Iso]_\alpha)$ entonces dejamos que el sitio siga fosforilado ($q(s) = 1$), pero si $n_s' \leq k_2([Iso]_\alpha)$ entonces lo desfosforilamos ($q(s) = 0$). En la Figura 1 mostramos el diagrama de flujo del algoritmo. Repetimos M veces este proceso y obtenemos un número medio de sitios fosforilados $\langle P([Iso]_\alpha) \rangle$.

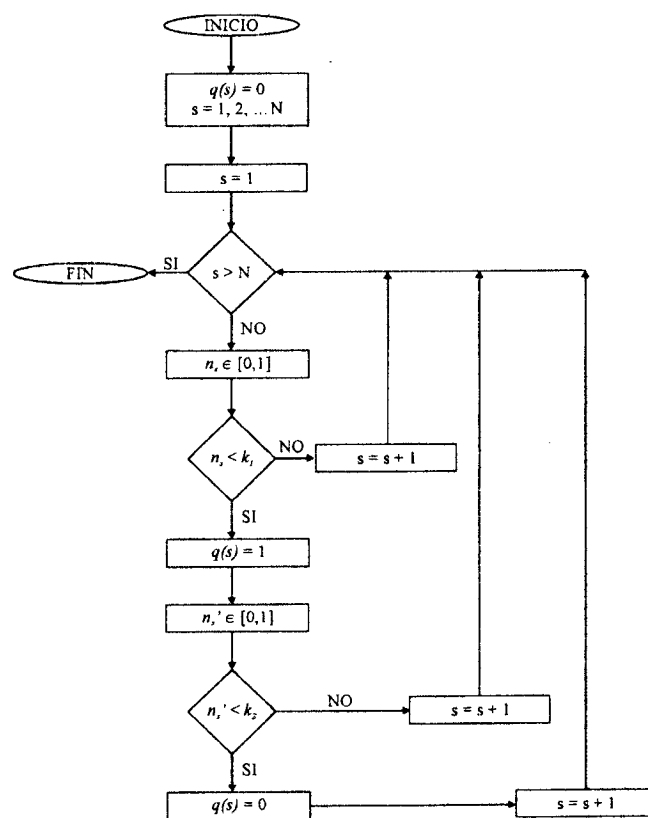


Figura 1: Diagrama de flujo del algoritmo.

El porcentaje total de sitios fosforilados para esa concentración de isoproterenol vendrá dada entonces por la siguiente expresión:

$$\langle P([Iso]_{\alpha}) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \left(\frac{100}{N} \sum_{s=1}^N q(s) \right) \quad (1)$$

Repetiendo este procedimiento para diferentes concentraciones de isoproterenol obtenemos una curva que representa la cantidad de sitios que contienen ^{32}P a aquellas concentraciones de isoproterenol.

El problema que resta es determinar $k_1([Iso])$ y $k_2([Iso])$. La determinación de $k_1([Iso])$ se ve facilitada por el hecho de que puede lograrse experimentalmente la inhibición completa de la fosfatasa PP1 como desfosforilante agregando ácido okádico (AO)⁽¹⁾. En nuestro modelo, esta condición se consigue haciendo $k_2([Iso]) \equiv 0$. En ese caso podemos fácilmente encontrar una curva que represente a $k_1([Iso])$ y que ajuste adecuadamente los datos experimentales. El mejor ajuste que encontramos de esta manera fue para una función de la forma:

$$k_1([Iso]) = 1 - 0.42 \exp(-0.11[Iso]) \quad (2)$$

En las Figuras 2 y 3, la línea superior corresponde al porcentaje de ^{32}P incorporado por el fosfolambán en función de la concentración de isoproterenol, como se obtiene del algoritmo descrito anteriormente, cuando usamos para $k_1([Iso])$ la ecuación (2) y $k_2([Iso]) \equiv 0$. Los círculos llenos, por su parte, indican los correspondientes valores experimentales obtenidos cuando está presente el AO.

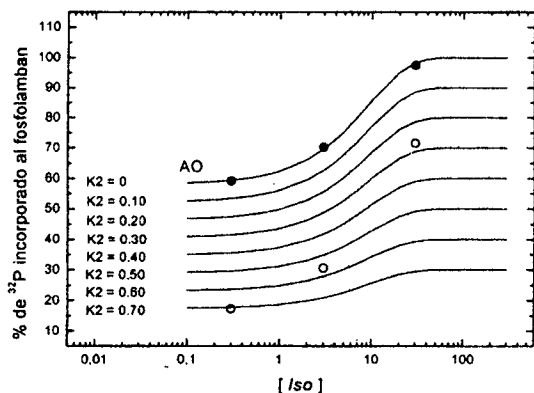


Figura 2: Porcentaje de ^{32}P incorporado al fosfolambán considerando la actividad de la fosfatasa (k_2) constante.

Los círculos vacíos en las Figuras 2 y 3 son los datos experimentales obtenidos en ausencia de ácido okádico. Para analizar la influencia del isoproterenol sobre la actividad k_2 , supusimos primeramente (Figura 2), que ésta no varía con $[Iso]$, esto es, $k_2([Iso]) \equiv \text{constante}$. Podemos apreciar que el ajuste está lejos de poder ser considerado como bueno. Es evidente que debe existir una dependencia de k_2 con $[Iso]$, más aún, k_2 debe ser una función decreciente de $[Iso]$. En este caso, la expresión para la actividad de desfosforilación tiene la forma:

$$k_2([Iso]) = 0.67 \exp(-0.032[Iso]) \quad (3)$$

La Figura 3 muestra las gráficas obtenidas de sitios fosforilados en el fosfolambán, en presencia y en ausencia de AO, en el último caso usamos la ec. (3) para representar la actividad de la fosfatasa.

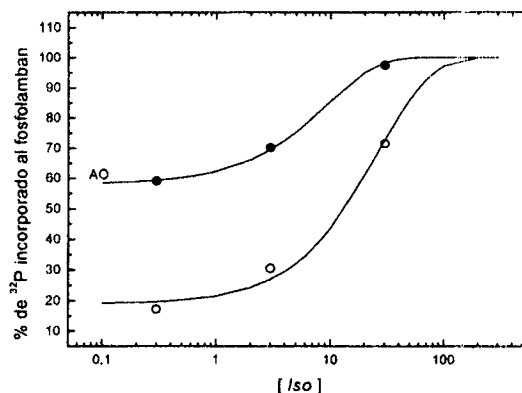


Figura 3: Porcentaje de ^{32}P incorporado al fosfolambán considerando la actividad de la fosfatasa dada por la ec. (3).

Una utilización adecuada de los datos experimentales disponibles (caso en que la fosfatasa PP1 es completamente inhibida por el AO), conjuntamente con un modelo numérico muy simple, nos permitió reproducir los datos experimentales de fosforilación del fosfolambán cuando las dos proteínas están activas.

Finalmente destacamos que, nuestro modelo permitió además proponer una forma funcional para las actividades asociadas a las proteínas encargadas de regular la cantidad de ^{32}P en el fosfolambán y responder favorablemente a la conjetura sobre el efecto que el isoproterenol tendría sobre los mecanismos de fosforilación y desfosforilación.

Deseamos agradecer a la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica y al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) por su apoyo (PICT 03-4517 y PIP 4690).

D.G.R es becario FOMEC (UNR); A.M y F.V son investigadores de CONICET.

Referencias

- 1- Cecilia Mundiña-Weilenmann, Leticia Vittone, Manuel Ortale, Gladis Chiappe de Cingolani y Alicia Mattiazzi, *J. Biol. Chem.*, **271**, 33561-33567 (1996).
- 2- Leticia Vittone, Cecilia Mundiña-Weilenmann, Matilde Said y Alicia Mattiazzi, *J. Biol. Chem.*, **273**, 9804-9811 (1998).

Sensitividad de las curvas corriente-tensión y respuesta espectral de celdas solares de silicio amorfo hidrogenado a la representación utilizada para la densidad de estados en el gap

E. Klimovsky y F. Rubinelli

INTEC (Instituto de Desarrollo para la Industria Química), Universidad Nacional del Litoral
Güemes 3450 – Santa Fé – Santa Fé - Argentina
E-mail: demopna@satlink.com

Los estados localizados presentes en el gap del silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) afectan profundamente las curvas características de los dispositivos. Los estados de las colas de bandas de conducción y de valencia presentan carácter aceptor y donador respectivamente. En cambio la representación de la densidad de estados profundos (DB) ha sido materia de controversias. Inicialmente las densidades de DB se supusieron planas y luego se encontró más apropiada modelarlas con funciones gaussianas. En ambos casos los estados se suponían de carácter donador o aceptor. Recientemente se encontraron evidencias de que estos estados presentan carácter anfotérico y los DB se representan por medio de tres gaussianas identificadas con los símbolos D^+ , D^0 y D^- . En este trabajo estudiamos el impacto de representar las gaussianas D^+ , D^0 y D^- con estados donadores-aceptores y con estados anfotéricos en las curvas I-V y en las respuestas espectrales (SR) de celdas solares de a-Si:H. Nuestros resultados arrojan que ambas representaciones dan lugar a curvas I-V y SR similares cuando se cumple que la energía de correlación es positiva ($U > 0$) y las secciones eficaces de los estados cargados se suponen superiores a las secciones eficaces de los estados neutros.

The characteristic curves of hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) based devices are very sensitive to the density of gap states. It has been clearly established that conduction and valence band tail states are acceptor- and donor-like respectively. On the other hand the representation of deep gap states or dangling bonds was a subject of controversy. Initially these states were represented by a flat density of states and more recently they were modeled by gaussian distributions. In both scenarios they were assumed to be donor- and acceptor-like states. Recently experimental evidences indicated that deep states show an amphoteric nature and they are currently modeled by three gaussians known as D^+ , D^0 and D^- . In this paper we study the impact in the current voltage (I-V) and spectral response (SR) curves of a-Si:H based solar cells of modeling the gaussians D^+ , D^0 and D^- with donor- and acceptor-like states or with amphoteric-like states. Our results indicate that both representations give rise to similar I-V and SR curves as long as the correlation energy (U) is assumed to be positive and the capture cross sections of the charged states are supposed to be higher to the capture cross sections of the neutral states.

• INTRODUCCION

El silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) ha encontrado gran aplicación en celdas solares debido a su menor costo comparativo con respecto al silicio monocristalino (c-Si). A pesar que el a-Si:H presenta una numerosa densidad de trampas o estados dentro de su banda prohibida o gap ($> 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) y mobilities muy inferiores a la del c-Si ($20\text{-}2 \text{ cm}^2/\text{V/s}$), su fabricación se basa en procesos realizados a bajas temperaturas ($\sim 200^\circ \text{C}$) lo que se traduce en un considerable ahorro de energía. Además es posible depositar a-Si:H uniformemente sobre áreas de $30 \times 40 \text{ cm}$ o mayores⁽¹⁾ lo que evita el desperdicio de material propio del corte de las obleas de c-Si.

La eficiencia de una celda solar de a-Si:H depende críticamente de la densidad de estados (DOS) presente en el gap. Existe consenso en que los estados profundos o "dangling bonds" (DB) del a-Si:H presentan carácter anfotérico⁽²⁾ (admiten ningún, un, o dos electrones) y en que los estados de las colas de las bandas de conducción y de valencia son de carácter aceptor o donador respectivamente (admiten ningún o un electrón). Sin embargo algunos códigos numéricos de celdas solares prefieren representar a un DB como estados donadores y aceptores debido a que el formalismo se simplifica considerablemente. La pregunta que queremos responder en este trabajo es bajo que condiciones esta aproximación

puede emplearse para modelar celdas solares de a-Si:H sin cometer un error significativo. Para alcanzar este objetivo estudiaremos la sensibilidad de las curvas densidad de corriente-tensión (J-V) y de la respuesta espectral (SR) a la representación utilizada para los DB. La respuesta espectral se define como el cociente entre la corriente eléctrica generada por una luz monocromática de longitud de onda variable y la correspondiente corriente óptica incidente.

• METODOLOGÍA EMPLEADA

a) DOS

La Figura 1 muestra la DOS empleada en nuestras simulaciones. El modelo estándar consiste de dos colas de banda y de los estados profundos. Las colas de banda decaen exponencialmente con la energía desde los bordes de banda hacia el interior del gap. La cola de la banda de conducción contiene estados aceptores y la cola de la banda de valencia contiene estados donadores. Los estados profundos en el gap (Dangling Bond o DB) serán representados por medio de 6 Gaussianas, 3 conteniendo estados donadores y 3 conteniendo estados aceptores, o directamente por 3 Gaussianas conteniendo estados anfotéricos. Esta representación de DOS ha sido ampliamente utilizada en la literatura⁽³⁾ para el a-Si:H. El eje de ordenadas de la Figura 1 está en escala logarítmica.

b) Dangling Bond (DB)

Un DB admite tres estados de carga distintos: positivo (D^+), neutro (D^0) o negativo (D^-). El DB detenta las características de lo que se conoce como estado

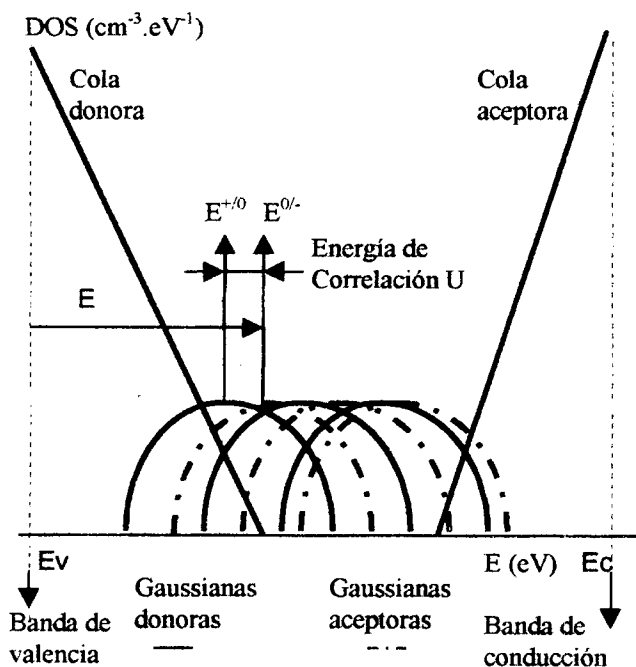


Figura 1: representación de la densidad de estados en el Gap.

amfotérico. Un estado amfotérico presenta carga positiva cuando no posee ningún electrón, es neutro cuando contiene un electrón y exhibe carga negativa cuando posee dos electrones. Una trampa con tres posibles estados de carga puede ser representada en forma aproximada por un par de trampas consistentes: una con carácter donador, que es neutra cuando está ocupada por un electrón y presenta carga positiva cuando no está ocupada; y otra con carácter aceptor, que presenta carga negativa cuando está ocupada por un electrón y es neutra cuando está desocupada. Como el estado amfotérico ocupado por dos electrones está desplazado en una energía U , conocida como la energía de correlación, del estado amfotérico ocupado por un electrón o no ocupado (aproximación hecha para tratar el problema dentro del formalismo de un electrón) estas dos trampas se ubican a energías distintas. Son representados en los diagramas de banda por los niveles de energía: $E^{+/0} - kT \ln 2$ (donor) y $E^{0/-} + kT \ln 2$ (aceptor) siendo $E^{+/0} - E^{0/-} = U + 2kT \ln 2 \sim U$. La energía U es la energía necesaria para adicionar un segundo electrón a un estado amfotérico simplemente ocupado (neutro). Como cada estado amfotérico de una gaussiana puede ser emulado por un par donador-aceptor, una gaussiana con estados amfotéricos puede aproximarse por las siguientes ecuaciones:

$$(1) \quad G_D(E) = \frac{N_{DG}}{\sigma_{DG} \cdot \sqrt{2} \cdot \pi} \cdot e^{-\left(\frac{E - E^{+/0}}{\sigma_{DG} \cdot \sqrt{2}}\right)^2}$$

$$(2) \quad G_A(E) = \frac{N_{AG}}{\sigma_{AG} \cdot \sqrt{2} \cdot \pi} \cdot e^{-\left(\frac{E - E^{0/-}}{\sigma_{AG} \cdot \sqrt{2}}\right)^2}$$

$G_D(E)$ y $G_A(E)$ son las densidades de estado en las Gaussianas donoras y aceptoras respectivamente ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1}$), N_{DG} y N_{AG} son el número total de estados bajo cada Gaussiana (cm^{-3}), σ_{DG} y σ_{AG} son la desviación estándar de cada Gaussiana (eV) y $E^{+/0}$ y $E^{0/-}$ son los picos de las mismas (eV).

Las simulaciones se realizaron con el programa DAMPS (Analysis of Microelectronic and Photonic Devices + new developments) desarrollado inicialmente en Penn State University, USA y a posteriori en INTEC, Argentina.

c) Descripción de la celda

La estructura de la celda consta de 4 capas que a continuación se detalla en la Tabla 1, junto con los parámetros correspondientes de las mismas.

TABLA 1: estructura de la celda y parámetros correspondientes de la misma.

Capas	p (a-SiC:H)	buffer (a-Si:H)	i (a-Si:H)	n (a-Si:H)
Espesor (Å)	90	15	5000	200
Gap (eV)	1.98	1.96	1.72	1.74
N_d, N_a (cm^{-3})	5.012×10^{18}	0	0	4.918×10^{18}
N_c, N_v (cm^{-3})	2×10^{20}	2×10^{20}	2×10^{20}	2×10^{20}
E_D (meV)	80	50	50	50
E_A (meV)	45	30	30	30
σ_{DG}, σ_{AG} (eV)	0.13	0.13	0.13	0.13
$E^{+/0}$ (eV)	0.59 - 0.89 - 1.19	0.58 - 0.88 - 1.18	0.55 - 0.85 - 1.15	0.44 - 0.74 - 1.04
$E^{0/-}$ (eV)	0.79 - 1.09 - 1.39	0.78 - 1.08 - 1.38	0.75 - 1.05 - 1.35	0.64 - 0.94 - 1.24
N_{DG}, N_{AG} (cm^{-3})	5×10^{18}	6.25×10^{16}	5×10^{15}	5×10^{18}
σ_n^+, σ_p^- (cm^2)	5×10^{-15}	5×10^{-15}	5×10^{-15}	5×10^{-15}
σ_n^0, σ_p^0 (cm^2)	5×10^{-16}	5×10^{-16}	5×10^{-15}	5×10^{-16}

N_d, N_a : Nivel de dopaje donador y aceptor, respectivamente.

N_c, N_v : Densidad efectiva de estados en las bandas de conducción y de valencia, respectivamente.

E_D, E_A : Energías características de las colas donoras y aceptoras, respectivamente.

σ_n^+, σ_p^- : Sección eficaz de los electrones en las Gaussianas donoras y de los huecos en las Gaussianas aceptoras, respectivamente.

σ_n^0, σ_p^0 : Sección eficaz de los electrones en las Gaussianas aceptoras y de los huecos en las Gaussianas donoras, respectivamente.

Las secciones eficaces de los estados que poseen carga neta se suponen superiores a las secciones eficaces de los estados neutros.

d) Ajuste de las curvas J-V y SR

Procedimos a ajustar las curvas densidad de corriente-tensión (a oscuras y bajo iluminación) y la respuesta espectral con el objeto de utilizar en este trabajo parámetros realistas y confiables. Las curvas experimentales fueron suministradas por el grupo del Dr. R. Schropp de Utrecht University, Holanda.

Para lograr un adecuado ajuste de las curvas características de las celdas fue necesario:

- utilizar un gap de movilidad de sólo 1.72 eV en la capa intrínseca para reproducir el voltaje de circuito abierto (V_{oc}) y el factor de llenado (FF).
- ajustar la recombinación entre electrones y huecos, reduciendo al mínimo posible las pendientes de las colas de banda y la densidad de DB y aumentando las secciones eficaces de captura para minimizar el efecto de trapping que define la curvatura de bandas. Esto fue importante para ajustar el FF.
- incluir en el modelo óptico el scattering de luz en superficies rugosas para fitear la corriente de cortocircuito (J_{sc}) y la respuesta espectral SR para longitudes de onda en el rojo y más elevadas.

No fue necesario incluir una capa defectuosa entre la capa (p) y la capa buffer para ajustar la corriente a oscuras a bajas tensiones, donde la corriente está limitada por recombinación.

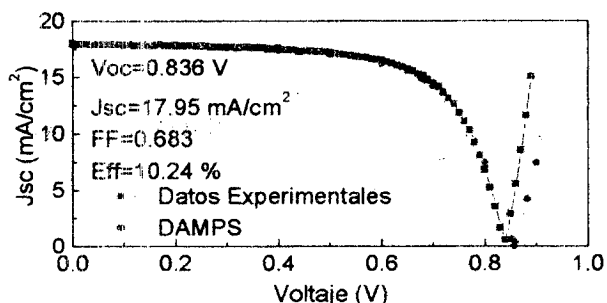


Figura 2: curvas J-V bajo iluminación, experimental y simulada.

En las Figuras 2 y 3 se muestran los ajustes de la curva J-V bajo iluminación y de la curva SR- λ medida en condiciones de cortocircuito y con una luz de AM1.5. La curva J-V a oscuras que no incluimos en este trabajo fue fiteada para el intervalo de voltajes 0-1 V. Para éstos ajustes se adoptó como DOS la densidad que se ilustró en la Figura 1. Los DB se modelaron por medio de estados de carácter anfotérico y la distribución de DB se representó con tres gaussianas espaciadas entre sí por 0.3 eV y con una energía de correlación de 0.2 eV⁽⁴⁾.

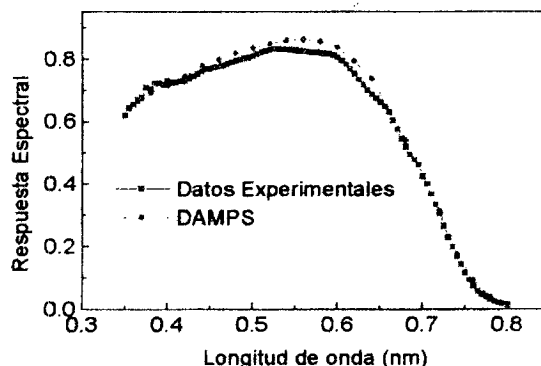


Figura 3: respuesta espectral, experimental y simulada.

• RESULTADOS OBTENIDOS

Si la energía de correlación U se adopta positiva y las secciones eficaces de los estados cargados superiores a las secciones eficaces de los estados neutros, no se aprecian cambios significativos en las curvas J-V (a oscuras y bajo iluminación) y SR- λ cuando se pasa de la representación anfotérica a la donora-aceptora. El estudio se realizó cubriendo el rango de temperaturas de 250 °K a 400 °K. Se varió: (a) la densidad de DB entre 10^{15} y 10^{18} cm^{-3} , (b) el espesor de la capa intrínseca desde 500 nm a 5000 nm y (c) la sección eficaz de los electrones y huecos en las gaussianas donoras y aceptoras desde 5×10^{-15} hasta $5 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$. Esto nos indica que nuestro resultado es bastante general. La densidad de portadores atrapados y la recombinación entre electrones y huecos, que tienen marcada influencia sobre la forma final de las curvas J-V y SR, son evaluadas correctamente por la aproximación de los niveles anfotéricos por un par de niveles donador-aceptor. Si las secciones eficaces de los estados cargados se suponen iguales o inferiores ($U > 0$) a las secciones eficaces de los estados neutros, se observan diferencias en las curvas J-V y SR predichas por DAMPS para ambas representaciones.

La gran mayoría de trabajos publicados en a-Si:H utilizan una energía U positiva. Sin embargo unos pocos autores sostienen que U es negativa en el a-Si:H⁽⁵⁾. Cuando se adopta la energía de correlación U negativa (esto quiere decir que el nivel de energía $E^{+/0}$ (donor) es superior al $E^{0/-}$ (aceptor)), se aprecian cambios significativos en las curvas J-V (a oscuras y bajo iluminación) y en SR- λ . Estos resultados concuerdan a grandes rasgos con las predicciones realizadas por Willems en su tesis⁽⁶⁾.

Por motivos de falta de espacio no discutiremos en este trabajo caso por caso en detalle. Para ser específicos, si nos ubicamos en la situación en que $U < 0$ y las secciones eficaces de los estados cargados son superiores a las secciones eficaces de los estados neutros, para todos los casos corridos se reconoce que para bajos valores de tensión (intervalo 0-0.6 V aproximadamente) la corriente a oscuras es mayor en la representación donora-aceptora que en la anfotérica, es decir la representación donora-aceptora magnifica la recombinación en la zona

intrínseca⁽⁷⁾. Para valores de tensión mayores la corriente es inferior para la representación donor-aceptor (ver figura 4) lo que implica que nuestra aproximación incrementa también la concentración de portadores atrapados que define la corriente a oscuras en el régimen de carga espacial⁽⁸⁾.

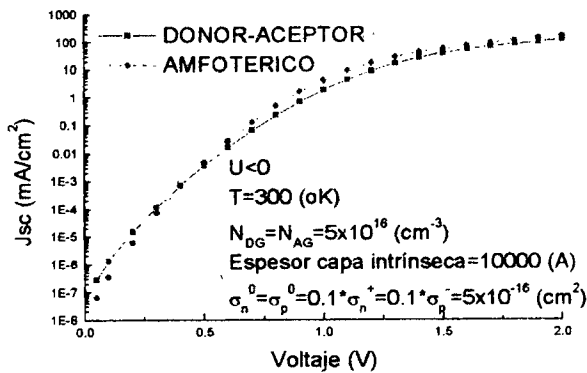


Figura 4: curvas J-V a oscuras, utilizando las dos representaciones propuestas.

La corriente bajo iluminación es menor para la representación donor-aceptor que para la amfotérica (figura 5) lo que indica que cuando la luz AM1.5 incide sobre la celda nuestra aproximación una vez más sobre evalúa la recombinación y la densidad de electrones y huecos, lo que a su vez reduce el campo eléctrico en la capa intrínseca aumentándose aún más la pérdidas por recombinación.

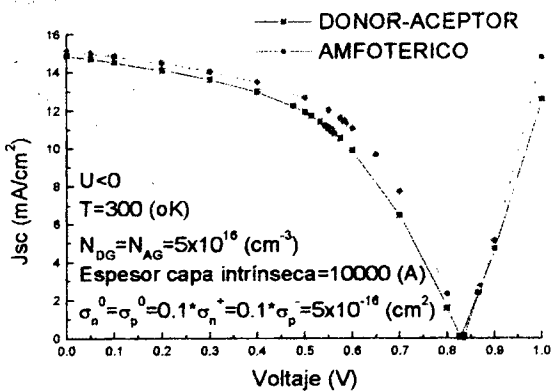


Figura 5: curvas J-V bajo iluminación, utilizando las dos representaciones propuestas.

Un resultado similar se obtiene para la respuesta espectral ya que la misma resulta ser superior en la representación amfotérica para bajos valores de longitudes de onda (azul) e igual para altos valores de longitudes de onda (rojo) (figura 6). La curva SR muestra nuevamente que la representación donora-aceptora tiende a magnificar la recombinación y el atrapamiento de portadores.

Cabe destacar que las diferencias que se mencionan en este trabajo se incrementan cuando se aumentan las densidades de los DB y el espesor de la capa intrínseca.

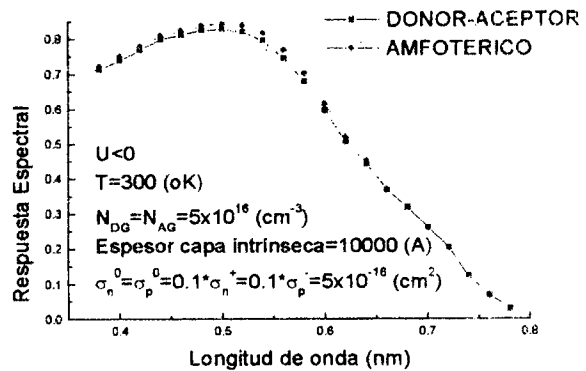


Figura 6: respuestas espectrales, utilizando las dos representaciones propuestas

CONCLUSIONES

Se ajustaron con D-AMPS las curvas J-V y SR-λ de celdas p-i-n de a-Si:H. Con los parámetros obtenidos fiteando curvas experimentales, se determinó la influencia de los diferentes modelos para representar la densidad de dangling bonds en el gap sobre las curvas características de las celdas solares de a-Si:H.

Se observa que cuando la energía de correlación U se adopta positiva y las secciones eficaces de los estados cargados se suponen superiores a las secciones eficaces de los estados neutros, dichas curvas son insensibles al modelo adoptado para representar a los dangling bonds (como pares donores-aceptores o como estados amfotéricos).

Cuando la energía de correlación se supone negativa, se aprecian importantes diferencias en las curvas J-V a oscuras y bajo iluminación y en la curva SR-λ. Para valores pequeños de tensión (V < 0.6V) la corriente a oscuras es menor para la representación amfotérica que para la donora-aceptora, pero para valores elevados de tensión directa (V > 1V) o bajo iluminación sucede exactamente lo contrario. Las curvas SR(λ) son menores para longitudes de onda pequeñas (azul) e iguales para longitudes de onda elevadas (rojo) cuando se utiliza la representación donora-aceptora.

En general cuando las dos representaciones arrojan diferencias en las curvas J-V y SR, la representación donora-aceptora tiende a magnificar la recombinación y el atrapamiento de portadores. Estos resultados son sensibles al cociente entre la sección eficaz de los estados cargados y la sección eficaz de los estados neutros.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer a la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica PICT 97 Proyecto 10-00000-00095 por el subsidio otorgado y al Conicet por el PIP Nro. 624/9.

También queremos expresar nuestros agradecimientos a los Dres. J. Rath y R. Schropp, de Utrecht University, por facilitarnos los datos experimentales.

REFERENCIAS

- (1) Snell A.J., Mackenzie K.D., Spear W. E., Le Comber P. G., and Hughes A. J. (1981) - Appl. Phys. 24, 357.

- (2) Vyshnavi Suntharalingam and Howard M. Branz, "On modeling trivalent dangling bonds with bivalent levels", MRS, Spring 1994, Symposium A.
- (3) M. J. Powell, C. Van Berkel, A. R. Franklin, S. C. Deane, and W. I. Milne, Phys. Rev. B 45, 4160 (1992).
- (4) M. J. Powell and S. C. Deane, "Improved defect-pool model for charged defects in amorphous silicon", Physical Review, volume 48, number 15, page 10 815 (1993).
- (5) Anderson P. W. (1975) - Phys. Rev. Lett. 34, 953.
- (6) Willemen, J.A., "Modeling of amorphous silicon single and multi-junction solar cells", Ph. D. thesis, Delft University of technology, 1998.
- (7) H. Okamoto, H. Kida and Y. Hamakawa, "Steady-state photoconductivity in amorphous semiconductors containing correlated defects" - Philosophical Magazine B, 1984, Vol. 49, No. 3, 231-247.
- (8) Kruler W., Pfeleiderer M., Plattner R. And Stetter W., 1982, AIP Conference Proceedings, Vol. 120 (New York: American Institute of Physics), p.311.