



*Instituto de Ciencias
Centro de Investigaciones en Dispositivos Semiconductores
Posgrado en Dispositivos Semiconductores*

Depósito de nanocapas InGaN y GaN por ALD sobre Silicio para su posible aplicación en fotosensores y celdas solares.

*Tesis sometida como requisito para obtener el grado de
Maestro en Dispositivos Semiconductores*

Presentada por:

Dylan Tepatzi Xahuentitla # 220470571

Dirigida por:

Jose Joaquin Alvarado Pulido

©BUAP, septiembre de 2022.

Todos los derechos reservados.

Beca CONACyT #1041324

Resumen

En el presente trabajo se realiza el estudio de las heteroestructuras Si/InGaN y Si/GaN para su aplicación en fotosensores y celdas solares. Para ello, se realizaron simulaciones numéricas a través del software Silvaco atlas, tomando en cuenta datos experimentales y de la literatura. Con el fin, de determinar los parámetros críticos de funcionamiento de los dispositivos que pudiesen mejorar el funcionamiento de los dispositivos optoelectrónicos. Una vez determinados estos valores, se crecieron las películas nanométricas GaN e InGaN en silicio, por la técnica de depósito de capas atómicas Asistida por plasma (PEALD) e investigamos las propiedades eléctricas, ópticas y estructurales de los dispositivos. Demostrando así, la obtención de los materiales III-nitruros y el funcionamiento de las heteroestructuras Si/GaN y Si/ InGaN como dispositivos optoelectrónicos.

Abstract

In the present work, the study of the Si/InGaN and Si/GaN heterostructures is carried out for their application in photosensors and solar cells. For this, numerical simulations were carried out through the Silvaco atlas software, considering experimental and literature data. To determine the critical operating parameters of the devices that could improve the operation of optoelectronic devices. Once these values were determined, nanometric GaN and InGaN films were grown on silicon, by the plasma-assisted atomic layer deposition (PEALD) technique, and we investigated the electrical, optical, and structural properties of the devices. Thus, demonstrating the obtaining of III-nitride materials and the operation of the Si/GaN and Si/InGaN heterostructures as optoelectronic devices.

INDICE

Introducción	1
CAPITULO I	3
Marco Teórico.....	3
Materiales III-V (GaN, InN e InGaN).....	4
Estructura de los semiconductores III-nitruros.	5
Sustratos para crecimiento de películas de GaN, InN, AlN y sus compuestos.....	6
Antecedentes.....	8
Fundamentos teóricos de dispositivos optoelectrónicos.....	12
Absorción.....	12
Fotogeneración.....	14
Fotocorriente.	15
Características I-V de unión p-n y sus efectos resistivos.....	16
Recombinación.....	17
Procesos de transporte en interfaces.	20
Celdas Solares.	22
Fotodetectores.....	25
CAPITULO II	26
Simulación de Monocapa Si/InGaN y Si/GaN para aplicaciones optoelectrónicas.	26
Metodología e Introducción.	27
Parámetros de simulación.	28
Parámetros ópticos.....	29

Ancho de banda del nitruro de galio indio.....	32
Afinidad electrónica para InGaN.....	32
Modelos específicos utilizados para la simulación de dispositivos optoelectrónicos.....	35
Modelos de defectos	35
Estados en la interfaz.....	35
Estados dentro del ancho de banda.....	37
Densidad de portadores atrapados	40
Incorporación de defectos en el material GaN en el software Silvaco.....	42
Nitruro de galio tipo N.....	42
Nitruro de galio tipo P	44
Defectos en la interfaz Silicio-nitruro de galio.....	45
Incorporación de defectos en el material InGaN en el software Silvaco..	47
Nitruro de galio indio tipo P a 25%.....	47
Defectos en la interfaz Silicio-nitruro de galio indio.....	49
Modelo de transporte en Silvaco.....	50
El modelo de transporte de emisiones termoiónicas.....	50
Modelo de transporte en heterouniones por tuneleo no local.....	51
El Modelo de túnel asistido por trampa de barrera cuántica.....	53
Modelo de trampas para la asistencia de túnel no local (básico)	53
Mecanismos de flujo de corriente para heterouniones Tipo II (Modelo Danielsson).....	54
Análisis de resultados de la monocapa nitruro de galio para aplicaciones fotovoltaicas.....	57
n-Si/p-GaN.....	58

Variación del espesor de la monocapa.....	63
Análisis de resultados de la monocapa nitruro de galio para aplicaciones de fotodetección.....	66
Análisis de resultados de la monocapa nitruro de galio indio para aplicaciones fotovoltaicas.....	69
Monocapa n-Si/ <i>p</i> – <i>In25Ga75N</i>	71
Monocapa n-Si/ <i>P</i> – <i>In71Ga29N</i>	77
Variación del espesor de la monocapa InGaN.	82
Análisis de resultados de la monocapa nitruro de galio indio para aplicaciones de fotodetección.	84
CAPITULO III	86
Métodos de depósito y técnicas de caracterización.....	86
Técnica de depósito ALD.....	87
PEALD.....	88
Difracción de rayos-X (DRX).	90
Microscopia electrónica de barrido (SEM).	91
Espectroscopia de rayos X de energía dispersiva (EDS).	93
Perfilometría.	93
Espectroscopia de ultravioleta visible Uv-vis.	94
Caracterizaciones eléctricas.	95
Medida de corriente contra voltaje en oscuridad con aplicación de luz.	96
Medida de Capacitancia contra voltaje.	98
Fotorespuesta.....	100
CAPITULO IV	101

Fabricación y caracterización de monocapa Si/GaN y Si/InGaN crecidas mediante la técnica de depósito ALD.	101
Fabricación de las heteroestructuras n-Si/n-GaN y n-Si-n/n-InGaN por medio de la técnica de depósito de capas atómicas asistido por plasma (PEALD).	102
Proceso general de fabricación de los dispositivos.	102
Experimento I: Depósito de capa de nitruro de galio sobre una oblea de silicio tipo n.	105
Experimento II: Depósito de capa de nitruro de galio indio sobre una oblea de silicio tipo n.....	109
Composición atómica de la película InGaN.	110
Proceso PEALD de InGaN.	111
Difracción de rayos x de las películas InGaN y GaN (XDR).	113
Reflectometría de rayos X (XRR) Si/GaN y Si/InGaN.....	116
Espectrometría de masas de iones secundarios (Secondary-ion mass spectrometry, SIMS).....	118
Microscopía electrónica de barrido (SEM) y Espectroscopia de rayos X de energía dispersiva (EDS) de la película InGaN en silicio.	120
.....	122
Perfilometría.	122
Espectroscopia de ultravioleta-visible (UV-VIS)	123
Caracterizaciones eléctricas.	124
Medición I-V.....	124
Medición de Capacitancia-Voltaje	129
Defectos en la interfaz	133
Fotorespuesta.....	134

Responsividad.....	136
.....	137
Conclusiones.....	138
Referencias bibliográficas.....	139

Introducción

Actualmente, hay una fuerte necesidad para el desarrollo y mejoramiento de las tecnologías orientadas a dispositivos optoelectrónicos entre los cuales se encuentran: los diodos emisores de luz, diodos laser, fotodetectores y celdas solares. Los materiales más utilizados para aplicaciones relacionadas a la luz son los materiales III-V, ya que presentan una alta polarización, alta movilidad, ancho de banda directo, alto coeficiente de absorción, alta sensibilidad a la luz y la posibilidad de modificar el ancho de banda para elementos ternarios. Debido a todas estas características los elementos III-V producen las eficiencias de conversión fotovoltaicas más altas, con un 29,1% para GaAs como unión simple y como dispositivos con múltiples uniones un 47.1% [1-2], además con estos materiales se tiene una gran respuesta optoelectrónica. Es posible usar estos materiales como películas delgadas capaces de ser procesadas como dispositivos ligeros y flexibles, manteniendo una gran estabilidad.

Se han evaluado diversos materiales III-V con múltiples aplicaciones sobre todo en el área de la optoelectrónica, pero hay elementos que llaman fuertemente la atención, estos son los III-V, basados en el elemento nitrógeno, específicamente el nitruro de galio (GaN), el nitruro de indio (InN) y el elemento ternario nitruro de galio indio (InGaN). Este sistema tiene una banda prohibida sintonizable que está determinada por la fracción molar de indio y galio presentes en la aleación, con un ancho de banda de 0.7eV a 3.4eV que abarca todo el espectro visible, que permite el diseño de dispositivos optoelectrónicos multifuncionales de máxima eficiencia. Esto hace que el material InGaN sea un candidato potencial para dispositivos fotovoltaicos (FV) de alta eficiencia [3]. Una de las técnicas más prometedoras, para mejorar la absorción de diferentes longitudes de onda del espectro de luz con las películas de InGaN es el uso de múltiples uniones, para absorber un rango de energía más amplio de fotones incidentes, llegando a alcanzar eficiencias teóricas superiores al 60%.

El problema con esta tecnología es el costo de su fabricación, además de que la escala que pueden tener es limitada, ya que no se ajusta a la tecnología actual (silicio), una forma de reducir los costos y modificar en menor medida el proceso de fabricación típico es incorporar estos elementos III-V (emisor) en heteroestructura teniendo como silicio (absorbente) , este elemento se usa en la mayoría de los dispositivos semiconductores, Dado lo anterior en esta tesis se analiza la interacción que tienen las películas de III-nitruros en silicio para aplicaciones en dispositivos fotovoltaicos y fotosensores , utilizando el método de fabricación ALD (atomic layer deposition). El proceso de fabricación ALD tiene ciertas ventajas inherentes en términos de deposición de película delgada en comparación con todas las otras técnicas de deposición de películas delgadas disponibles. Se debe tomar en cuenta que la deposición por ALD no depende de varios elementos de importancia crítica como en CVD (la temperatura o la uniformidad del flujo), por lo que siempre que la temperatura se mantenga dentro de la “ventana de temperatura” se mantendrá las características de la película. Es posible mediante ALD, depositar capas alternas de diferentes materiales, secuencialmente, para poder depositar materiales como GaN, InN e InGaN como ya se ha demostrado en laboratorio [4]. El elemento InGaN fue depositado en silicio con composiciones de 25% y 71% teniendo nuestra mayor referencia para este trabajo.

En los siguientes capítulos se revisará: el estado del arte de los materiales III-V basados en nitruros para aplicaciones optoelectrónicas, el diseño de heteroestructuras III-V/silicio mediante el software de simulación Silvaco atlas, la fabricación de los dispositivos Si/InGaN y Si /GaN, así como, la caracterización estructural, morfológica, eléctrica y química de las películas depositadas mediante PEALD.

CAPITULO I

Marco Teórico.

En este capítulo, se revisa el estado del arte de los materiales III-nitruro (GaN, InN e InGaN) y se explora la posibilidad de que estas películas delgadas de materiales III-V, basados en nitrógeno, puedan acoplarse a la tecnología estándar de silicio para su posible aplicación en dispositivos fotovoltaicos y fotosensores de alto rendimiento; siendo el Si el material de sustrato, así como la capa absorbente, y el III-nitruro la capa emisora, Para formar la heteroestructura Si/III-nitruro.

Materiales III-V (GaN, InN e InGaN).

La tecnología fotovoltaica y los sensores ópticos requieren de materiales que cumplan con buena responsividad, sensibilidad a la luz, absorción en diferentes longitudes de onda, banda directa y alta polarización, además de un mejoramiento de la eficiencia y desempeño de los dispositivos. Los materiales más utilizados para aplicaciones de optoelectrónicas son los materiales III-V, y en este último tiempo se ha explorado los basados en nitruros y sus aleaciones (nitruro de galio, nitruro de indio y nitruro de galio indio), ya que pueden cubrir todo el rango del espectro solar (Figura 1). El InN tiene un ancho de banda directo de 0,7 eV (1771 nm), GaN un ancho de banda de 3,4 eV (366 nm) y específicamente la aleación InGaN basada en la composición de indio, puede cubrir un amplio rango de banda prohibida que sería ideal para celdas solares de alta eficiencia [5] y fotodetectores que trabajen en la región visible del espectro solar [6]. Otras propiedades atractivas de los nitruros incluyen la alta estabilidad mecánica, térmica, así como grandes constantes piezoeléctricas.

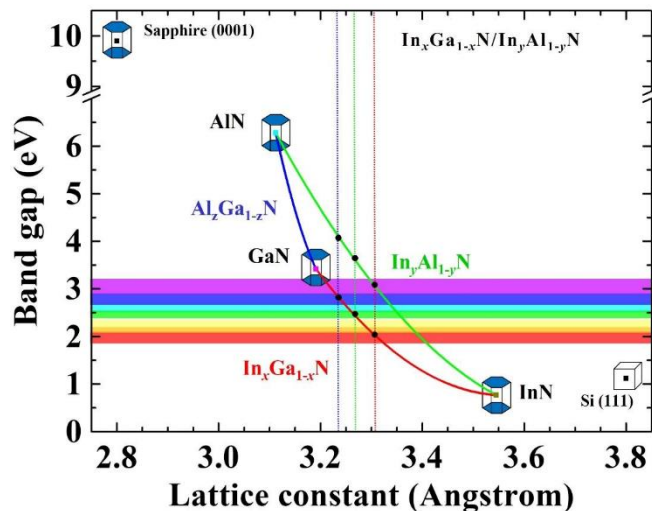


Figura 1. Las energías de banda prohibida del sistema de aleación de InGaN cubren todo el espectro solar y su relación con el parámetro de red.

El cálculo de la banda prohibida utiliza el esquema de interpolación, aunque aún está abierto a verificación experimental, puede proporcionar parámetros de material más útiles y confiables en todo el rango de composición de la aleación [7].

En tal caso, el parámetro del material ternario puede aproximarse de manera muy eficiente mediante la relación

$$T_{A_xB_{1-x}C} = xB_{AC} + (1 - x)B_{BC} + C_{A-Bx}(1 - x) \equiv a + bx + cx^2 \dots\dots\dots (1)$$

Donde c es el llamado (bowing) o parámetro no lineal. Para el elemento ternario InGaN se usa la ecuación 1, para obtener el ancho de banda, siendo el valor b=1.4.

$$E_g(x) = xE_g(InN) + (1 - x)E_g(GaN) - b_x(1 - x) \dots\dots\dots (2)$$

Estructura de los semiconductores III-nitruros.

Para los materiales InN y GaN, la wurtzita es la estructura termodinámicamente estable. Esta estructura tiene un tipo de estructura de red hexagonal compacta con un patrón repetitivo atómico AB. Sin embargo, bajo ciertas condiciones de deposición, $In_xGa_{1-x}N$ también puede formarse la estructura tipo zincblenda [7].

Esta estructura tiene un tipo de red cúbica centrada en las caras con un patrón repetitivo atómico ABC. La característica más fuerte de los materiales grupo III-V en comparación con otras contrapartes de banda ancha es la tecnología de heteroestructura que pueden soportar. En este sistema, se pueden hacer pozos cuánticos, hetero-interfaces, barreras túnel, modulación de ancho de banda, dando acceso a nuevas regiones espectrales y nuevos regímenes operativos para dispositivos optoelectrónicos.

Sustratos para crecimiento de películas de GaN, InN, AlN y sus compuestos.

Una de las principales dificultades que ha obstaculizado la investigación III-nitruros, es la falta de un material de sustrato compatible con la red y térmicamente compatible. Lo que hay que tener en cuenta al escoger un sustrato son las constantes de red, la compatibilidad térmica, la estructura cristalina, el acabado de la superficie, la composición, la reactividad, las propiedades químicas y eléctricas, también son importantes para determinar la idoneidad como base, ya que el sustrato empleado determina la orientación del cristal, polaridad, politipo, morfología de la superficie, deformación y concentración de defectos de las películas epitaxiales.

Los Investigadores han estudiado una amplia variedad de materiales para la epitaxia de nitruros, incluidos óxidos metálicos aislantes, nitruros metálicos y otros semiconductores [8]. Los resultados más prometedores de sustratos hasta ahora son zafiro y SiC, aunque los nitruros del grupo III-V se han crecido en Si, NaCl, GaP, InP, SiC, W, ZnO, MgAl₂O₄, TiO₂ y MgO. Como se menciona en diferentes investigaciones, se ha utilizado el silicio como sustrato para crecer los del grupo III-nitruros, teniendo algunos ejemplos el crecimiento epitaxial directo de GaN en una oblea de Si de gran diámetro (111), para el desarrollo de la electrónica de potencia de alto rendimiento [9]. Este método es una forma de fabricación de circuitos y dispositivos a gran escala. La integración permite la combinación de la alta complejidad y flexibilidad de los circuitos de Si con la amplia gama de nuevos dispositivos habilitados por GaN: LED, transistores, dispositivos de recolección de energía y filtros. El GaN se crece típicamente en sustratos monocristalinos como, zafiro, SiC y Si con alta calidad cristalina.

Hoy en día, los sustratos nativos de GaN están disponibles hasta 2 pulgadas. La incorporación de InGaN en sustratos de silicio para la fabricación de diodos emisores de luz (LED) de nitruro de galio indio, azul avanzado conducen a su potencial como reemplazo de la infraestructura existente en iluminación general, con importantes implicaciones para el uso eficiente de la energía [10]. Se muestra en la tabla las características de los sustratos típicos para los nitruros.

Tabla 1. Tabla con los sustratos para el crecimiento de materiales III-V.

Propiedades	GaN	Si	Zafiro	SiC	Diamante
Ancho de banda	3.42	1.11	9.9	3.26	5.45
Conductividad térmica	2.0	1.5	0.35	4.9	180
Desajuste de red (%)	0	17	14	3.5	89
Coefficiente de expansión térmica	5.5	2.6	7.5	4.46	1.0
Desajuste del coeficiente de expansión térmica.	0	52.7	36.4	18.9	81.8
Tamaño del sustrato	30	300	150	150	10
Costo del sustrato	Muy alto	Muy bajo	Medio	Alto	Extremadamente alto

Como se nota en la tabla 1, el silicio es un sustrato con un costo menor además es el material más utilizado para el procesos de fabricación de dispositivos semiconductores, por lo que se justifica la utilización del silicio para hacer una celda tipo heteroestructura.

Antecedentes

Los estudios basados en $In_xGa_{1-x}N$ informaron la gran falta de coincidencia entre las capas de InGaN con alto contenido de In y GaN. Jani et al. [11] demostró por primera vez con el método de crecimiento MOCVD, la fabricación de una única unión de 100 nm de espesor desarrollado con $In_{0.28}Ga_{0.72}N$. El dispositivo tuvo un voltaje de circuito abierto de 2.1 V, que corresponde con éxito a su banda prohibida de 2.5 eV. Estos reportes revelaron la degradación del rendimiento, por el espesor de las capas de InGaN de más de 200 nm y un dopaje deficiente de InGaN de tipo P. Yamamoto y col. [12,13] informaron sobre una celda Homounion PN usando la técnica MOCVD de $In_xGa_{1-x}N$ con alto contenido de In (25%) que mostró una clara fotorespuesta con voltaje de circuito abierto V_{oc} de 1,5 V y una densidad de corriente de cortocircuito J_{sc} de 0,5 mA / cm².

El origen de la caída de rendimiento en sus aplicaciones como dispositivo optoelectrónico, se explica por la recombinación radiativa y no radiativa de portadores debido a las capas de InGaN gruesas altamente defectuosas (700 nm).

Los estudios revelaron que la calidad del cristal deficiente y la alta densidad de dislocación está relacionada con el aumento del grosor de las películas. Para suprimir los defectos, este debería de estar, por debajo de un espesor crítico. Como posible solución a este problema, se propuso una estructura MQW (Multi-Quantum Well), que consta de capas InGaN de pocos nanómetros para la región activa. Dahal y col [14] fabricaron por primera vez una celda solar con los materiales InGaN/GaN con MQW que proporciono una EQE (eficiencia cuántica) sin precedentes del 40% a una longitud de onda larga de 450nm. Este enfoque de pozos cuánticos basados en InGaN condujo a una mejora de rendimiento general al permitir el crecimiento de material InGaN en pozos sin necesidad de crecer gruesas capas.

En el 2011, Loiu realizo el estudio de 20 periodos de pozos cuánticos con diferentes composiciones de indio cultivadas en SiCN /Si (111). BHUIYAN en [5] detallo los desafíos que hay tener en cuenta. Los principales retos mencionados de los nitruros son:

- El crecimiento epitaxial.
- La discrepancia de red y defectos.
- Separación de fases, fluctuación nitruro y la dinámica del portador.
- El dopaje tipo P de las capas de InGaN y contactos.
- Baja concentración de huecos.

Este último problema se debe al alto intervalo de banda y la alta masa efectiva de GaN en los huecos. La baja concentración de portador de hueco hace que sea difícil lograr una baja resistencia de contacto para la unión del homo túnel (TJ) p-GaN y p-n GaN con alta conductividad. Ehsan Vadiie y col et al [15] en el 2018 realizaron la estructura de la figura 2 con un método híbrido en el que las regiones activas se cultivaron con deposición de vapor químico orgánico metálico (MOCVD) y los contactos de unión túnel se cultivaron mediante epitaxia de haz molecular asistida por plasma (MBE). Este estudio concluyo que la unión túnel (TJ) elimina la necesidad de óxidos conductores transparentes (TCO) con alta absorptancia óptica.

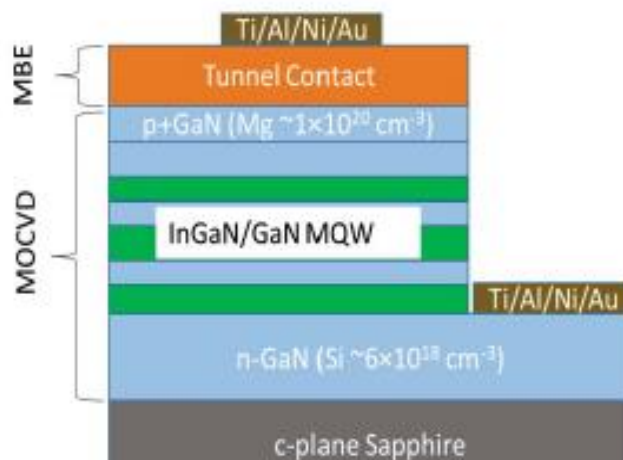


Figura 2. Estructura con 2 procesos de fabricación MBE para el contacto túnel y MOCVD para los depósitos de InGaN/GaN.

La libertad de diseño para dispositivos optoelectrónicos basados en III-nitruro que mejora el transporte entre las capas de InGaN Y GaN se reportó por Xin Chen y colaboradores con el dopaje de Si con barrera de GaN en el rendimiento de las celdas solares MQW de InGaN / GaN. La resistencia en serie disminuye y el factor de llenado (FF) aumenta notablemente a medida que aumenta la concentración de dopaje de Si en las capas de barrera de GaN. Estos resultados se atribuyen a la mejora de la propiedad de transporte al dopar silicio en las barreras de GaN [16]. Sin embargo, la calidad del cristal se degrada a medida que aumenta la concentración de dopaje de Si, lo que resulta en la reducción de EQE, Jsc y Voc.

Como resultado, la muestra con una ligera concentración de dopaje de Si de $4E17 \text{ cm}^{-3}$ exhibe la mayor eficiencia de conversión. Los resultados experimentales son útiles para la futura optimización y aplicación.

Todos estos resultados de materiales III-V basados en nitrógeno, han utilizado métodos de crecimiento MOCVD y MBE, teniendo ambos procesos, altas temperaturas de depósito. En comparación, el Depósito de capas atómicas (ALD) y la ALD mejorada con plasma (PEALD) es un enfoque alternativo para el crecimiento de nitruros a baja temperatura, en el que las películas se preparan usando un crecimiento capa por capa [17-18]. En los últimos años, se han centrado importantes esfuerzos en el crecimiento de GaN utilizando ALD. El grupo de Biyikli ha realizado contribuciones notables sobre el crecimiento de ALD a baja temperatura de las películas de GaN con propiedades eléctricas mejoradas y alta calidad cristalina. [19-20]. San-Jie Liu y col et al [21] lograron el crecimiento de GaN en silicio mediante el método PEALD.

Las películas de GaN depositadas a diversas temperaturas en la ventana ALD presentan interfaces GaN / Si (100) atómicamente nítidas. Sin embargo, se forma una capa intermedia amorfa de algunos nanómetros de espesor compuesta por Oxido de galio (Ga_xO_y) durante la etapa de crecimiento inicial por lo que afecto la cristalización del material.

En el 2020 en la benemérita universidad de puebla, M. Chávez Portillo e investigadores del centro de investigación CIDS[4], usaron el método de crecimiento Deposición de capa atómica mejorada por plasma (PEALD) para crecer InGaN, GaN e AlGaN en silicio demostrando la posibilidad de variar el InN o AlN para poder variar el ancho de banda de los elementos ternarios InGaN y AlGaN, además de poder calcular el ancho de banda, coeficiente extinción k e índice de refracción n , que son parámetros que son utilizados en esta tesis.

Fundamentos teóricos de dispositivos optoelectrónicos.

Absorción.

La interacción que tiene el haz de luz a diferentes longitudes de onda con un sólido, en donde ocurren transiciones en sus bandas energéticas, se le conoce como absorción. Los fotones que inciden en la superficie del material semiconductor pueden ser absorbidos, transmitidos y reflejados, los últimos dos conceptos no contribuyen en la generación de energía eléctrica, sino más bien son mecanismos de pérdida, así que la absorción es el único mecanismo para la generación de pares electrón-hueco, sin embargo, estos conceptos son tomados en la ley de Beer-Lambert para determinar la generación y los coeficientes de refracción n y de extinción k .

La absorción se divide en seis tipos y cada uno de ellos tiene su rango energético de influencia. De estos mecanismos los que interesan para celdas solares son las transiciones dentro de la banda como son [22]:

- Transiciones dentro del ancho de la banda por niveles dentro del ancho de banda ya sea por dopados o por defectos.
- Transiciones banda a banda.

Las transiciones intrabanda no generan una conducción de electrones o huecos libres, estos tipos de transiciones que provoca la absorción de luz en un material sólido, se pueden ver en la siguiente figura 3.

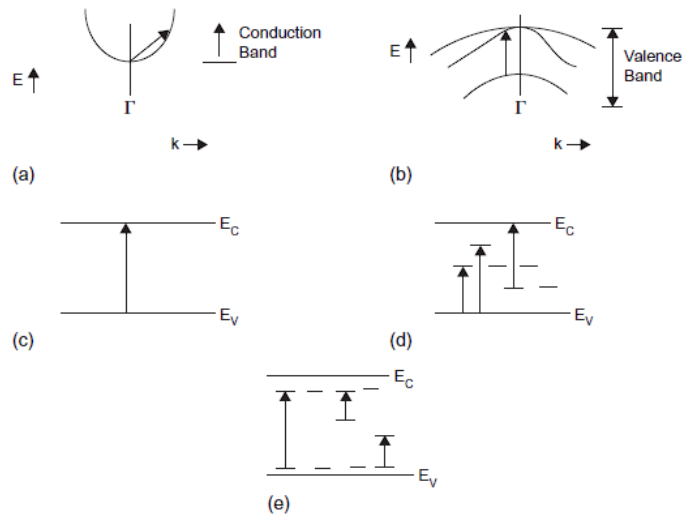


Figura 3. Transiciones **a)** Transiciones intrabanda banda de conducción. **b)** transiciones intrabanda banda de valencia **c)** transiciones banda a banda **d)** y **e)** transiciones trampa a trampa banda trampa.

Estas transiciones dependen de la energía del fotón de incidencia y se pueden dividir en tres grupos en función de la energía del fotón y el ancho de la banda del material absorbente.

- Si $E_{ph} < E_G$ fotones con energía, E_{ph} menor que la energía banda prohibida E_G interactúan sólo débilmente con el semiconductor, pasando a través de él como si fuera transparente.
- Si $E_{ph} = E_G$ tiene suficiente energía para crear un par electrón-hueco y son absorbidos eficientemente.
- Si $E_{ph} > E_G$ Los fotones con energía mucho mayor que la banda prohibida son fuertemente absorbidos. Sin embargo, para aplicaciones fotovoltaicas, la energía del fotón mayor que la banda prohibida se desperdicia cuando los electrones rápidamente vuelven a los bordes de la banda de conducción en un proceso térmico.

La medida típica de absorción en semiconductores es a través del coeficiente de absorción, en este sentido a mayor coeficiente de absorción tenga un material, mejor podrá aprovechar la energía de los fotones incidentes, en pocas palabras el coeficiente de absorción determina hasta qué punto un haz de luz con cierta longitud de onda puede penetrar el material antes de ser absorbido. El coeficiente de absorción, α , está relacionado con el coeficiente de extinción, k , por la siguiente fórmula:

$$\alpha = \frac{4\pi}{\lambda} \dots \dots \dots (3)$$

Otro concepto importante que se obtiene al obtener la reflectividad R , además del coeficiente de extinción k , es el índice de refracción n y se calcula con la siguiente formula:

$$n = \left(\frac{1+R}{(1-R)^2} \right) + \sqrt{\frac{4R}{(1-R)^2} - k^2} \dots \dots \dots (4)$$

Fotogeneración.

La tasa de generación da el número de electrones generados en cada punto del dispositivo debido a la absorción de fotones. Si los efectos de reflexión e interferencia no son importantes en una estructura de celda solar, entonces se espera que la luz monocromática que ingrese al material en x_0 con intensidad $I_0(\lambda)$ en algún punto del material, se dé por la ley de Beer-lambert:

$$I_{(\lambda,x)} = I_0(\lambda)e^{-\alpha(\lambda)x} \dots \dots \dots (5)$$

Si tomáramos los efectos de una absorción no uniforme, debido a la reflexión, la tasa de generación se escribe en función del espesor del material y de la longitud de onda de la siguiente forma:

$$G_{(\lambda,x)} = \alpha(\lambda)I_0(\lambda)[1 - R(\lambda)]e^{[-\alpha(\lambda)x]} \dots \dots \dots (6)$$

Donde $R(\lambda)$ es la fracción de los fotones que son reflejados y $\alpha(\lambda)$ es el coeficiente de absorción ambos en función de la longitud de onda [22].

Fotocorriente.

La operación de una celda solar se basa en la generación de pares electrón-hueco en la región de transición y separación de cargas debido al campo eléctrico de la unión PN, si se asume la condición de baja inyección, en una dimensión y las condiciones de continuidad en estado estacionario se tiene las siguientes expresiones para la densidad de corriente de huecos y electrones.

$$J_p = -qD_p \left(\frac{dp_n}{dx}\right)_{x_j} = \left[\frac{qI_0(1-R)\alpha L_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1}\right] \times \left[\frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p} + \alpha L_p\right) e^{-\alpha x_j} \left(\frac{S_p L_p}{D_p} \cosh\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \sinh\left(\frac{x_j}{L_p}\right)\right) - \alpha L_p e^{-\alpha x_j}}{\left(\frac{S_p L_p}{D_p}\right) \sin\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \cosh\left(\frac{x_j}{L_p}\right)} \right] \dots\dots\dots (7)$$

En $x = x_j$

$$J_n = -qD_n \left(\frac{dn_n}{dx}\right)_{x_j+W} = \left[\frac{qI_0(1-R)\alpha L_n}{\alpha^2 L_n^2 - 1}\right] e^{-\alpha(x_j+W)} \times \left\{ \alpha L_n - \frac{\frac{S_n L_n}{D_n} \left[\cosh\left(\frac{H}{L_n}\right) - e^{-\alpha H} \right] + \sinh\left(\frac{H}{L_n}\right) + \alpha L_n e^{-\alpha H}}{\left(\frac{S_n L_n}{D_n}\right) \sinh\left(\frac{H}{L_n}\right) + \cosh\left(\frac{H}{L_n}\right)} \right\} \dots\dots\dots (8)$$

En $x = x_j + W$

La fotocorriente por unidad de ancho de banda es el número de fotones absorbidos, esta corriente toma lugar en la región de carga espacial y se puede escribir como:

$$J_{dr} = qI_0(1 - R)e^{(-\alpha x_j)} [1 - e^{(-\alpha W)}] \dots\dots\dots (9)$$

El total de fotocorriente en función de la longitud de onda es la suma de las ecs [23]

$$J(\lambda) = J_p(\lambda) + J_n(\lambda) + J_{dr}(\lambda) \dots\dots\dots (10)$$

Características I-V de unión p-n y sus efectos resistivos.

El circuito equivalente de una unión PN que se muestra en la figura 4, incorpora la resistencia en serie de las pérdidas óhmicas en el contacto superior R_s y la corriente de fuga de la resistencia shunt R_{sh} .

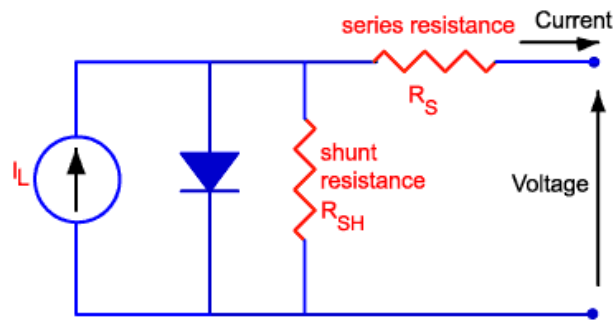


Figura 4. Circuito equivalente de una celda solar, contemplando resistencias en serie y paralelo.

La corriente de I-V tomando en cuenta son encontrados con la siguiente ecuación.

$$I = I_L - I_0 \exp \left[\frac{q(V+I \cdot R_s)}{n \cdot kT} \right] - \frac{V+I \cdot R_s}{R_{sh}} \dots \dots \dots (11)$$

Los efectos resistivos en celdas solares reducen la eficiencia de las celdas solares, reduciendo principalmente el factor de llenado y la corriente de corto circuito.

La R_s puede ser causada por tres causas: el movimiento de corriente a través del emisor y la base del dispositivo; la resistencia de contacto entre el contacto metálico-semiconductor; y la resistencia de los contactos metálicos superior y posterior. El mayor impacto de esta resistencia es en FF, aunque a valores altos también afecta la corriente de corto circuito. Para la resistencia shunt la causa de la energía perdida, se debe a los defectos de fabricación, este efecto se nota a valores bajos de resistencia shunt además de que disminuye la corriente que fluye a través de la estructura.

Recombinación.

La recombinación es un aspecto importante en el funcionamiento de dispositivos optoelectrónicos, ya que los electrones, una vez excitados a niveles de conducción y que crean los huecos correspondientes en el nivel de valencia, vuelven a su estado fundamental u ocupan un estado sin hacer algo útil. De esta manera un electrón puede ceder su energía a través de tres mecanismos [22].

- Recombinación radiativa: La recombinación radiativa es el mecanismo que implica la emisión de un fotón al recombinarse un electrón con un hueco.

$$R^R = \left(\frac{g_{th}^R}{n_i^2} \right) (np_0 - n_0p_0) = \frac{n-n_0}{\tau_n^R} \dots \dots \dots (12)$$

$$R^R = \frac{p-p_0}{\tau_p^R} \dots \dots \dots (12.1)$$

Siendo los tiempos de vida radiativa de electrones y huecos:

$$\tau_n^R = \left[\frac{p_0 g_{th}^R}{n_i^2} \right]^{-1} \dots \dots \dots (12.2)$$

$$\tau_p^R = \left[\frac{n_0 g_{th}^R}{n_i^2} \right]^{-1} \dots \dots \dots (12.3)$$

- Recombinación de Shockley-read-hall: cuando un electrón cede su energía mediante la emisión de fonones, este mecanismo involucra los estados dentro de la banda de energía.

$$R^L = \frac{V\sigma_n\sigma_p N_T (np_0 - n_0p_0)}{\sigma_p(p_0+p_1) + \sigma_n(n+n_1)} = \frac{n-n_0}{\tau_n^L} \dots \dots \dots (13)$$

$$R^L = \frac{p-p_0}{\tau_p^L} \dots \dots \dots (13.1)$$

Siendo los tiempos de vida S-R-H de electrones y huecos:

$$\tau_n^L = \left[\frac{V\sigma_n\sigma_p N_T p_0}{\sigma_p(p_0+p_1) + \sigma_n(n+n_1)} \right]^{-1} \dots (13.2) \quad \tau_p^L = \left[\frac{V\sigma_n\sigma_p N_T n_0}{\sigma_p(p_0+p_1) + \sigma_n(n_0+n_1)} \right]^{-1} \dots (13.3)$$

- Recombinación Auger: Implica la transferencia de su energía a otro electrón o hueco.

La recombinación de Auger se puede dividir en seis procesos (figura 5). En los procesos a y b se muestra un electrón o un hueco energéticos en la banda de conducción y de valencia respectivamente, que se relajan en el borde de la banda y generan un par electrón-hueco con la energía liberada, se les conoce como ionización por impacto. Los procesos c-f, en si no hay una recombinación, que un par electrón-hueco no desaparece, sino más bien son procesos de asistencia para que los portadores carga entren o salgan de estados localizados, es decir causan atrapamiento o desencadenamiento.

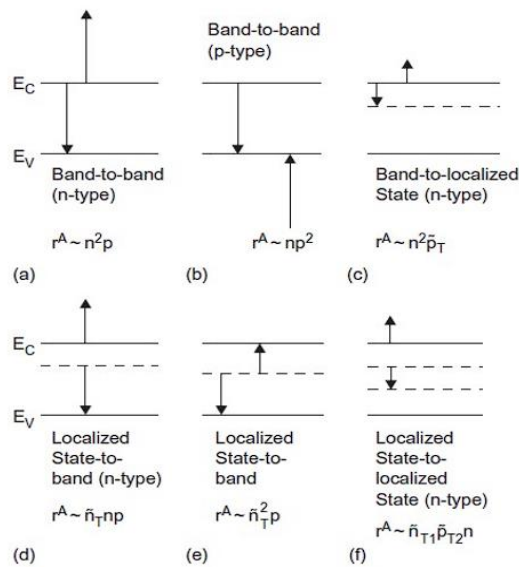


Figura 5. Tipos de recombinación AUGER.

Otro tipo de recombinación que puede tener lugar es la recombinación superficial, cualquier defecto o impureza dentro o en la superficie del semiconductor promueve la recombinación. Puesto que la superficie de la celda solar representa una grave alteración de la red cristalina, las superficies de la célula solar son, particularmente, un sitio de alta recombinación.

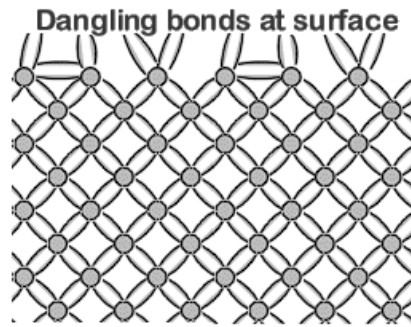


Figura 6. Enlaces colgantes en la superficie.

Como se ha explicado la recombinación es lo contrario a la generación, por lo que se debería evitar en un dispositivo fotovoltaico, para que el electrón y el hueco al ser generados por la interacción con el haz de luz y seleccionados por un campo eléctrico o efectivo, eviten los mecanismos de a) Recombinación en bruto 1,4 y 5 (bulk), b) Recombinación en contacto superior 2 y 3 c) Recombinación en el contacto inferior 6 y 7 (figura 7).

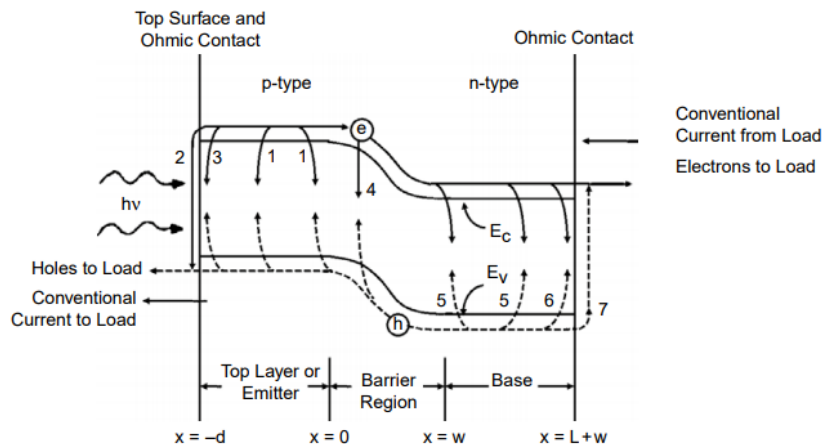


Figura 7. Diagrama de bandas de una unión PN y los mecanismos de recombinación.

La recombinación en los contactos ocurre , cuando un electrón que evito los mecanismos en bruto de recombinación (SRH, Auger Y radiativa) para generar una corriente es mal direccionado para irse al contacto del ánodo y se recombina con un hueco que fue bien direccionado, lo mismo ocurre con un hueco pero en el cátodo, por lo que grandes rasgos el número de electrones disponibles para generar una corriente o trabajo útil en un circuito externo es igual al número total de electrones que llegan al cátodo menos lo electrones perdidos por la recombinación con los huecos[22].

Procesos de transporte en interfaces.

La estructura de un dispositivo semiconductor, no solo se compone de un solo material para la fabricación del dispositivo, ya que para absorber en diferentes rangos de longitudes de onda se necesita tener diferentes materiales, por ejemplo, otros materiales pueden servir como capa bloqueadora, pasivadora, selectiva, absorbente y emisora.

Existen 3 tipos de uniones en semiconductores que se muestran en la figura 8 el tipo de heterounión dependerá de los parámetros de los materiales empleados, cuando 2 semiconductores diferentes con diferentes anchos de banda, afinidad electrónica y niveles de fermi, se utiliza la regla de la afinidad electrónica.



Figura 8. Tipos de uniones.

Por lo que cuando una unión es formada, el nivel de fermi debe coincidir en ambos semiconductores y el nivel de vacío es paralelo a lo largo de la banda de conducción y es continuo. En la unión se forma una barrera de potencial V_{bi} que es igual a la suma de los voltajes V_{bin} y V_{bip} , donde estos potenciales electrostáticos son de los semiconductores tipo n y p [23]. Las ecuaciones de las regiones de carga espacial se muestran en:

$$x_1 = \left[\frac{2N_{A2}\epsilon_1\epsilon_2(V_{bi}-V)}{qN_{D1}(\epsilon_1N_{D1}+\epsilon_2N_{A2})} \right]^{\frac{1}{2}} \dots (14) \quad x_2 = \left[\frac{2N_{D1}\epsilon_1\epsilon_2(V_{bi}-V)}{qN_{A2}(\epsilon_1N_{D1}+\epsilon_2N_{A2})} \right]^{\frac{1}{2}} \dots (15)$$

Las características de corriente-voltaje de heterouniones dependerá del tipo de unión para que cierto mecanismo de transporte sea el que gobierne en la estructura. Estos procesos se les conoce como mecanismos de transporte de interfaz [figura 9] y se dividen como [22]:

- Emisión Termiónica.
- Emisión de campo térmico mejorado.
- Tuneleo por multipasos.
- Tuneleo directo.
- Atrapamiento y emisión.
- Recombinación en interfaz asistida por trampas.
- Inyección de portadores minoritario

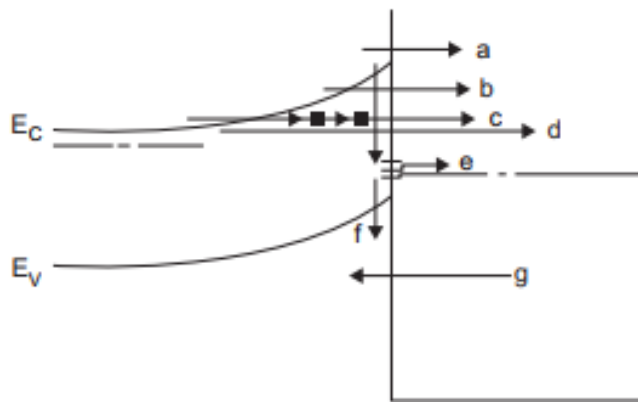


Figura 9. Tipos de transporte a) termiónico b) emisión de campo c) tuneleo asistido d) tuneleo directo e) atrapamiento y emisión f) recombinación

Celdas Solares.

Las celdas solares son dispositivos que convierten la energía electromagnética (haz de luz) en energía eléctrica. Los pasos de conversión son [22]:

- Absorción de luz.
- La conversión del estado excitado en pares de portadores libre.
- Mecanismo de transporte.
- Absorbedor al estado fundamental.

La fuente de energía de las celdas solares proviene de los fotones del sol, a diferentes longitudes de onda, pero esta energía dependerá de factores como la latitud, atmosfera etc. El espectro estándar AM1.5G (figura 10) está basado en la norma G173 para aplicaciones terrestres que incluyen luz directa y difusa (1000W/m²).

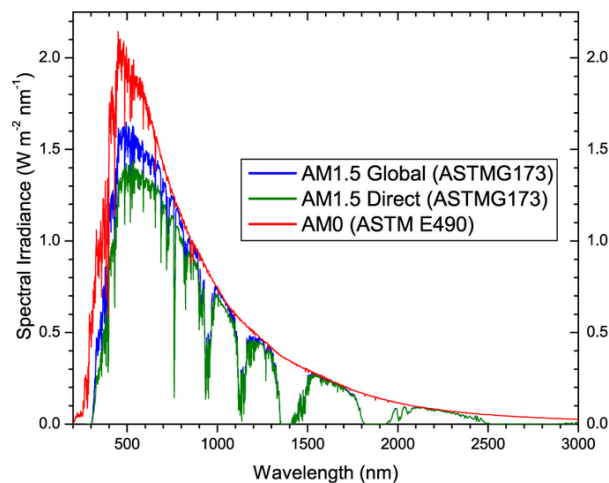


Figura 10. Espectro solar para aplicaciones

La potencia total P_{In} por área que incide en una celda solar para el espectro de fotones Φ_0 es la integral de la energía entrante por tiempo por área por ancho de banda de todo el espectro de fotones.

$$P_{In} = \int_{\lambda} \frac{hc}{\lambda} \Phi_0(\lambda) d\lambda \dots \dots \dots (16)$$

Φ_0 , expresado como fotones / tiempo / área / ancho de banda. h es la constante de Planck y c es la velocidad de la luz.

La potencia eléctrica P-out por área producida por la celda operando al voltaje V y entregando la corriente I como resultado de esta energía solar entrante es el producto de la corriente I por V dividida por el área de la celda.

La densidad de corriente J definida como I dividida por el área de la celda es $P_{out} = JV$

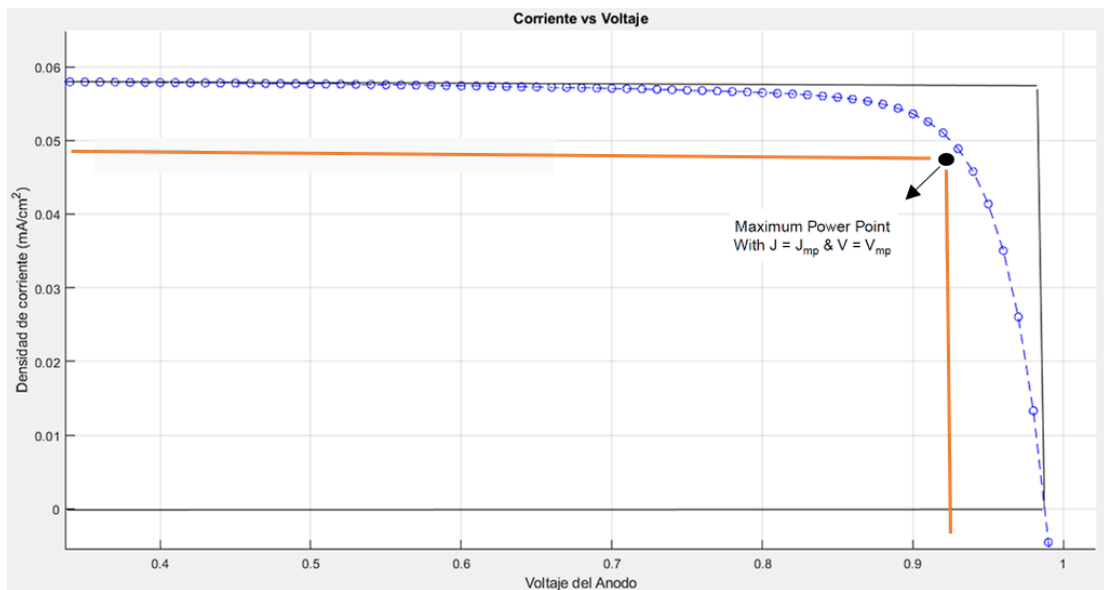


Figura 11. Diagrama J-V con los valores de Jsc, Voc, As.

Los puntos etiquetados como Jsc y Voc representan, respectivamente, los casos extremos de ausencia de voltaje producido entre el ánodo y el cátodo (es decir, la celda solar iluminada está en cortocircuito) y de no fluir corriente entre el ánodo y el cátodo (es decir, la luz solar iluminada). la celda está en circuito abierto.

La máxima potencia

$$P_{mp} = J_{mp} \cdot V_{mp} \dots\dots\dots (17)$$

Para calcular la eficiencia de la celda solar se asume que el área de impacto de los fotones y el área que genera la corriente es la misma.

$$\eta = \frac{J_{mp} \cdot V_{mp}}{P_{IN}} = \frac{A_S}{A_C} \dots\dots\dots (18)$$

La característica J-V de forma ideal sería rectangular y entregaría una densidad de corriente constante J_{sc} hasta el voltaje de circuito abierto V_{oc} . El factor de llenado viene dado por:

$$FF = \frac{J_{mp} V_{mp}}{J_{sc} V_{oc}} \dots\dots\dots (19)$$

Fotodetectores.

Los fotodetectores o fotodiodos son dispositivos que son usados para la detección de luz. Utilizan la fotoexcitación de los portadores de carga como principio de funcionamiento. Estos dispositivos usualmente envían una señal electrónica: Voltaje o corriente eléctrica y esta salida es proporcional a la potencia óptica. La estructura básica de una celda solar y un fotodiodo es esencialmente la misma, pero con diferente aplicación y por lo tanto diferente condición. Para un fotodiodo se busca el máximo de linealidad y el mínimo de respuesta.

La alta velocidad de operación dependerá de la zona de deplexion, la cual debe permanecer delgada para reducir el tiempo transitorio. por otro lado, para aumentar la eficiencia cuántica, película emisora debe ser lo suficientemente delgada para permitir que la fracción de la luz incidente sea absorbida, por lo que existe un equilibrio entre el tiempo de respuesta y la eficiencia cuántica [23].

La eficiencia cuántica es el número de pares electrón-hueco generados por fotones incidentes.

$$\eta = \left(\frac{I_p}{q}\right) / \left(\frac{P_{opt}}{h\nu}\right) \dots\dots\dots (20)$$

I_p es la corriente fotogenerada.

P_{opt} es la potencia óptica.

$h\nu$ es la energía del fotón.

Un parámetro asociado es la responsividad, la cual es la razón de la fotocorriente y la potencia óptica con unidad A/W.

$$\mathcal{R} = \frac{I_p}{P_{opt}} [A/W] \dots\dots\dots (21)$$

Por último, la velocidad de respuesta está limitada por la combinación de tres factores: la difusión de los portadores, tiempo de arrastre de zona de empobrecimiento y la capacitancia de la unión.

CAPITULO II

Simulación de Monocapa Si/InGaN y Si/GaN para aplicaciones optoelectrónicas.

Las simulaciones que se han realizado con materiales III-nitruros, se han evaluado en numerosos artículos, debido a los límites teóricos y propiedades optoelectrónicas únicas que presentan estos materiales; sin embargo, el comportamiento ideal, muestra que las soluciones de las ecuaciones numéricas de la física de dispositivos semiconductores se han evaluado en condiciones irreales. En este capítulo, pretendemos conocer los parámetros característicos de las heterouniones Silicio/InGaN y Silicio/GaN, a través del software de simulación Silvaco Atlas. En este sentido, las soluciones numéricas y gráficas incorporan los datos físicos de crecimientos de películas III-nitruros, por la técnica de crecimiento ALD principalmente..., por último, se obtienen las configuraciones necesarias para el depósito de las películas delgadas InGaN y GaN en silicio para fotodetección o efecto fotovoltaico.

Metodología e Introducción.

En el software Silvaco Atlas se llevó a cabo una metodología para la simulación de las heteroestructuras Si/GaN, Si/InGaN mostrada en la figura 12, en donde se especifican los datos de entrada; Estructura del dispositivo, Materiales utilizados, Contactos, Datos experimentales, Haz de luz y Modelos físicos, Así como los de salida (análisis de resultados); análisis I-V, Diagrama de bandas, Densidad de corriente, Fotocorriente, Extracción de parámetros solares, eficiencia cuántica y densidad de defectos.

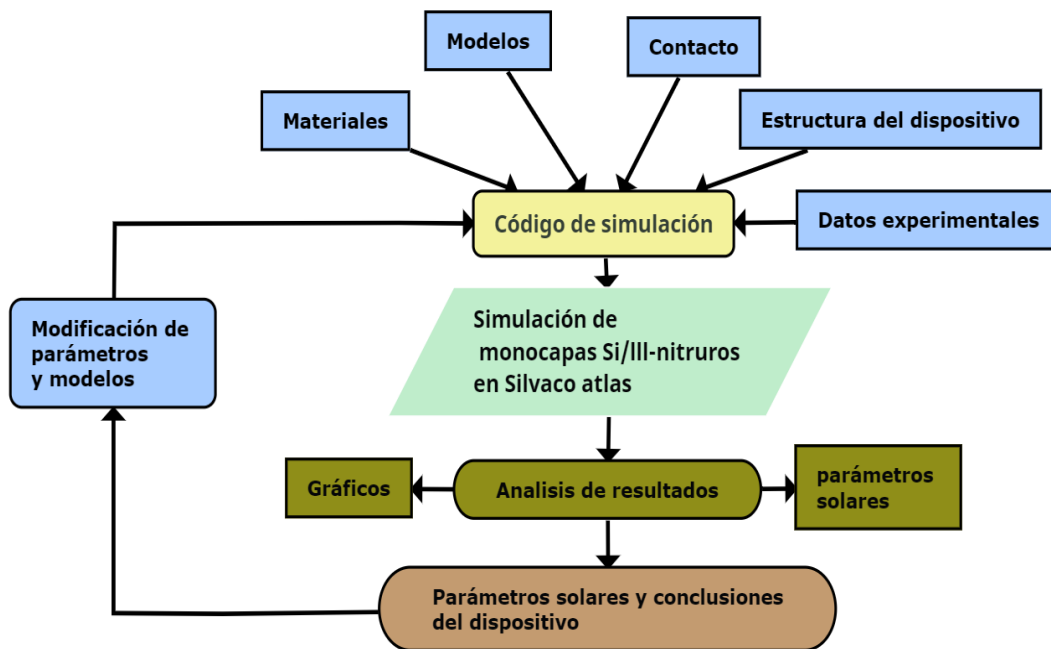


Figura 12. Diagrama de flujo de simulación.

Una de las propuestas que se ha hecho en el estudio de estructuras III-nitruros [24], es utilizar como base absorbente el silicio, material que se ha empleado en el crecimiento de materiales III-V para realizar dispositivos tándem [2]. En este trabajo se recurre al software de simulación de dispositivos semiconductores Silvaco atlas TCAD, para conocer los aportes ópticos, eléctricos y funcionales, que tienen las capas delgadas (nanómetros) de los III-nitruros (GaN, InGaN e InN) sobre una capa absorbente de silicio tipo n con baja concentración de

donadores, tomando en cuenta; datos experimentales del método de fabricación ALD. Una vez finalizada la simulación se hace un análisis de los resultados de salida para la retroalimentación del programa, ya sea para corregir algún error en el código de simulación u obtener datos más amplios acerca del dispositivo como lo son; El espesor de los semiconductores, variación del dopaje N y P, concentración de indio en el elemento ternario, habilitación de modelos y la incorporación de ecuaciones lineales para el cálculo de afinidad electrónica y ancho de banda.

Parámetros de simulación.

Los parámetros puntuales usados en la simulación de dispositivos optoelectrónicos con la heteroestructura Si/III-nitruros, son modificados de los valores, por defecto que tiene el simulador; Los espesores, tipo de semiconductor y la concentración de portadores de las películas delgadas fueron variadas, para determinar, la funcionalidad y rendimiento.

Tabla 2. Parámetros de simulación

Datos	SILICIO	TITANIO	GaN	InGaN
Función optoelectrónica	Absorbente	Contacto metálico	Emisor	Emisor
Espesor [um]	80	X	0.005, 0.010 Y 0.025	0.005, 0.010 Y 0.025
Concentración de portadores [cm-3]	TIPO N con una concentración = 1e15	X	TIPO N y P con una concentración=1e17	Tipo P con una concentración de 1e17
Ancho de banda [eV]	1	X	3.42	Ancho de Banda= ((1.0 *(comp.)) +((3.42) *(1-comp.)) -((3.8) *(comp.) *(1-Comp.))
Afinidad electrónica [eV]	4	X	4.1	Afinidad electrónica=((Comp.) *(5.8)) +((1-Comp.) *(4.1))

En la tabla 2 se muestra la función optoelectrónica que tienen los semiconductores; el silicio como capa absorbente, el titanio como contacto metálico [25] y las capas de III-nitruros como emisores, además se modificaron los valores de ancho de banda y de afinidad electrónica. Estos últimos parámetros, se añadieron debido a que los datos y modelos usados para el cálculo no son actuales, ya que por ejemplo el ancho de banda del nitruro de indio paso de ser de 1.8 eV, para los primeros reportes a 0.6 eV para recientes investigaciones, para la técnica de fabricación de CVD. En técnica de fabricación ALD se encontró que el ancho de banda del InN se aproximaba a 1 eV [4]. En el laboratorio CIDS, el semiconductor tipo P del nitruro de galio, nitruro de galio indio y nitruro de indio, tendría que ser compensado con magnesio, algo que con la técnica ALD, no se ha encontrado reporte, por lo que conocer las repercusiones que tendría el tipo de semiconductor (N o P), fue de interés para determinar, los mejores resultados en la simulación, para llevar a cabo la fabricación del dispositivo. Se hicieron simulaciones con concentraciones para p-GaN de $1e15$, $1E17$ y $1e19$ cm^{-3} , ya que en teoría una mejor forma de tener fotocorriente es a través de una unión P-N, hecho que se demostró en este trabajo.

Parámetros ópticos.

En el manual de Silvaco, enfatizan en la importancia de conocer los parámetros ópticos en simulaciones de dispositivos optoelectrónicos de materiales III-V; índice de refracción (n) y coeficiente de extinción (k), afortunadamente estos datos fueron adquiridos en laboratorio por los asesores de esta tesis [4], (figura 13, 14 y 15).

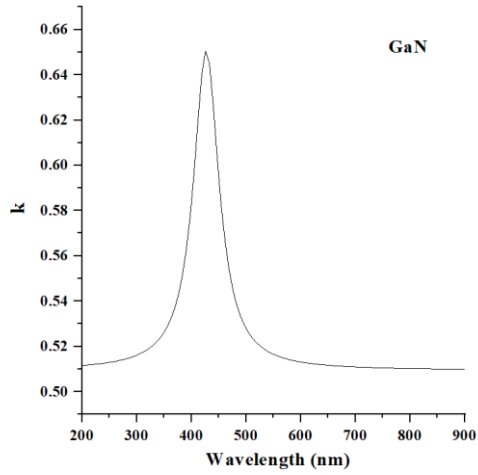


Figura 13. Coeficiente de extinción de GaN

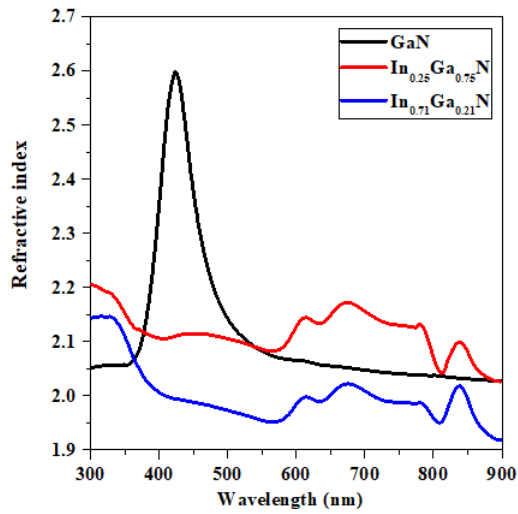


Figura 14. índice de refracción de las películas GaN e InGaN con composición del 25 y 71 % de InN

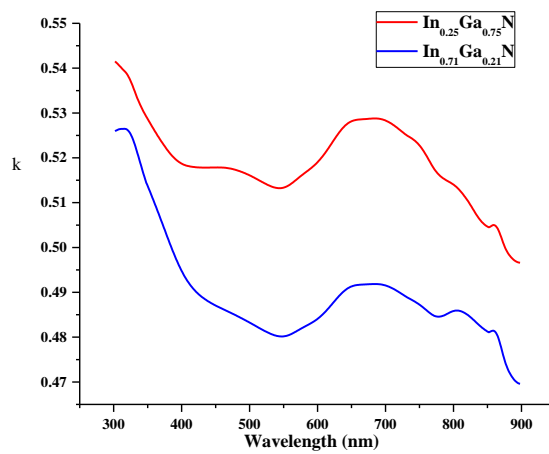


Figura 15. Coeficientes de extinción de las películas de InGaN con 25 y 71 % InN

Se Midió la reflectividad en las monocapa GaN , $In_{25}Ga_{75}N$, $In_{71}Ga_{29}N$ crecidas en silicio a diferentes longitudes de onda. Se conocieron los valores ópticos n y k (figura 16). La forma en que estos datos se incorporan en la simulación es en formato .txt en una tabla con 3 columnas.

α	n	k
200	2.07516	0.5115
214	2.06964	0.51185
228	2.05375	0.5122

Figura 16. Valores ópticos de N y K.

De esta manera se incorporan los datos ópticos a los modelos de las ecuaciones generales de dispositivos semiconductores. En Silvaco atlas, hay 2 modelos distintos, que se calculan simultáneamente en cada punto de una polarización [26], Estos son:

- El haz de luz usa el componente real del índice de refracción (n) para calcular la intensidad óptica en cada punto de la malla de simulación.
- Modelo de absorción o fotogeneración, utiliza el componente imaginario del índice de refracción (k), para calcular una nueva concentración de portadores en cada punto de la red.

Ancho de banda del nitruro de galio indio.

Como ya se mencionó, el ancho de banda del InN, se determinó en 1eV en pruebas en laboratorio en el equipo ALD, por lo que el valor calculado en Silvaco atlas, para este parámetro del elemento ternario $In_xGa_{1-x}N$ no sería correcto. En el capítulo 1 se menciona la ecuación 2 para determinar el ancho de banda para diferentes composiciones de InN, por lo que para las composiciones del 25% y 71% de In se tiene:

$$E_g(.25) = In_{.25}Ga_{.75}N = (0.25)(1) + (1 - .25)(3.42) - 1.43(0.25)(1 - .25) = 2.49eV$$

$$E_g(.71) = In_{.71}Ga_{.29}N = (0.71)(1) + (1 - .71)(3.44) - 1.4(0.71)(1 - .71) = 1.407eV$$

Afinidad electrónica para InGaN.

La afinidad electrónica que se calcula para el nitruro de galio indio en Silvaco atlas usa valores de relación de desplazamiento del borde de banda.

$$\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} = \frac{0.7}{0.3} \dots\dots\dots (22)$$

Esta relación se ajusta muy bien a heteroestructuras InGaN /GaN como se menciona en [27]. En la figura (17) nos muestra como esta relación repercute en un diagrama de bandas.

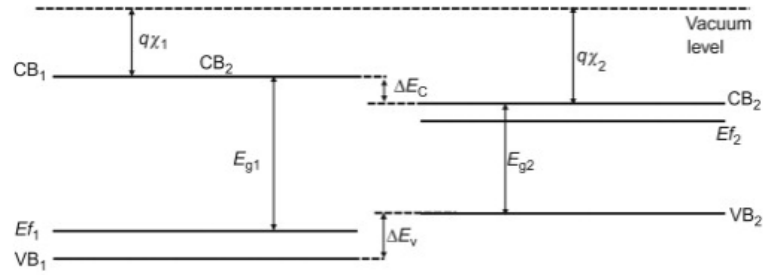


Figura 17. Diagrama de bandas de una heteroestructura.

Siendo: ΔE_c , la diferencia entre las bandas de conducción

ΔE_v , en la banda de valencia.

E_{g1} y E_{g2} son los anchos de banda de los materiales.

χ_1 y χ_2 son las afinidades electrónicas de cada material.

El problema con el ajuste a través de esta relación es que funciona bien en estructuras GaN/InGaN, pero al incorporar silicio a la estructura esta relación no concuerda y al analizar el diagrama de bandas, para observar la afinidad electrónica no corresponde a los valores que se han reportado. Para acercarse a los valores se recurre a una aproximación lineal.

El cálculo de la afinidad electrónica para $In_{0.25}Ga_{0.75}N$ y $In_{0.71}Ga_{0.29}N$ con la aproximación lineal:

$$\chi(0.25) = \chi(In_{0.25}Ga_{0.75}N) = ((0.25)(5.8)) + ((1 - 0.25)(4.1)) = 4.5250\text{eV}$$

$$\chi(0.71) = \chi(In_{0.71}Ga_{0.29}N) = ((0.71)(5.8)) + ((1 - 0.71)(4.1)) = 5.3070\text{eV}$$

La comparativa del diagrama de bandas que utiliza Silvaco y los cálculos teóricos se muestran en la siguiente figura 18.

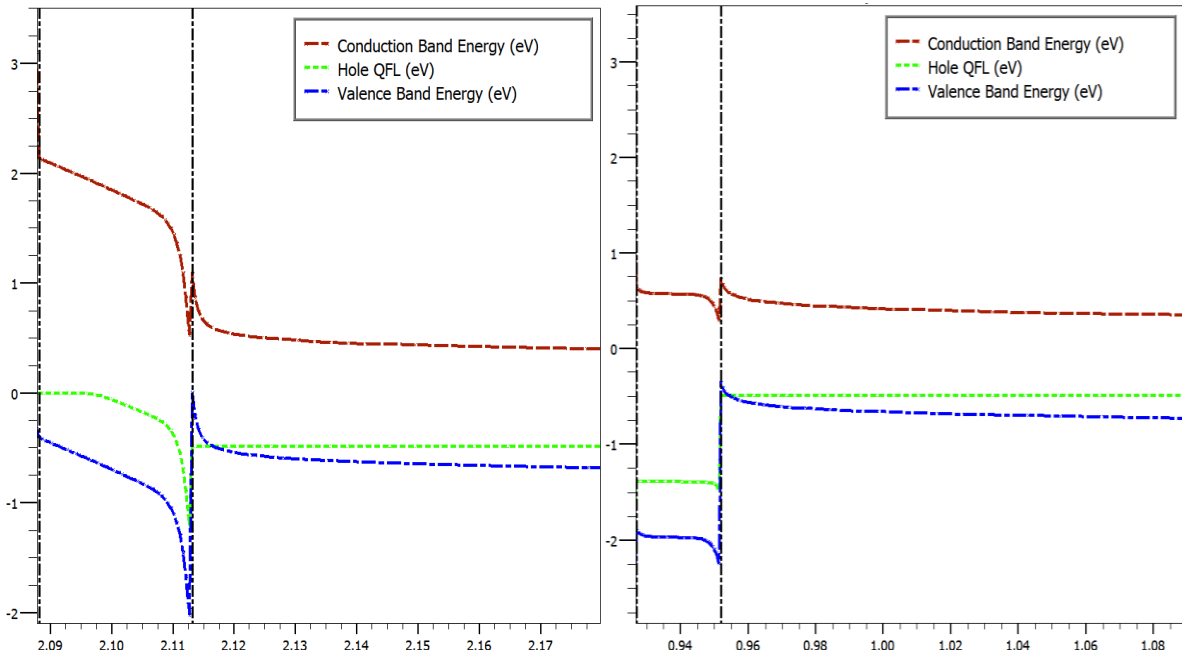


Figura 18. Comparación de diagrama de banda con los a) aproximación lineal. y b. valores definidos en Silvaco

Modelos específicos utilizados para la simulación de dispositivos optoelectrónicos.

Modelos de defectos

Como ya se ha mencionado en el capítulo 1, los materiales semiconductores exhiben defectos en las interfaces, superficiales y a granel. Estos estados trampa modifican el comportamiento físico de una celda solar.

De acuerdo con las pruebas realizadas de las películas III-nitruros en Silicio, se tiene una estructura policristalina, por lo que es importante incluir los modelos de estados energéticos dentro de la brecha entre la banda de conducción y de la valencia, para aproximar las simulaciones con los datos experimentales. En Silvaco atlas se tienen los modelos para poder incluir las trampas.

Estados en la interfaz.

La manera en que Silvaco, añade los modelos de trampas en la interfaz es a través de 2 sentencias INTTRAP e INDEFECTS; En la primera de ellas las trampas se colocan en niveles de energía discretos dentro de la brecha de la banda y en la segunda se colocan estos defectos de manera continua a través del ancho de banda y Dependiendo de la información que se tenga del dispositivo se usa un modelo u otro.

Para determinar la densidad de trampas y que tipo sean (aceptor o donador) se realizan pruebas eléctricas C-V, y para la ubicar los niveles trampa discretos (INTTRAP) se debe tomar el siguiente ejemplo:

```
Inttrap e. level=0.49 acceptor density=2.e10 degen=12 sign=2.84e-15 sigp=2.84e-14
```

Siendo estos comandos:

Tabla 3. Comandos para especificar niveles trampa en bruto.

DONOR	Especifica un nivel de trampa de tipo donador.
ACCEPTOR	Especifica un nivel de trampa de tipo aceptador.
DEGEN.FAC	Especifica el factor de degeneración del nivel de trampa utilizado para calcular la densidad.
DENSITY	Establece la densidad máxima de estados del nivel de trampa.
E. LEVEL	Establece la energía del nivel de trampa discreta.
SIGN	Especifica la sección transversal de captura de la trampa para electrones.
SIGP	Especifica la sección transversal de captura de la trampa para huecos.
TAUN	Especifica el tiempo de vida de los electrones en el nivel de trampa.
TAUP	Especifica el tiempo de vida de los huecos en el nivel de trampa.

La sentencia usada especifica la presencia de trampas y la carga total que tienen en conjunto, esta se resta del lado derecho de la ecuación de Poisson

$$Q_T = q(N_{tD}^+ - N_{tA}^-) \dots \dots \dots (23)$$

Donde N_{tD}^+ y N_{tA}^- son las densidades ionizadas de las trampas, tipo aceptador y donador, estas dependen de la densidad de trampa, la densidad y la probabilidad ionización [26]. Para el caso de múltiples trampas el software incorpora la sumatoria de estas densidades ionizadas.

Las trampas discretas también son tomadas como centros de recombinación se toma en cuenta que el donante y el aceptor emiten y capturan electrones esto modifica la tasa de recombinación en las ecuaciones de continuidad de los portadores.

Los estudios que se hicieron a las estructuras [4], se hizo el cálculo de la densidad máxima de estados del nivel de trampa y el nivel de energía de estas densidades, así que fue posible incorporar estos datos a la simulación.

Estados dentro del ancho de banda.

El modelo de densidad de estados que utiliza Silvaco para dispositivos policristalinos y amorfos se basa en el artículo de M. HACK y J.G. SHAW [28], en donde de acuerdo con pruebas experimentales con silicio policristalino y amorfo, se modelan los defectos en los semiconductores.

Los defectos y los límites de grano en el material se tratan como una densidad esencialmente uniforme de estados localizados en la brecha de la banda.

Este modelo propone cuatro bandas: dos bandas tipo cola (una banda de valencia similar a un donante y una banda de conducción similar a un aceptor) y dos bandas de nivel profundo (tipo aceptor y tipo donante) que se modelan utilizando una distribución gaussiana. La densidad de estados total es la suma de la densidad de estados tipo cola y tipo gaussiana.

$$g(E) = g_{TA}(E) + g_{TD}(E) + g_{GA}(E) + g_{GD}(E)..... (24)$$

Aquí, E es la energía de la trampa, EC es la energía de la banda de conducción, EV es la energía de la banda de valencia y los subíndices (T, G, A, D) representan los estados de cola (Tail), gaussiano (nivel profundo), aceptor y donante, respectivamente. En Silvaco, la declaración DEFECTS se utiliza para especificar la densidad de estados de defecto (DOS). A continuación, se muestra un ejemplo de código para un silicio policristalino.

```

DEFECTS NTA=1.12E21 NTD=4.E20 WTA=0.025 WTD=0.05 \
      NGA=5.E17 NGD=1.5E18 EGA=0.4 EGD=0.4 \
      GA=0.1 WGD=0.1 SIGTAE=1.E-16 \
      SIGTAH=1.E-14 SIGTDE=1.E-14 \
      SIGTDH=1.E-16 SIGGAE=1.E-16 SIGGAH=1.E-14 \
      SIGGDE=1.E-14 SIGGDH=1.E-16

```

Figura 19. Ejemplo de Código de para un silicio policristalino.

En la tabla (4) se muestran diferentes comandos que se incluyen en el código del programa y su explicación.

Tabla 4. Comandos para especificar trampas en diferentes niveles de energía.

SENTENCIA	DESCRIPCION
CONTINUOUS	Especifica que se utilizará el modelo integral de defectos continuos.
EGA	Especifica la energía que corresponde al pico de distribución gaussiana para estados de tipo aceptor. Esta energía se mide desde el borde de la banda de conducción.
EGD	Especifica la energía que corresponde al pico de distribución gaussiana para estados de tipo donante. Esta energía se mide desde el borde de la banda de valencia.
NGA	Especifica la densidad total de estados similares a donantes en una distribución gaussiana.
NGD	Especifica la densidad total de estados similares a donantes en una distribución gaussiana.
NTA	Especifica la densidad de estados de tipo aceptor en la distribución de la cola en el borde de la banda de conducción.
NTD	Especifica la densidad de estados similares a donantes en la distribución de la cola en el borde de la banda de valencia.

SIGGAE	Especifica la sección transversal de captura de electrones en una distribución gaussiana de estados de tipo aceptor.
SIGGAH	Especifica la sección transversal de captura para huecos en una distribución gaussiana de estados de tipo aceptor.
SIGGDE	Especifica la sección transversal de captura de electrones en una distribución gaussiana de estados de tipo donante.
SIGGDH	Especifica la sección transversal de captura para huecos en una distribución gaussiana de estados de tipo donante.
SIGTAE	Especifica la sección transversal de captura de electrones en una distribución de cola de estados de tipo aceptor.
SIGTAH	Especifica la sección transversal de captura para huecos en una distribución de cola de estados similares a aceptadores.
SIGTDE	Especifica la sección transversal de captura de electrones en una distribución de cola de estados de tipo donante.
SIGTDH	Especifica la sección transversal de captura para huecos en una distribución de cola de estados similares a donantes.
WGA	Especifica la energía de desintegración característica para una distribución gaussiana de estados de tipo aceptor.
WGD	Especifica la energía de desintegración característica para una distribución gaussiana de estados de tipo donante.
WTA	Especifica la energía de desintegración característica para la distribución de la cola de los estados de tipo aceptor.
WTD	Especifica la energía de desintegración característica para la distribución de la cola de estados de tipo donante.

Para una distribución de cola exponencial, el DOS se describe por sus densidades de intercepción de borde de banda de conducción y de valencia (NTA y NTD), y por su energía de desintegración característica (WTA y WTD). Para las distribuciones gaussianas, el DOS se describe por su densidad total de estados (NGA y NGD), su energía de desintegración característica (WGA y WGD) y su distribución de energía máxima (EGA y EGD).

Densidad de portadores atrapados

Las densidades ionizadas estados donator-like y acceptor-like (n_T y p_T respectivamente) vienen dadas por:

$$p_T = p_{TA} + p_{GA} \dots \dots (25)$$

$$n_T = n_{TA} + n_{GA} \dots \dots (26)$$

donde:

- PTA y PGA son las densidades ionizadas tipo cola y gaussiana de huecos.
- NTD y NGD son las densidades ionizadas tipo cola y gaussiana de electrones.

Recombinación de trampa de estado estacionario

Para condiciones de estado estacionario, la tasa neta de recombinación/generación es idéntica para los electrones y para los huecos. La tasa de recombinación/generación de Shockley-Read-Hall debida a los estados defectuosos.

Al igual que para los estados energéticos en la interfaz estos defectos a granel contribuyen con carga y con la modificación de la tasa de generación/recombinación y este a su vez, tiene un efecto en el comportamiento eléctrico de un dispositivo semiconductor, como ejemplo en una celda solar estos estados pueden impedir el correcto flujo de electrones y huecos lo que empeoraría el rendimiento del dispositivo pero en algunas aplicaciones estos estados mejoran el transporte de los portadores ya que estos estados asisten a los portadores carga para moverse entre la interfaz, como se mencionara en el siguiente apartado.

Incorporación de defectos en el material GaN en el software Silvaco.

Los defectos en nitruro de galio pueden estar relacionados en gran medida a la alta temperatura de crecimiento, el gran estrés que surge por el desajuste de la red con el sustrato, la gran diferencia en los coeficientes de expansión térmica de GaN y silicio, incorporación de impurezas y compensación de impurezas.

Nitruro de galio tipo N

En la sección anterior, se conoció como Silvaco evalúa los defectos en masa, para ello se necesita saber: la densidad de defectos dentro del ancho de banda, el comportamiento eléctrico de estos estados (donadores o aceptores), secciones transversales de captura (huecos-electrones) y la energía correspondiente. El nitruro de galio naturalmente contiene muchos defectos que reducen la eficiencia del dispositivo (mencionado en el capítulo 1). Los defectos dependen de la técnica de fabricación, cuidados en el trato del material y la limpieza que se tenga, por lo que, puede ser muy ambiguo saber la densidad de estados específicos del material. Hay técnicas de fabricación como CVD, que se conocen bien las imperfecciones de nitruro de galio tipo N, en pruebas de laboratorio con ambientes controlados. De acuerdo con este estudio [29], se incorporaron las densidades de defecto tipo cola y gaussianas donadora-aceptora, para aproximar la manufactura del dispositivo, sin embargo, se menciona que para la técnica ALD esto cambia y se debe determinar estos valores para aproximar mejor al dispositivo real. En la figura 20, se vislumbra el logaritmo de los estados de defecto a distintos niveles de los estados de defecto a distintos niveles de energía.

En el Software, se incorporaron tanto la densidad de defectos tipo cola, para defectos superficiales como la densidad de defectos tipo gaussiana, para defectos profundos. En las figuras, se hace notar que la densidad de defectos total consta de 2 bandas tipo cola y gaussiana.

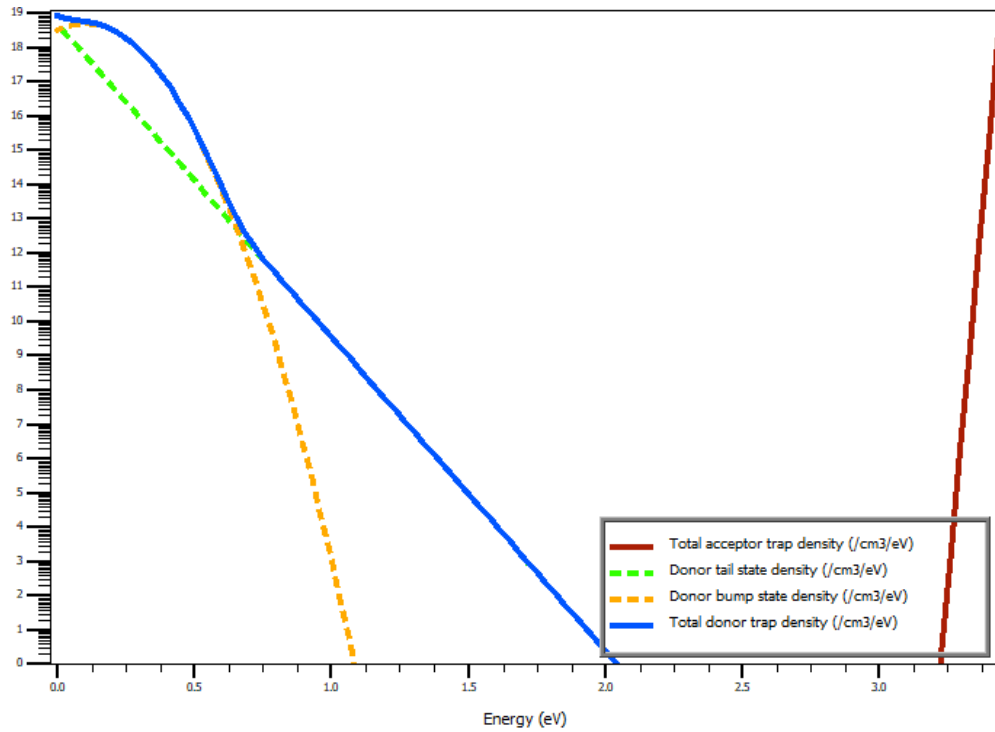


Figura 19. Densidades de estados trampa en N-Si/n-GaN.

Nitruro de galio tipo P

En el mismo artículo [29], dan una aproximación de la distribución de la densidad de estados aceptores-donadores (tipo cola y gaussiana), al incorporar Mg en GaN, para cambiar el tipo de conductividad a P. Como se menciona en el estudio, la banda de conducción tipo cola crece y la banda de valencia tipo cola se contrae a medida que se compensa el GaN con Mg.

Las densidades de estados fueron tomadas de valores característicos de materiales policristalinos teniendo como valores máximos 1×10^{18} ($1/\text{cm}^3/\text{eV}$), esto se vuelve muy conveniente ya que, de acuerdo con las pruebas que se hicieron en laboratorio, al crecer III-nitruros en Silicio con la técnica de fabricación ALD, la estructura crece con una estructura policristalina. En la figura se incorporaron los parámetros para la distribución de la densidad de estados presentada en la referencia, teniendo una banda tipo cola donadora que cae linealmente entre los rangos de energía 0-0.85 (eV) mientras que para los estados donadores hay 2 bandas gaussianas y tipo cola, que están en los rangos de energía de 1.4 -3.4 (eV).

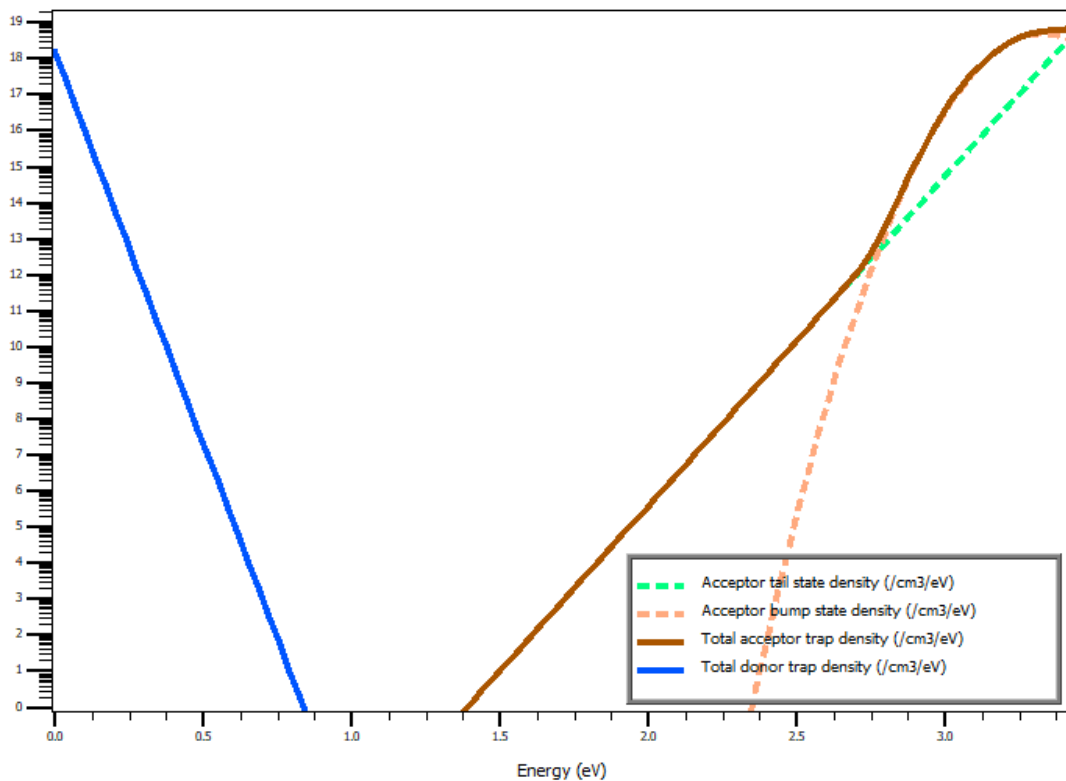


Figura 20. Densidades de estados trampa en N-Si/p-GaN.

Defectos en la interfaz Silicio-nitruro de galio

En los depósitos de nitruro de galio en Silicio, que se han hecho en el laboratorio CIDS en eco campus BUAP, por la técnica ALD, se han caracterizado las películas obteniendo la densidad de trampas en la interfaz (D_{it}) por medidas C-V (figura 21).

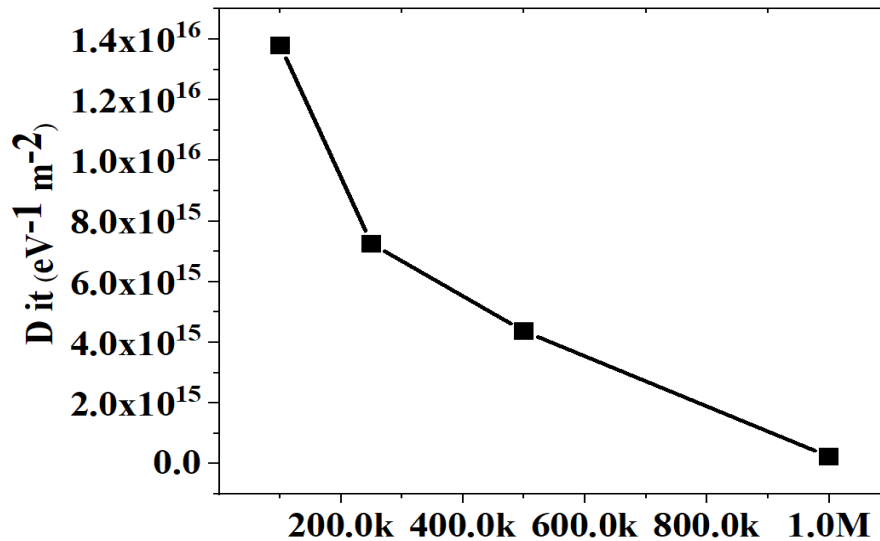


Figura 21. Densidades de estados trampa en la interfaz vs voltaje a distintas frecuencias.

En la simulación se añadieron los parámetros que se mencionaron anteriormente, de acuerdo con los datos de densidad de estados en la interfaz de la figura antes mostrada, se añadieron niveles puntuales de trampa tipo aceptor. En la figura 22, se exponen las trampas aceptoras puntuales que se utilizaron para la interfaz Si/III-nitruro.

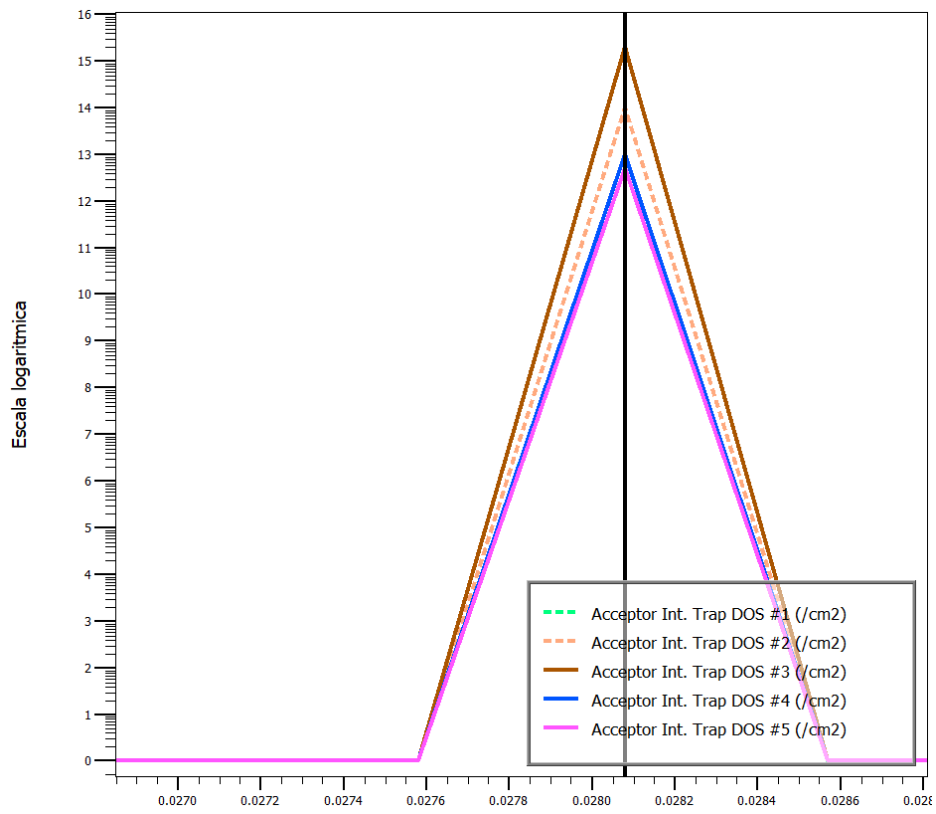


Figura 22. Densidades de estados trampa en la interfaz Si/III-nitruro

Incorporación de defectos en el material InGaN en el software Silvaco.

El elemento ternario InGaN, dependiendo de la composición de indio, su ancho de banda es sintonizable por lo que, en cuanto a los defectos se ha reportado que ha mayor cantidad de composición, mayores defectos presentan sobre todo en la interfaz. Para una heterounión con silicio es mejor que tenga un ancho de banda cercano al silicio para tratar de tener un mejor transporte en la interfaz, aunque la diferencias entre las constantes de red de estos semiconductores sea alta. Como se mencionó en la sección del nitruro de galio , la incorporación de concentración de portadores y tipo de conductividad , también afecta en la densidad de defectos y el tipo de defecto .En estas simulaciones los estados encontrados fueron del artículo [30] que solo menciona un $(In_{50}Ga_{50}N)$ intrínseco por lo que las variaciones que se hicieron fue tomando de referencia que los defectos, se presentan a mayores concentraciones de indio y mayor concentración de magnesio en el InGaN tipo P, así que se aumentó solo la densidad de estados manteniendo la ubicación de los estados .como se muestra en la siguiente imagen , para el material InGaN tipo P con una concentración del 25% de indio tienen tales defectos mientras que al aumentar la concentración al 71% solo se recorrido el nivel del estado profundo gaussiano tipo donador como se menciona en [30].

Nitruro de galio indio tipo P a 25%.

El $In_{25}Ga_{75}N$ tiene un bandgap de 2.54688eV, por lo que se ubicó el defecto profundo tipo donador a una distancia de 1.6 eV como se visualiza en la figura 23 estos estados profundos interceptan los defectos tipo cola donador y aceptor [30].

Nitruro de galio indio tipo P y N a 71%.

Para el semiconductor ternario $In_{71}Ga_{29}N$ con un ancho de banda de 1.40736Ev se ubicaron los estados tipo cola con una densidad de NTA=1.55E18 y NTD=4.93E19, mientras que los estados profundos tipo gaussiana donador se colocó el máximo nivel de energía a 1.1Ev teniendo una caída como se muestran en la figura 24.

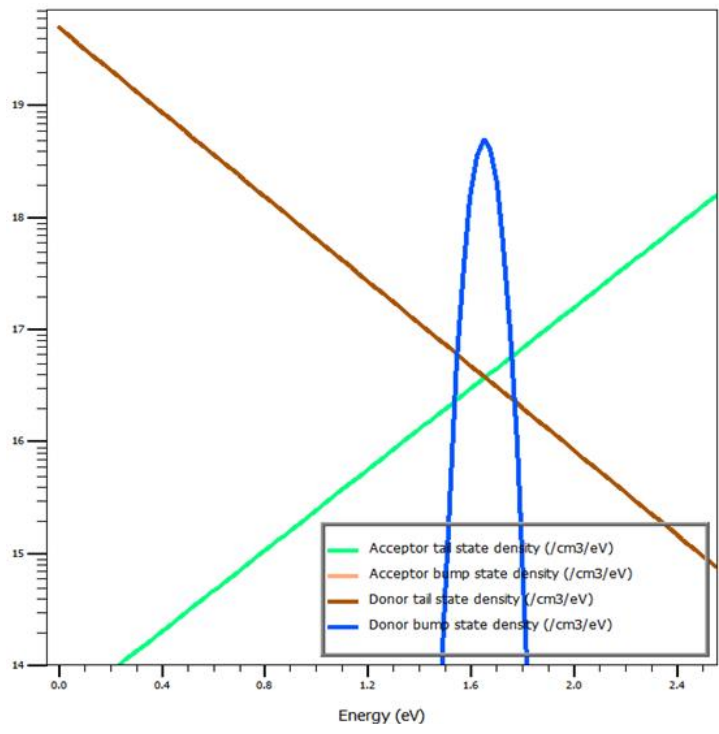


Figura 23. Densidades de estados trampa en N-Si/p- $\text{In}_{25}\text{Ga}_{75}\text{N}$.

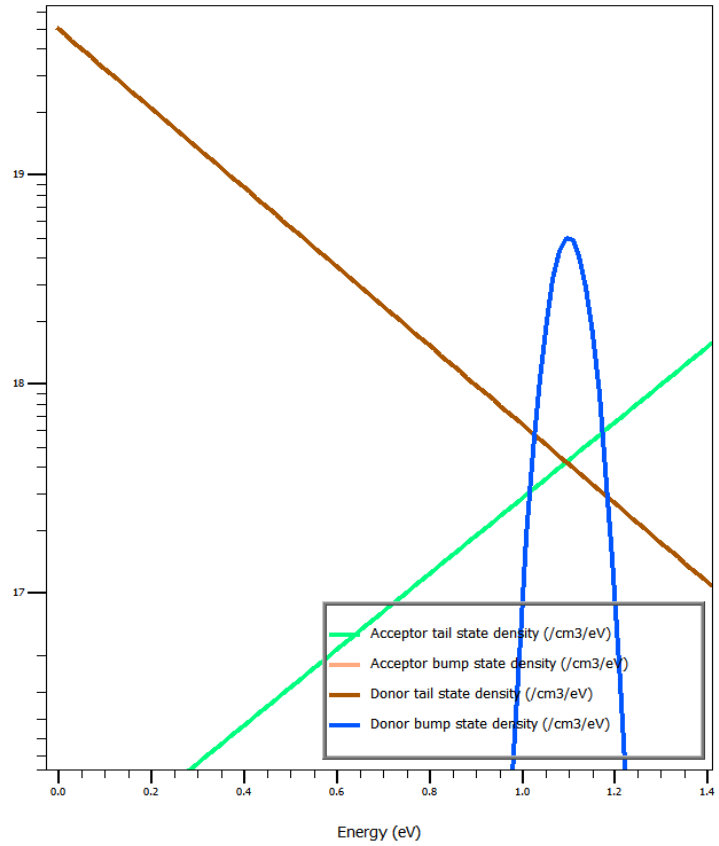


Figura 24. Densidades de estados trampa en N-Si/p- $\text{In}_{71}\text{Ga}_{29}\text{N}$.

Defectos en la interfaz Silicio-nitruro de galio indio.

En el capítulo 1, se habló sobre los defectos que presentan los materiales III-nitruros, ya que el nitrógeno en su estructura los hace tener estructuras amorfas y policristalinas dependiendo de la técnica y espesor del material. La interfaz entre el III-nitruro es de gran importancia ya que depende mucho la calidad cristalina de la capa de nitruro de galio indio, además de que es posible crecer capas sin dislocaciones, ni relajación al equilibrar la presión impuesta por el espaciado de red.

Como se muestra en la siguiente figura 25 los desajustes de red pueden darnos diferentes modificaciones por tensión y compresión, e incluso formarse otros elementos que carecen de una estructura cristalina, aunque en este estudio solo se colocan los estados trampa donador-aceptor que se pueden formar por defectos al acoplar diferentes parámetros de red.

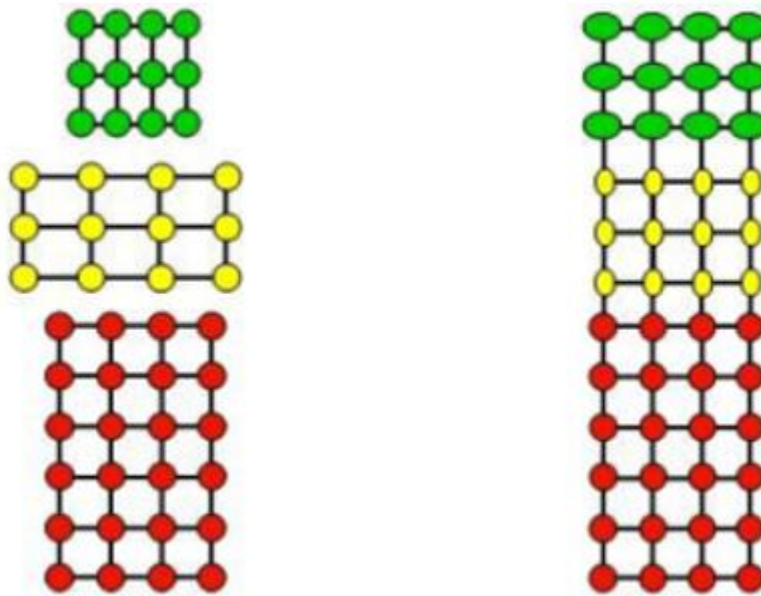


Figura 25. Redes con diferentes parámetros red con la dislocación y relajación.

Modelo de transporte en Silvaco.

Como ya se ha comentado, el estudio realizado en esta tesis se realiza con el apoyo de la simulación de dispositivos semiconductores con los materiales III-nitruros/Silicio a través del software de simulación Silvaco atlas, esto nos sirve para reconocer los parámetros óptimos fotovoltaicos y llevarlos a la fabricación con la técnica ALD.

Los dispositivos simulados con III-nitruros tienen diferentes propiedades que al unirse forman diversos tipos de heterouniones, que tendrán de igual forma diferentes medios para el transporte de cargas. Los modelos de transporte a través de las interfaces de heterouniones (se mencionaron en el capítulo pasado). En Silvaco atlas tiene estos modelos de los procesos de transporte incorporados y es posible habilitarlos. Estos modelos son: la emisión termiónica, túnel directo e indirecto y banda a banda.

El modelo de transporte de emisiones termiónicas.

La corriente dominada por emisión termiónica se da en heterouniones abruptas. Esta ecuación se aplica solo en los puntos de nodo a lo largo de la interfaz de la heterounión y tiene la forma.

$$J_n = q(1 + \delta)(v_{n+}n^+ - v_{n-}n^- \exp\left(\frac{-Q.THERMIONIC\Delta E_C}{kT_L}\right)) \dots \dots \dots (27)$$

$$J_p = q(1 + \delta)(v_{p+}p^+ - v_{p-}p^- \exp\left(\frac{-Q.THERMIONIC\Delta E_C}{kT_L}\right)) \dots \dots \dots (28)$$

Siendo:

- Q. THERMIONIC, el factor de emisión de calidad.
- J_n y j_p , las densidades de corriente de electrones y huecos.
- V_{n-} , V_{n+} , V_{p-} y V_{p+} , las velocidades térmicas de electrones y huecos en las regiones “-” y “+”.
- ΔE_c es el cambio de la banda de conducción de la región “-” a la región “+”.
- ΔE_v es el cambio en la banda de valencia “-” a la región “+”.
- δ , es la contribución debido a la emisión termiónica de campo o tuneleo.

Para activar la transmisión por emisión termiónica se requiere de la sentencia S.S THERMIONIC, además de mencionar que esta corriente termiónica, se aplica a los nodos que cubren la heterounión.

Modelo de transporte en heterouniones por tuneleo no local.

Silvaco atlas a través de los modelos de tunelamiento no local, toma en consideración una forma no lineal de la barrera de potencial mostrada en la figura 26. En el cálculo del camino del tuneleo y la contribución a la corriente de tuneleo se logra para cada energía en el cual el tuneleo elástico es posible. El modelo asume que la carga de túnel a través de toda la barrera con la fuente/sumidero en la interfaz con las regiones semiconductoras. La corriente de tunelización se evalúa para todas las energías a las que es posible la tunelización, hasta el máximo de la energía de la banda en la interfaz. La corriente en un rango de E_x a E_x+dE esta dada por la ecuación.

$$J = \frac{qkT}{2\pi^2 h^3} \sqrt{m_y m_z} \int T(E) \cdot \ln \left\{ \frac{1 + \exp \left[\frac{E_{fr} - E}{kT} \right]}{1 + \exp \left[\frac{E_{fl} - E}{kT} \right]} \right\} dE \dots \dots \dots (29)$$

Donde: $T(E)$, Es la probabilidad y se evalúa usando la aproximación WKB.
 m_y y m_z , son las masas efectivas en la dirección lateral en el semiconductor.

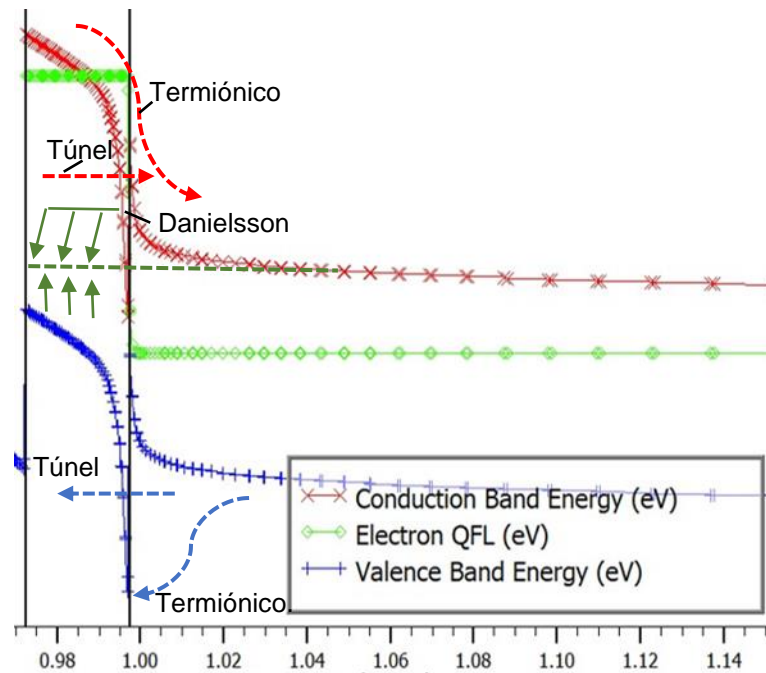


Figura 26. Barrera de potencial.

E_{Fr} y E_{Fl} , son los niveles cuasi-fermi en cada lado de la barrera.

Para habilitar este modelo que modifica la densidad de corriente se debe escribir la sentencia SIS.EL y SIS.HO, donde la barrera puede ser una capa aislante o un potencial formado entre la diferencia de los anchos de bandas entre 2 semiconductores. Luego de la incorporación de este modelo. se convierte en una tasa de recombinación o generación y se inserta en la ecuación de continuidad de corriente en cada extremo de su trayectoria de tunelización.

El Modelo de túnel asistido por trampa de barrera cuántica.

Los modelos empleados para el tuneleo asistido por trampas se divide en 2; modelo de trampas para la asistencia de túnel (básico) y el modelo de corriente de compuerta (avanzado). Para habilitar cualquiera de los dos modelos se debe recurrir a la sentencia SIS.TAT en la línea modelo.

Modelo de trampas para la asistencia de túnel no local (básico)

La tunelización asistida por trampa modela los efectos de tunelización asistida por fonones de trampa a banda para los pozos de Dirac. En campos eléctricos altos, el túnel de electrones ocurre desde la banda de valencia a la banda de conducción a través de estados de trampa o defecto, pueden tener un efecto importante en la corriente.

Para trampas de tipo donante, el término de recombinación para trampas se convierte en:

$$R_D = \frac{pn - n_{ie}^2}{\frac{TAUN}{1+T_n^{DIRAC}} \left[p + DEGEN.FAC n_{ie} \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT_L}\right) \right] + \frac{TAUP}{1+T_p^{DIRAC}} \left[n + DEGEN.FAC n_{ie} \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT_L}\right) \right]} \dots (30)$$

Para aceptores como trampas, el término de recombinación se convierte en:

$$R_A = \frac{pn - n_{ie}^2}{\frac{TAUN}{1+T_n^{DIRAC}} \left[p + DEGEN.FAC n_{ie} \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT_L}\right) \right] + \frac{TAUP}{1+T_p^{DIRAC}} \left[n + DEGEN.FAC n_{ie} \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT_L}\right) \right]} \dots (31)$$

El modelo de túnel asistido por trampa no local utiliza valores de los factores de mejora del efecto de campo Γ_n^{DIRAC} y Γ_n^{DIRAC} mencionadas en [26]. Para modelar túneles asistidos por trampas a través de heterouniones, debe usar el parámetro TAT.RELEI.

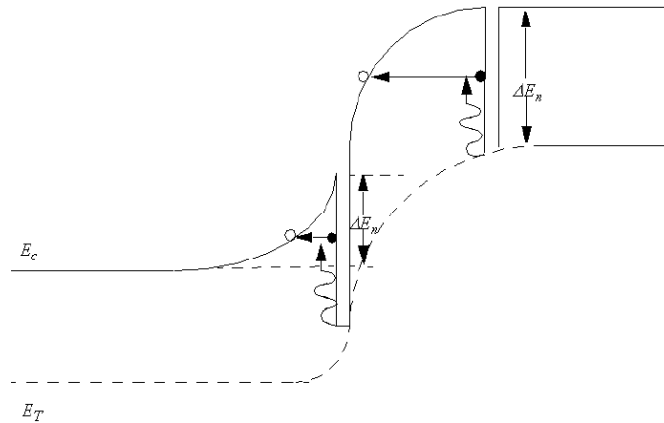


Figura 27. Representación gráfica del tunelamiento asistido por trampas.

Mecanismos de flujo de corriente para heterouniones Tipo II (Modelo Danielsson).

Una heterounión tipo II es una unión relativamente abrupta entre dos semiconductores, donde la banda de conducción del semiconductor 2 tiene una energía de electrones más baja que la banda de conducción del semiconductor 1, y la banda de energía de valencia del semiconductor 2 tiene una energía más baja que la banda de valencia de energía del material 1.

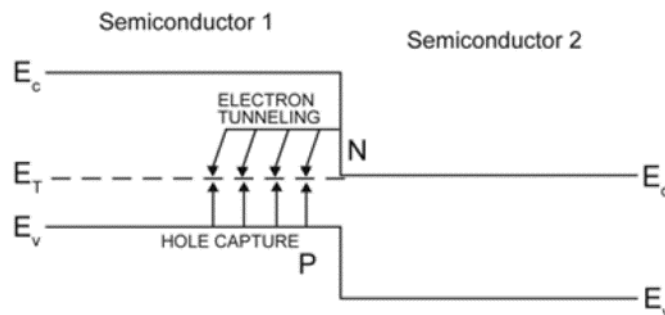


Figura 28. Representación gráfica del modelo Danielsson para la corriente por recombinación

El modelo de transporte termoiónico, los modelos de tuneleo no local y los modelos de asistencia por trampas seguirán aplicándose para el transporte del mismo tipo de portador. En ciertas condiciones de polarización y dopaje, habrá una gran concentración de electrones en el semiconductor 2 muy cerca espacialmente de una gran concentración de huecos en el semiconductor 1. Esto conducirá a un componente de corriente de recombinación, y ATLAS tiene dos modelos para este transporte vertical.

En el modelo Danielsson, las trampas ubicadas en la interfaz median; la corriente, y las densidades de portadores locales en la interfaz que se utilizan, para aplicar una corriente de recombinación de portadores mayoritarios similar a SRH a través de la interfaz. El otro modelo se basa en el modelo de tunelización asistida por trampa no local que fue mencionada con anterioridad.

El modelo danielsson asume que un centro de recombinación está localizado en la heterounión y esto da una recombinación entre electrones en el lado E_c inferior de la heterounión y huecos en el lado E_v superior de la heterounión. Como se menciona en [26], se hace el cálculo de la tasa de recombinación y esta está en función de la velocidad de recombinación y el tipo de trampa (aceptora o donadora). Si no se menciona el tipo de carga a través de las sentencias DNLS.ACC y DNLS.DON las trampas en la interfaz se asumen neutrales. Los modelos requieren que el modelo THERMIONIC esté habilitado en la instrucción INTERFACE para la interfaz tipo II.

Malla auxiliar para modelos de transporte.

Para finalizar con la explicación de los modelos de transporte por trampas como asistencia de tuneamiento, además de incorporar las sentencias antes mencionadas, necesitamos habilitar una malla de simulación auxiliar, para que se haga el cálculo en los nodos de esta, por lo que Silvaco utiliza comandos QT Región (fig.29).

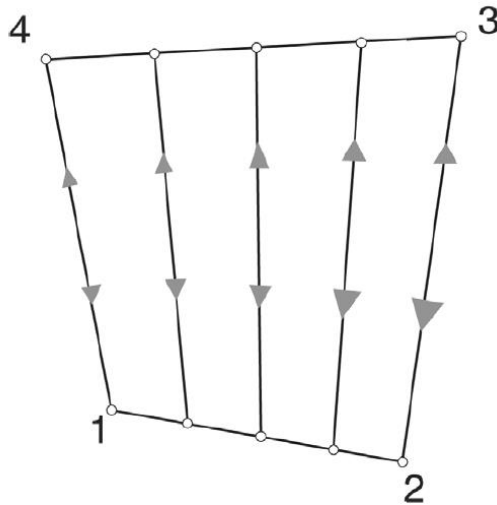


figura 29. Malla auxiliar de simulación.

A través de estas regiones podemos envolver la unión de la heterounión para tener en cuenta los modelos físicos del transporte a través de la interfaz por asistencia de trampas incorporados en Silvaco Atlas.

Análisis de resultados de la monocapa nitruro de galio para aplicaciones fotovoltaicas.

Para las simulaciones con la heteroestructura Si/GaN que se presenta en la figura 30, se tiene un semiconductor base de Silicio con un espesor de ochenta micrómetros y ancho de un micrómetro, en él está depositado abruptamente una película delgada de nitruro de galio. Los contactos de titanio fueron colocados en la parte superior del GaN y en la parte inferior del Silicio. En las simulaciones, el haz de luz no tiene interacción con los contactos, dicho de otra manera, el metal es totalmente transparente, para evitar por el momento la posible recombinación en los contactos.

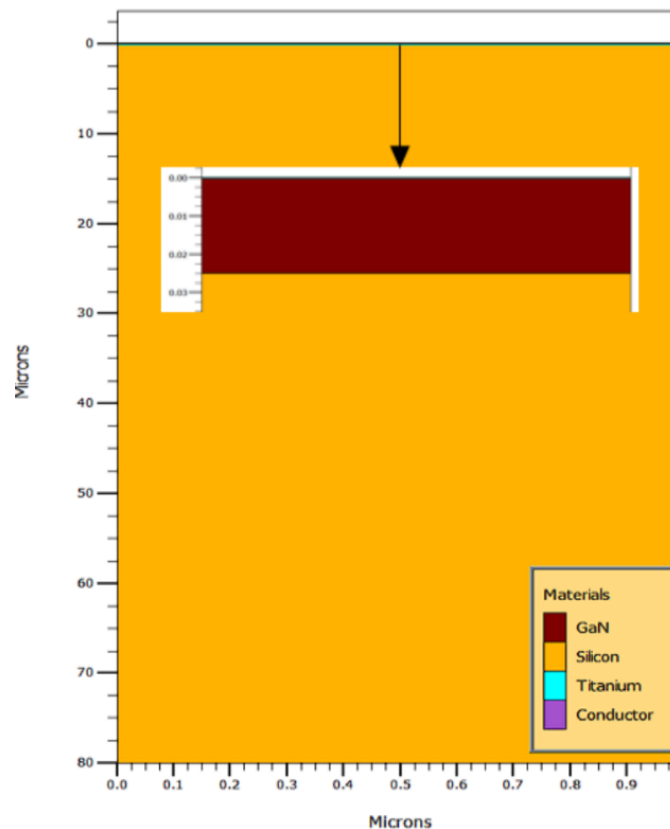


Figura 30. Estructura Si/GaN con contactos óhmicos de titanio.

La unión metal-semiconductor representadas en estas soluciones numéricas de Silvaco Atlas, son contactos óhmicos por defecto, a menos que se indique lo contrario, de manera ideal se tomó esta suposición para aprovechar de mejor manera el efecto fotovoltaico.

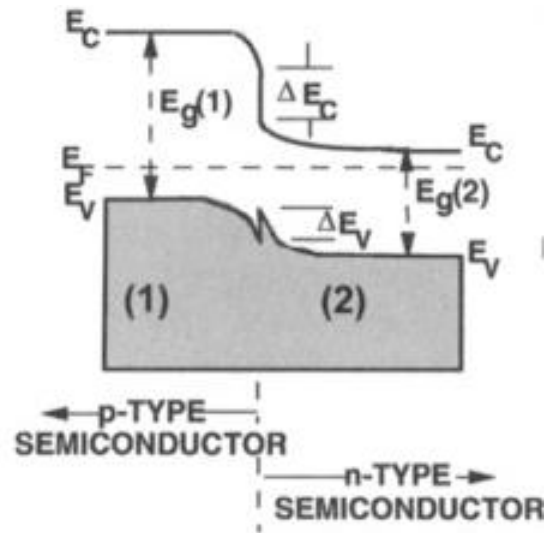


Figura 32. Heterounion tipo I.

La exacta curvatura de las bandas y la región de agotamiento, son mostradas en las figuras 33 y 34, la región de agotamiento de la estructura en oscuridad del lado del nitruro de galio es más grande que en el Silicio y en ella existe esta zona de inversión en donde hace la transición de concentración tipo P a N. Una vez que se habilita el haz de luz, este diagrama es modificado debido a la alta inyección de portadores por la interacción luz-semiconductor. La corriente que circula por la acción del mecanismo de excitación (haz de luz) y la separación de cargas (potencial interconstruido), rompe la simetría y disminuye el nivel de fermi. Esto conlleva a reducción de la región de carga espacial del lado del nitruro de galio. En la figura (b), se encuentra en la condición de inversión, ya que está en corto circuito o en una polarización de 0 V. Al variar el dopado tipo P, para el nitruro de galio de $1e15 \text{ cm}^{-3}$, $1e17 \text{ cm}^{-3}$ y $1e19 \text{ cm}^{-3}$ (figura 36), se espera una modificación en los diagramas de bandas y en la respuesta I-V con diferentes dopados. Para comparar resultados, se hizo la simulación de estas estructuras y se graficaron, notando que, conforme va aumentando el dopado tipo P crece la barrera de potencial en la interfaz y a un mayor dopado (P+), el transporte de los portadores en la unión cambia y bajo ciertas circunstancias, podría favorecer o afectar al rendimiento del dispositivo fotovoltaico.

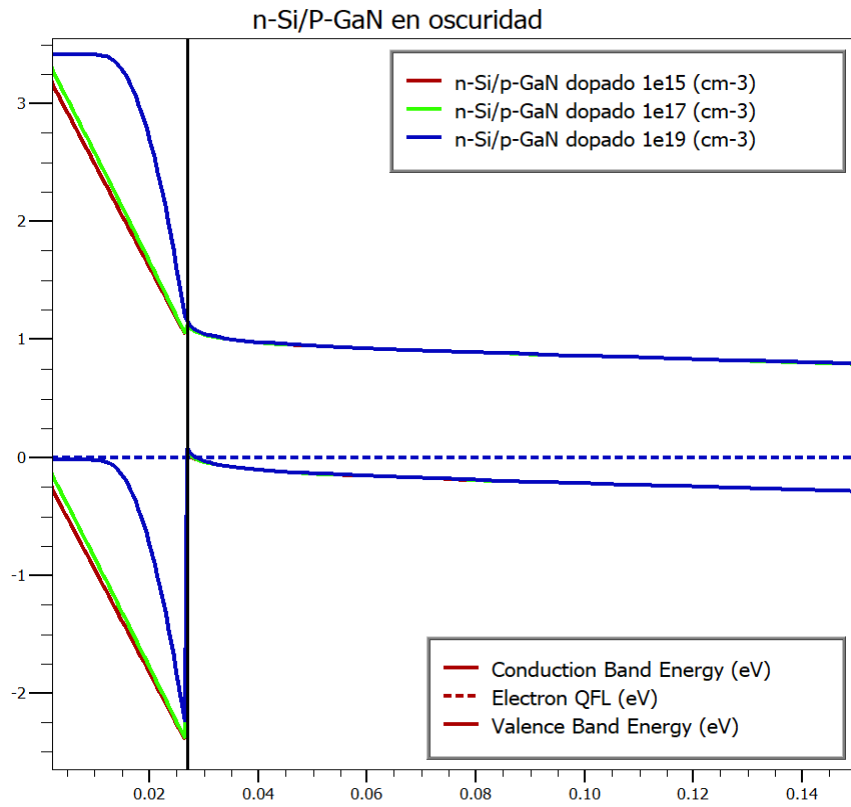


Figura 33. Diagrama de bandas de la heteroestructura Si/GaN en oscuridad

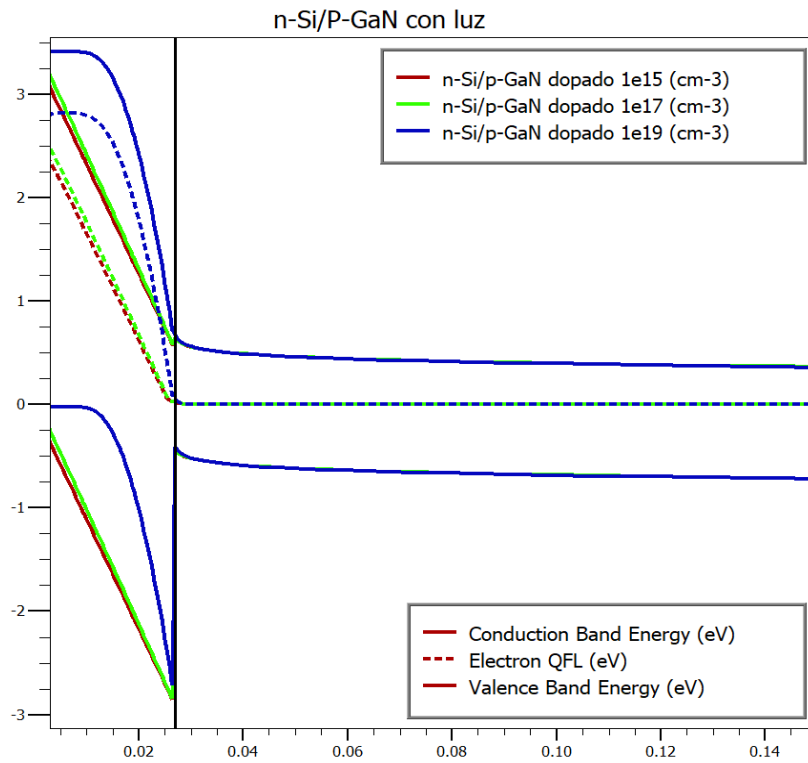


Figura 34. Diagrama de bandas de la heteroestructura Si/GaN con luz.

El mayor cambio que se nota en el diagrama de bandas es a un alto dopado, ya que la deformación de las bandas está en función de los dopados, afinidad electrónica, ancho de banda, permitividad, región de carga espacial etc. Todos estos parámetros son incluidos en los modelos de la física de dispositivos semiconductores (Ecuación de Poisson y modelos de transporte), por lo que al variar este dopado se muestra una mayor deformación en la banda de conducción y valencia, en la banda conducción; una barrera mayor y en la banda de valencia; un achatamiento en ella.

En la condición de corto circuito se obtienen las mayores corrientes posibles. Para determinar qué respuesta eléctrica se tiene cuando la iluminación incide en la estructura, se hace que la computadora resuelva numéricamente el conjunto de ecuaciones y condiciones dadas. En la respuesta I-V fig. (36), se aplicó un voltaje de -2V a 3V, teniendo una respuesta en corriente y en oscuridad característica de una unión PN, Al habilitar el haz de luz (1 sol) se tiene una fotocorriente que contribuye a la corriente total del circuito. Esto surge porque, bajo iluminación, el campo incorporado empuja los electrones fotogenerados hacia la derecha y los huecos fotogenerados hacia la izquierda, forzando así un segmento de la curva I-V del dispositivo a ubicarse en el cuadrante de potencia. De esta forma se consiguieron las gráficas representativas para una celda solar. Como se nota en las respuestas J-V variando este dopado, se tiene un cambio en la respuesta eléctrica J-V figura 35 y por lo tanto en los parámetros solares (tabla 5).

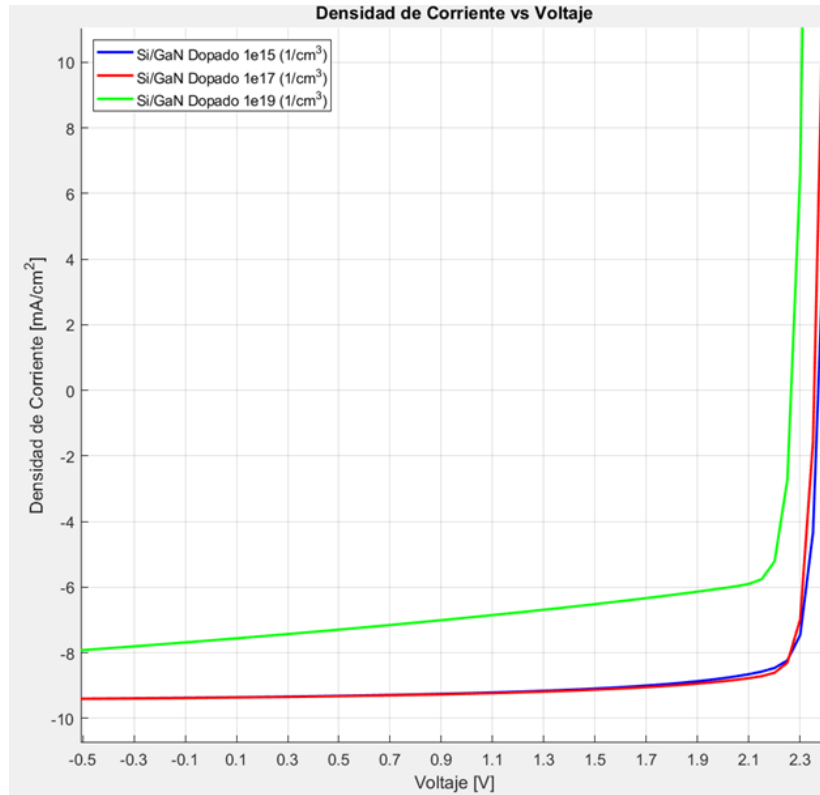


Figura 35. Densidad de corriente contra Voltaje aplicado para concentraciones de $1e15\text{cm}^{-3}$, $1e17\text{cm}^{-3}$ y $1e19\text{cm}^{-3}$ en con iluminación.

Tabla 5. Parámetros solares

Estructura	Isc (A)	Jsc (mA/cm2)	voc (V)	Pm (W)	(V)	Im (A)	FF	Potencia incidente	Eficiencia
n-Si/p-GaN $1e15\text{ (cm}^{-3}\text{)}$	9.4477 4e-011	9.44774	2.37047	1.86251 e-010	.19	8.46599 e-011	83.1642%	0.138049	13.4917%
n-Si/p-GaN $1e17\text{ (cm}^{-3}\text{)}$	9.4497 9e-011	9.44979	2.35463	1.89441 e-010	.199	8.61099 e-011	85.1391%	0.138049	13.7227%
n-Si/p-GaN $1e19\text{ (cm}^{-3}\text{)}$	8.4395 8e-011	8.43958	2.26461	1.23989 e-010	.099	5.90427 e-011	64.8737%	0.138049	8.98152%

Como se muestra en la tabla, la mayor eficiencia es a un dopado tipo P de $1e17 \text{ cm}^{-3}$ teniendo 13.72%, pero con un dopado menor de $1e15 \text{ cm}^{-3}$ mantiene las buenas características eléctricas solo disminuyendo a 13.5%, eso es muy conveniente en la fabricación del dispositivo, ya que, entre más magnesio se incorpore al GaN mayores defectos se tendrán.

Variación del espesor de la monocapa.

El espesor de los materiales depositados en sustratos depende del tipo de técnica que se utilice para los crecimientos de los III-nitruros (MBE, MOCVD y ALD). Se tiene en cuenta que, en esta tesis se utilizara la técnica ALD para el crecimiento, pero este es muy tardado y los precursores son más caros que en otras técnicas. Dicho lo anterior, es primordial conocer el impacto que tiene el espesor en rendimiento general de la celda solar. De los anteriores resultados de la estructura Si/GaN; los mejores rendimientos fueron a un GaN dopado con aceptores y a una concentración de $1e17 \text{ cm}^{-3}$, Así que a esta estructura se le vario el espesor de la capa de nitruro de galio con valores de 10nm, 15nm, 20nm y 25nm. En la figura 36, están los diferentes espesores que se añadieron a la simulación.

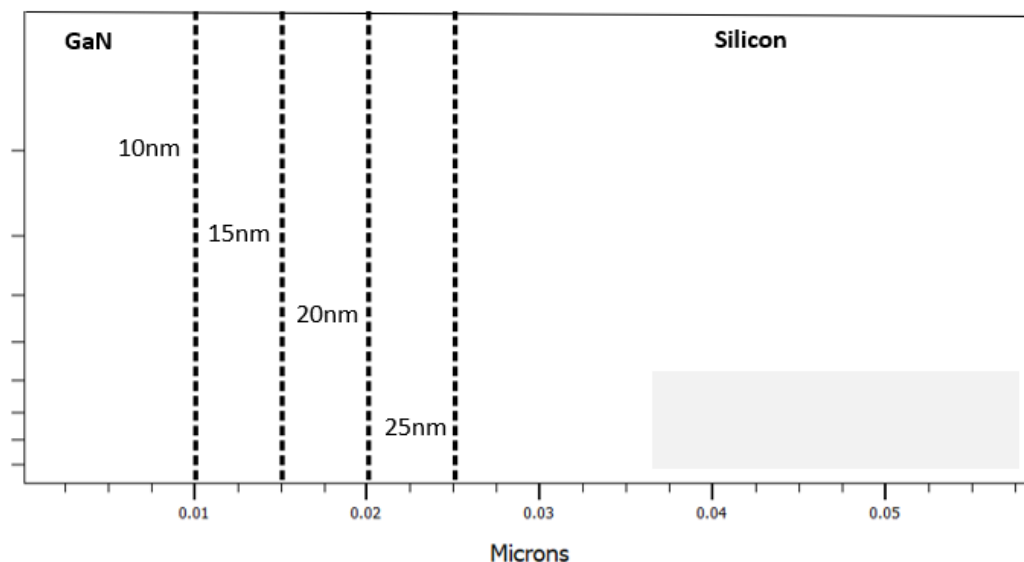


Figura 36. Espesores en la simulación.

El rendimiento de las celdas solares depende en gran medida del espesor de la capa activa [19,20]. Dado que la capa activa es la capa funcional principal en las OSC, absorbe la radiación entrante del sol y la convierte en excitones. Posteriormente, los excitones se difunden hacia la interfaz donante/aceptor y se separan en electrones libres y huecos. Estos electrones libres y huecos luego se transportan a los respectivos electrodos y contribuyen a la fotocorriente. Durante el transporte, los transportadores pueden sufrir pérdidas por recombinación tanto en el bulto como en las interfaces. La ampliación de la capa activa mejora la absorción, sin embargo, podría aumentar el impedimento del transporte de carga y las pérdidas por recombinación. Por lo tanto, se debe requerir un equilibrio entre la absorbancia, el transporte de carga y la recombinación para lograr el alto rendimiento

La respuesta en J-V de las celdas solares se visualizan a continuación, en donde podemos inferir que el espesor de la capa tiene una relación directa con la eficiencia del dispositivo ya que a mayores espesores hay una mayor captación de fotones que tienen mayor probabilidad de excitar los electrones, sin sobrepasar el espesor crítico para el aprovechamiento de los portadores libres.

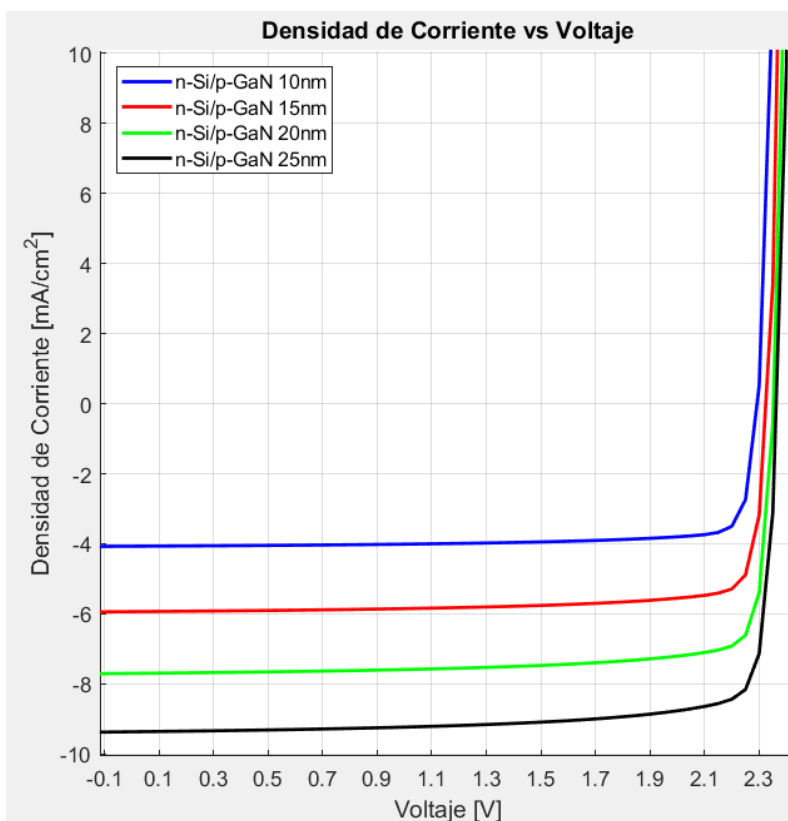


Figura 37. Respuesta J-V con los espesores 10nm, 15nm, 20nm y 25nm.

Tabla 6. Parámetros solares

Estructura	Isc (A)	Jsc (mA/cm2)	Voc (V)	Pm (W)	Vm(V)	Im (A)	FF	Potencia incidente	Eficiencia
n-Si/p-GaN 10nm	4.10565e-011	4.10565	2.292	7.90553e-011	2.15	3.67699e-011	84.0048 %	0.138049	5.7266%
n-Si/p-GaN 15nm	5.98866e-011	5.98866	2.324	1.16358e-010	2.2	5.289e-011	83.6029 %	0.138049	8.4287%
n-Si/p-GaN 20nm	7.76726e-011	7.76726	2.351	1.52212e-010	2.19999	6.91876e-011	83.3243 %	0.138049	11.025%
n-Si/p-GaN 25nm	9.4476e-011	9.4476	2.362	1.85651e-010	2.2	8.43868e-011	83.1895 %	0.138049	13.448 %

Análisis de resultados de la monocapa nitruro de galio para aplicaciones de fotodetección.

En el software Silvaco atlas, se evaluó la eficiencia cuántica externa (EQE) y la eficiencia cuántica interna (IQE) de la heteroestructura Si/GaN, para determinar de manera precisa la sensibilidad del dispositivo como fotodetector y la capacidad que tiene el dispositivo para generar pares electrón hueco de la irradiación recibida como dispositivo fotovoltaico. Para ello se irradió, la parte superior del dispositivo Fig.38 con una fuente de multiespectral, usando un archivo que contiene la irradiancia del espectro electromagnético, en el cual se hace un barrido de longitud de onda de 300nm a 1000nm. Para caracterizar las capas por separado, se irradia con 2 haces de luz, uno con una longitud de onda monocromática fija y la otra con una longitud de onda variable, de manera que podemos conocer la eficiencia cuántica de las capas separadas. La corriente resultante de la iluminación usando el haz monocromático se resta del total para obtener la corriente de la celda de prueba con lo que podemos saber el aporte de las películas y determinar la eficiencia cuántica externa [23].

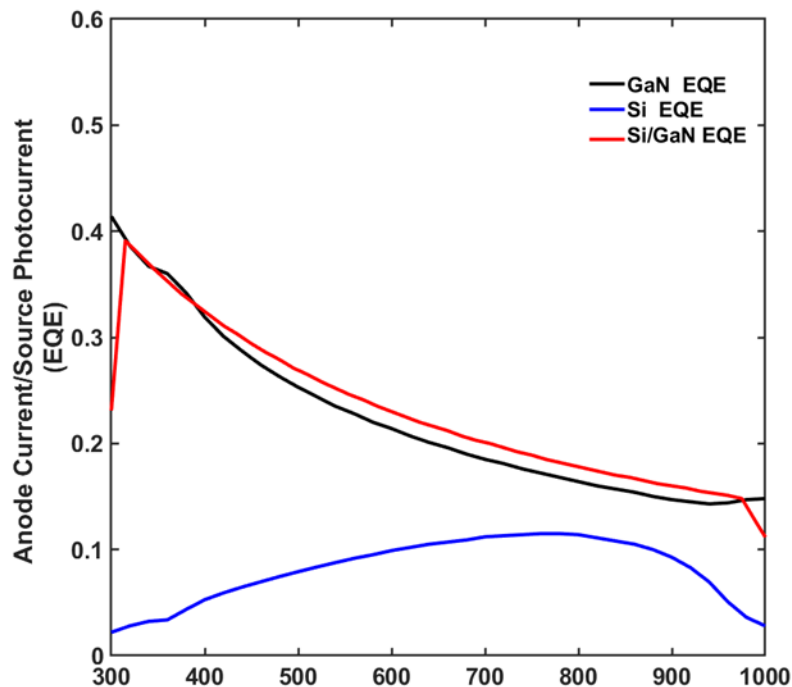


Figura 38. Eficiencia cuántica externa de los materiales GaN, silicio y la heteroestructura Si/GAN

La eficiencia cuántica externa (EQE) llega al 38%, y una eficiencia cuántica interna del 47% (IQE), en donde podemos notar que se tiene un mayor porcentaje de portadores de carga fotogenerados por número de fotones recolectados que es mayor en longitudes de onda que rondan los 300nm-350 nm y que corresponden al aporte de la capa del nitruro de galio. El aporte del silicio, aunque es menor se percibe en una rango mayor de 300nm a 1000nm. Otro parámetro importante es la responsividad, que es otro parámetro que evalúa cuanta corriente sale del dispositivo por fotón entrante de una energía y longitud de onda, en Silvaco para esta caracterización se utiliza un haz monocromático de longitud de onda de 100nm, el cual correspondería a una potencia 1W/cm² de intensidad, se hace un barrido discreto de longitud de onda de 300nm a 1000nm (figura 39). Con esta configuración notamos que conforme aumenta la longitud de onda, responsividad es mayor, esto se debe a que lo que estamos evaluando con ese haz de luz es principalmente la respuesta del silicio.

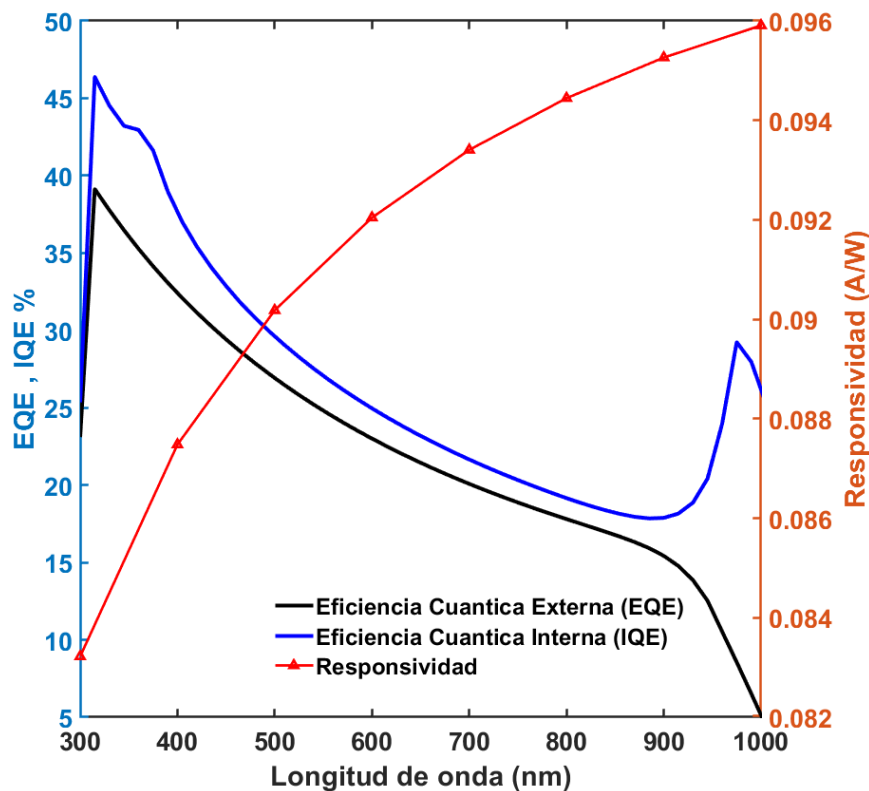


Figura 39. Eficiencia cuántica externa (EQE), eficiencia cuántica interna (IQE) y responsividad de la heteroestructura SI/GAN.

Mediante estas caracterizaciones, se nota que estos dispositivos podrían funcionar tanto como dispositivos de detección de luz como celdas solares y que el mayor aporte es de parte de la película de nitruro de galio localizada en 300nm a 400nm, sin embargo, para aplicaciones de silicio basadas en aplicaciones fotónicas de circuitos integrados es deseable esta combinación de materiales III-V con silicio para obtener fotodetectores de alta eficiencia como se menciona en [31].

Análisis de resultados de la monocapa nitruro de galio indio para aplicaciones fotovoltaicas.

El dispositivo fotovoltaico que se muestra tiene el semiconductor base de silicio con un espesor de ochenta micrómetros y un ancho de un micrómetro. Una película delgada del elemento ternario nitruro de galio indio ($In_xGa_{x-1}N$) es depositada abruptamente. Los contactos de titanio se establecieron en la parte superior e inferior del dispositivo, para que hubiera acceso de luz a través de la estructura, el ánodo (superior) es totalmente transparente (fig.40).

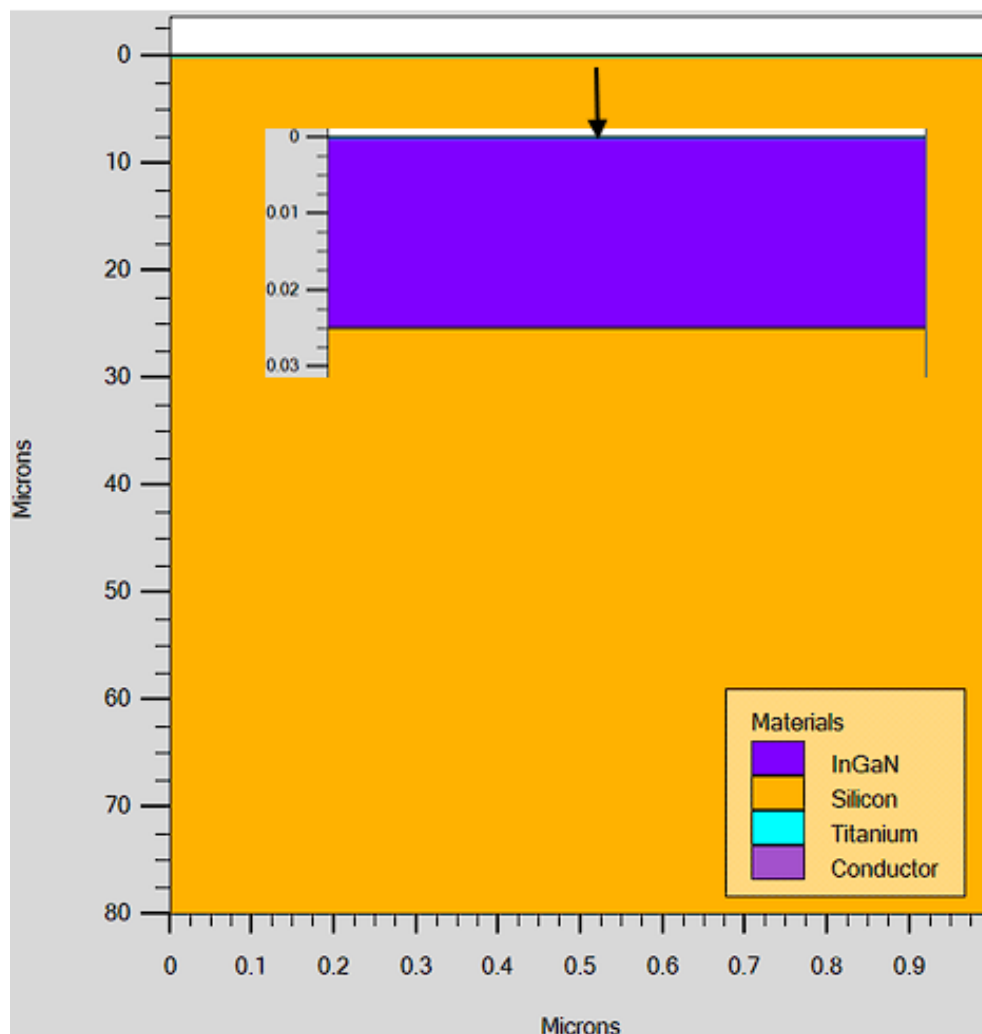


Figura 40. Estructura Si/InGaN con contactos óhmicos de titanio

El tipo de contacto que tiene el titanio con GaN es tipo óhmico, por lo que de esa manera reducimos perdidas en el contacto, además en la figura se muestra la capa ventana de algunos nanómetros de III-nitruro.

La mayor producción de corriente de una celda solar depende de los mecanismos mencionado en la sección anterior; potencial electrostático, fuerzas efectivas y difusión. De aquellas se sabe que el potencial electrostático sería la principal ruta para la separación de cargas y aprovechamiento de ellas al generar una corriente tanto de huecos como de electrones por lo que, una unión PN nos daría un mayor campo eléctrico. La capa de nitruro de galio al tener un coeficiente absorción alto, nos generaría una gran cantidad de pares electrón-hueco, que bien direccionados, aportarían una densidad de corriente óptima para una celda solar de alta eficiencia.

El nitruro de galio indio al ser un compuesto tiene propiedades que son variables, como son: el ancho de banda, parámetro de red, afinidad electrónica etc. En este trabajo se usaron los III-nitruros $In_{25}Ga_{75}N$ y $In_{71}Ga_{29}N$, ya que se conocían los parámetros ópticos y el ancho de banda calculados en [4], como se mencionó anteriormente estos valores son muy importantes para la simulación de heterouniones con elementos no tan conocidos por el software como los son los III-nitruros.

Monocapa n-Si/p – $In_{25}Ga_{75}N$

Con una composición del 25% se varió el dopado tipo P con las concentraciones $1e15$, $1e17$ y $1e19$, tomando en cuenta los valores de la tabla y los modelos incorporados de la anterior sección. Se obtuvo el diagrama de bandas de la heteroestructura, sin y con aplicación de luz (figura 41).

En la figura 41a la estructura $n - Si/p - In_{25}Ga_{75}N$ sin la aplicación de luz, la región de carga espacial se recorre hasta $1\mu m$, lo que indicaría una fuerte inversión. La región de agotamiento en la zona del silicio es mucho más grande que en el III-nitruro debido al espesor de 25 nm . Se nota que al aumentar el dopado P de $1e17$ a $1e19$ hay un aumento en la barrera de la banda de conducción y un achatamiento en la banda de valencia.

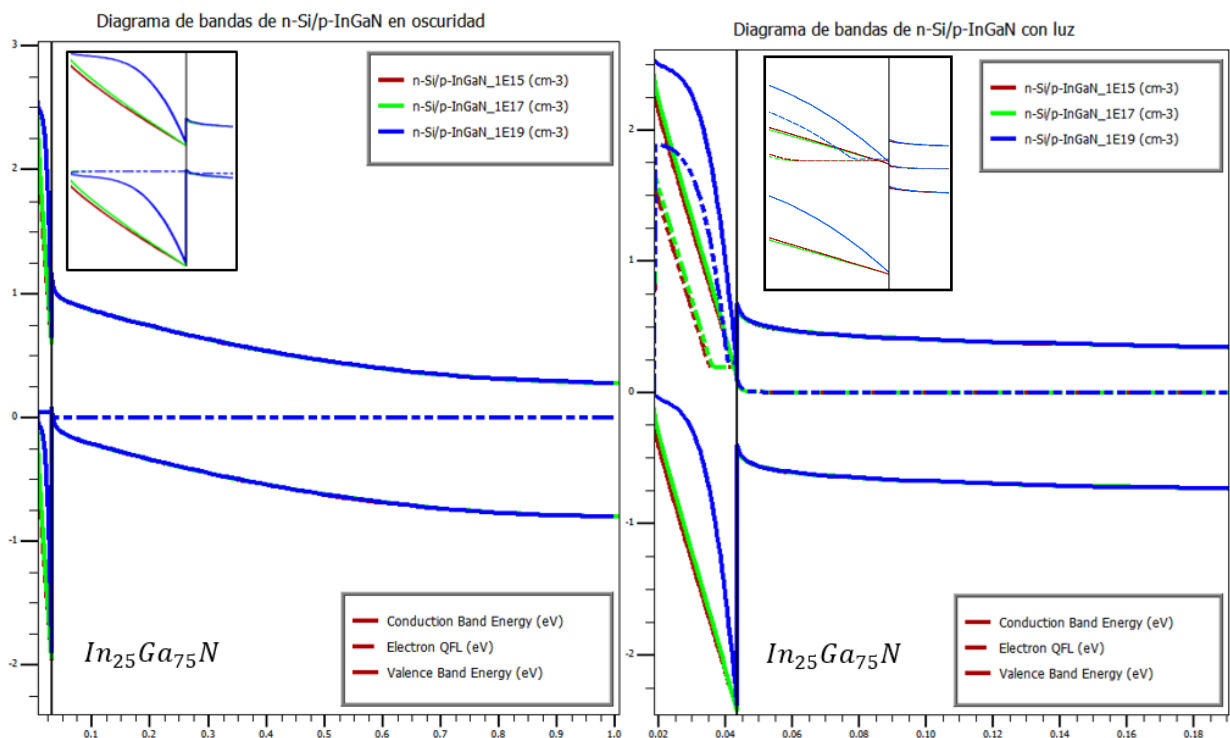


Figura 41. Diagrama de bandas $n - Si/p - In_{25}Ga_{75}N$ a diferentes concentraciones de aceptores $1e15\text{cm}^{-3}$, $1e17\text{cm}^{-3}$ y $1e19\text{cm}^{-3}$ en A) Sin iluminación b) Con iluminación.

Al incorporar el haz de luz figura 41b, el nivel de fermi aumenta y las bandas son modificadas teniendo una disminución en la región de carga espacial. Esto se debe a los pares electrón-hueco fotogenerados teniendo una inyección de portadores que rompen con el equilibrio termodinámico al aumentar los portadores minoritarios, estos al ser transportados y discriminados por el campo eléctrico generan una corriente de corto circuito J_{sc} . En la celda solar se varía el dopado P para el emisor y se observa que el dopado mayor propicia un túnelo de huecos a través de la interfaz de la banda de valencia y una barrera selectiva de electrones en la banda de conducción.

Al tener un espesor de 25 nm (emisor InGaN), para estas simulaciones, la longitud de difusión es más grande que el mismo espesor de la película, de esta forma todos los huecos son capturados debidamente en el ánodo (figura 42) y además permite que las longitudes de onda largas lleguen al material absorbente, (siendo este el silicio) para que contribuya a la corriente general de la celda solar. En la sección anterior se mencionó que se incorporaron los modelos de transporte a través de la interfaz; túnelo para electrones-huecos no local, transporte asistido por niveles de energía dentro de la brecha de energía y la transmisión termiónica. De estos mecanismos se hicieron simulaciones obteniendo resultados interesantes, ya que el modelo Danielsson aumento el voltaje de circuito abierto, que nos indica que hay mayor cantidad de portadores transmitidos en la interfaz. Ya que, aunque mantiene la corriente fotogenerada, tiene un aumento en la concentración excesiva de portadora (Δn).

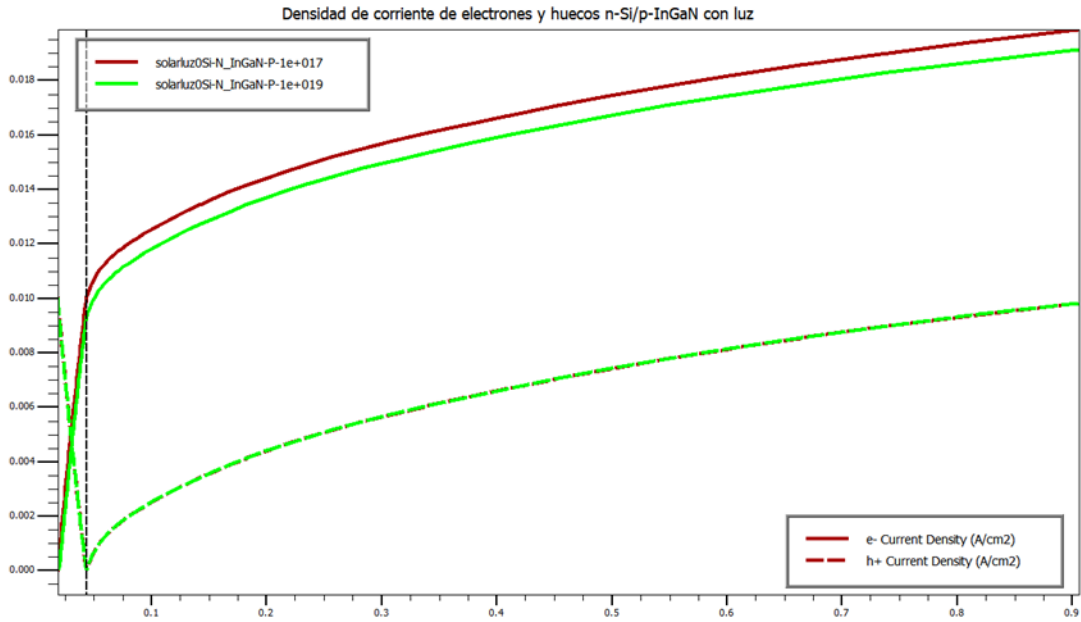


Figura 42. Densidad de corriente de electrones y huecos a una polarización de 0V con aplicación de luz de la estructura N – Si/P – In_{2.5}Ga_{7.5}N con dopados 1e17 (cm-3) y 1e19 (cm-3).

La respuesta I-V de la figura 43 nos demuestra el comportamiento fotovoltaico de una estructura $n - Si/p - In_{2.5}Ga_{7.5}N$ con los modelos habilitados para la transmisión termiónica, túnel no local y Danielsson, en donde podemos combinarlos para acercar el comportamiento físico real del dispositivo. El modelo de asistencia por trampas supone que se los estados dentro de la interfaz ayudan a la transmisión pero esto solo puede determinarse una vez fabricado el dispositivo pero como se demuestra existe la posibilidad de mejorar el Voc al incorporar niveles de energía que asistan el transporte de portadores. En la respuesta I-V, está la celda solar (con una concentración aceptora de 1e17) con polarización de -1V a 2V, con y sin la habilitación de luz. Se nota el aumento de corriente a polarización de 0V, (como ya se había analizado el diagrama de bandas) por lo que si hay un efecto fotovoltaico y un alto voltaje de circuito abierto.

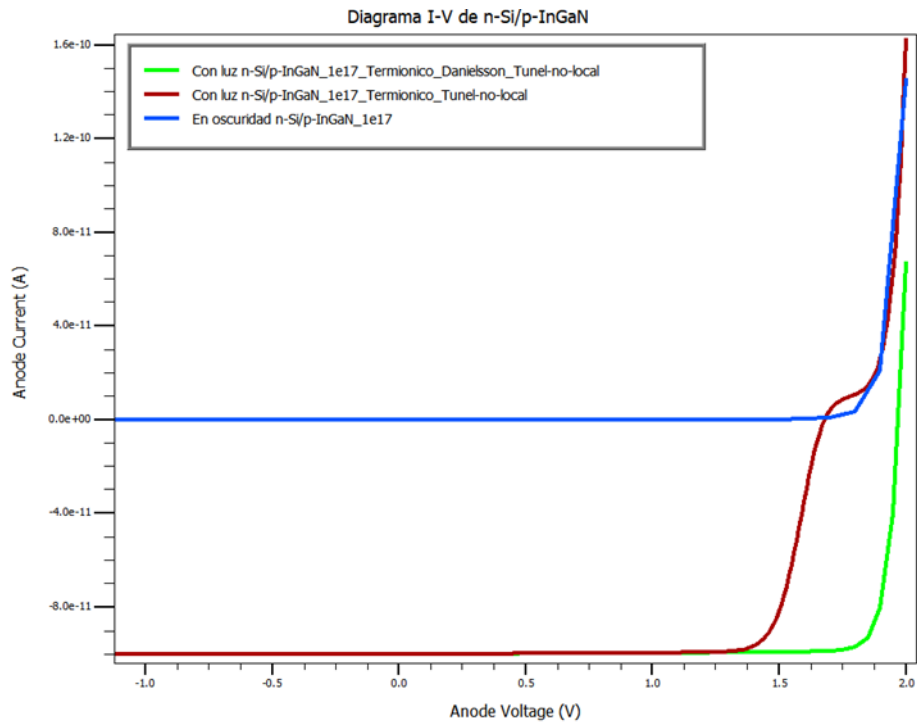


Figura 43. Respuesta I-V del dispositivo con una concentración de 1×10^{17} (CM-3) aceptora, a) línea azul en oscuridad b) Línea roja con los modelos Termiónico-Túnel (TH-T), bajo iluminación y c) Línea verde con los modelos Danielsson-Túnel (D-TH-T), bajo iluminación.

Aumentando de esa manera el Voc y teniendo una mejorara en la eficiencia del dispositivo. En la figura 45 se muestra la densidad de corriente en polarización de 0V de los dispositivos simulados a diferentes concentraciones de dopado. En ella nos fijamos en que se obtiene mejores resultados con la concentración de 1×10^{17} (cm-3) y con el modelo habilitado Danielsson.

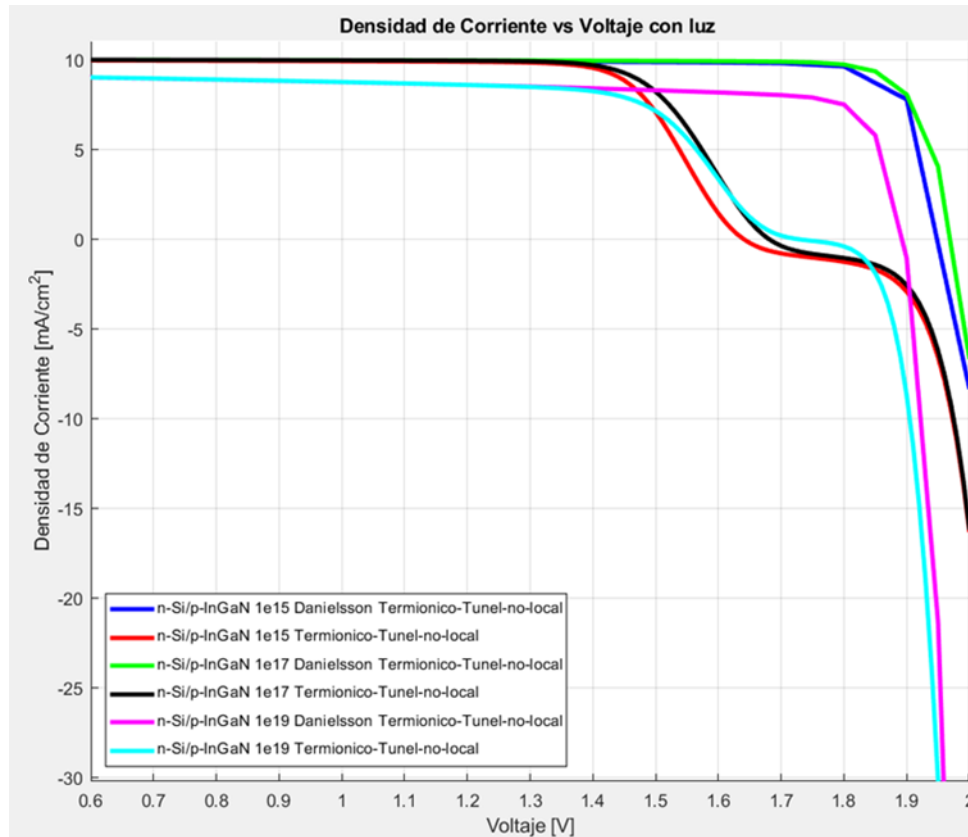


Figura 44. Condición de -1V a 2V aplicando de haz de luz, para la estructura N-Si/P- $\text{In}_{25}\text{Ga}_{75}\text{N}$ variando el dopado $1\text{E}15$ (CM-3), $1\text{E}17$ (CM-3) Y $1\text{E}19$ (CM-3); Con la incorporación de los modelos; Danielsson con tunelamiento no local (D-Th-T) y Termionico con tunelamiento no local (T-Th).

Al obtener los parámetros solares de la densidad de corriente contra Voltaje para n – Si/p – $\text{In}_{25}\text{Ga}_{75}\text{N}$, se tiene la tabla 7 con resultados de corriente de corto circuito, voltaje de circuito abierto, voltaje, máximo, potencia máxima, intensidad del haz de luz, factor de llenado y eficiencia de la celda solar.

Tabla 7 Parámetros solares n-Si/p-InGaN.

Estructura	sc (A)	Jsc (mA/cm ²)	Voc (V)	m (W)	Vm(V)	m (A)	FF (%)	Potencia incidente	Eficiencia (%)
n-Si/p-InGaN 1e15 Danielssc	.00E-10	10.0438	1.64332	.34E-10	.4	.55E-11	80.9679	0.138049	9.68055
n-Si/p-InGaN 1e15 Termiónico	.00E-10	10.0499	1.68603	.36E-10	.4	.70E-11	80.129	0.138049	9.8352
n-Si/p-InGaN 1e17 Danielssc	.80E-11	9.79775	1.732	.15E-10	.4	.25E-11	68.0271	0.138049	8.36225
n-Si/p-InGaN 1e17 Termiónico	.00E-10	10.0438	1.9641	.73E-10	.8	.63E-11	87.8784	0.138049	12.5577
n-Si/p-InGaN 1e19 Danielssc	.01E-10	10.05	1.96885	.75E-10	.8	.73E-11	88.5564	0.138049	12.693
n-Si/p-InGaN 1e19 Termiónico	80E-11	.79608	1.89218	1.38E-10	.75	7.90E-11	74.5481	0.138049	10.0096

A pesar de que si hay un túnelo de huecos para dopados altos , al incorporar el modelo de tunelamiento no local, no hay un mejoramiento en el rendimiento de la celda solar , pero eso no descarta la posibilidad de incorporar III-nitruros como capa selectiva de huecos , ya que se ha demostrado con el diagrama de bandas , el achatamiento de la banda de valencia y el aumento de la barrera de conducción , además de obtener una tasa de tunelamiento en la interfaz que bajo otras condiciones y dispositivos compuestos de nitruro de indio podrían mejorar en gran medida el transporte de huecos , lo que ocurre , es que para los demás dispositivos simulados con dopados de 1e15 y 1e17 , tampoco tienen problemas de recombinación en los contactos como se visualizan en la figura 43 , ya que los electrones caen a 0 en el ánodo y en la corriente total a dopados altos no hay un gran aporte. Cabe recalcar que en un dispositivo real podría presentarse una recombinación en los contactos y al dopar más el material podríamos obtener una mejor respuesta ya que podríamos mitigar la recombinación al usar el nitruro de galio indio como capa selectiva de huecos.

Monocapa n-Si/P – $In_{71}Ga_{29}N$.

Se analizó el elemento emisor ternario InGaN tipo p, con una composición del 75% de In, incluyendo los parámetros de simulación (tabla) y modelos (sección), que describen la física de la celda solar.

Nuevamente variamos el dopado aceptor de $1e15$, $1e17$ y $1e19$ (cm^{-3}) de la película delgada y se determinó sus diagramas de bandas, respuesta J-V y los parámetros solares, con el fin de determinar, si el dispositivo puede tomarse en cuenta, para la fabricación real del dispositivo. En la figura (45a), el diagrama de bandas (en condición de oscuridad), se forma una zona de agotamiento grande, producto de la hetero unión $Si/In_{71}Ga_{29}N$. El nivel de Fermi, siendo una medida de la probabilidad de ocupación de un estado (electrón-hueco), conforme se va alejando de la zona de agotamiento nos da un nivel cercano a la banda de conducción, por el dopado del silicio. Una vez activado el haz de luz (sin polarización), el ancho de la región carga espacial disminuye, por los pares electrón-hueco fotogenerados. El haz de luz como fuente de energía, En condición de cero polarización y equilibrio térmico (figura 45b), es la única causa del rompimiento de la simetría del dispositivo, así que se obtiene una alta inyección de portadores minoritarios, de forma que el nivel único nivel de Fermi ahora se divide en 2; nivel quasi-Fermi de electrones (Electrón QFL) y el nivel quasi-Fermi de huecos.

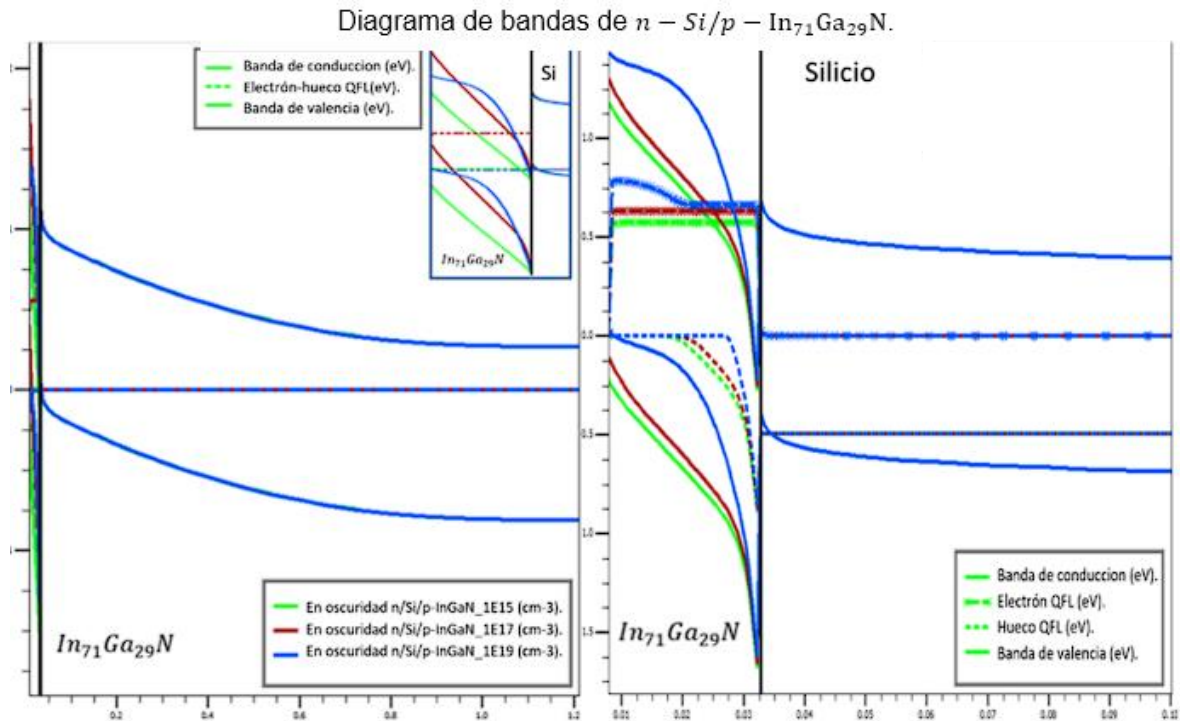


Figura 45. Diagrama de bandas de conducción, de valencia y niveles de fermi a) En oscuridad b) con luz.

Él sistema se relaja a un nuevo estado global de equilibrio, utilizando la distribución de Fermi-Dirac para cada partícula conjunto individual. Los portadores minoritarios en el III-nitruro (las cuasipartículas de electrones), como se presenta en la imagen tienen la suficiente cantidad de electrones que para tener un nivel cercano a la banda de conducción (E_{fn}) y otro nivel cercano a la banda de valencia (E_{fp}), debido al espesor de 25nm, la región de agotamiento abarca todo el material por lo que el nivel quasi-fermi de electrones no desciende hasta la unión con el metal.

Al variar el dopado, se tiene una mayor deformación de en la banda de conduccion y en la banda de valencia una reducción considerable. Este dispositivo es una unión P-N con diferentes parámetros como afinidad electrónica, densidades efectivas de estados, masas efectivas, ancho de banda etc...., la posibilidad de separación de carga existe por las fuerzas efectivas principalmente, sin embargo, no es suficiente para tener una respuesta positiva en las medidas J-V y datos solares. En la figura 46, se muestra la respuesta I-V en condición de luz y oscuridad para los modelos Danielsson, Termiónico y tuneleo no local. Si al menos se toma en cuenta el modelo Danielsson con el tunelamiento no local (D-Th-T), si hay un aumento en la fotocorriente, aunque el Voc se mantenga (Línea verde). En el modelo Th-T, el voltaje aumenta tanto que el $V_{oc} > E_g$, cuando ocurre esto el dispositivo no genera corriente, sino que consume potencia, bajo estas circunstancias no funciona como dispositivo fotovoltaico.

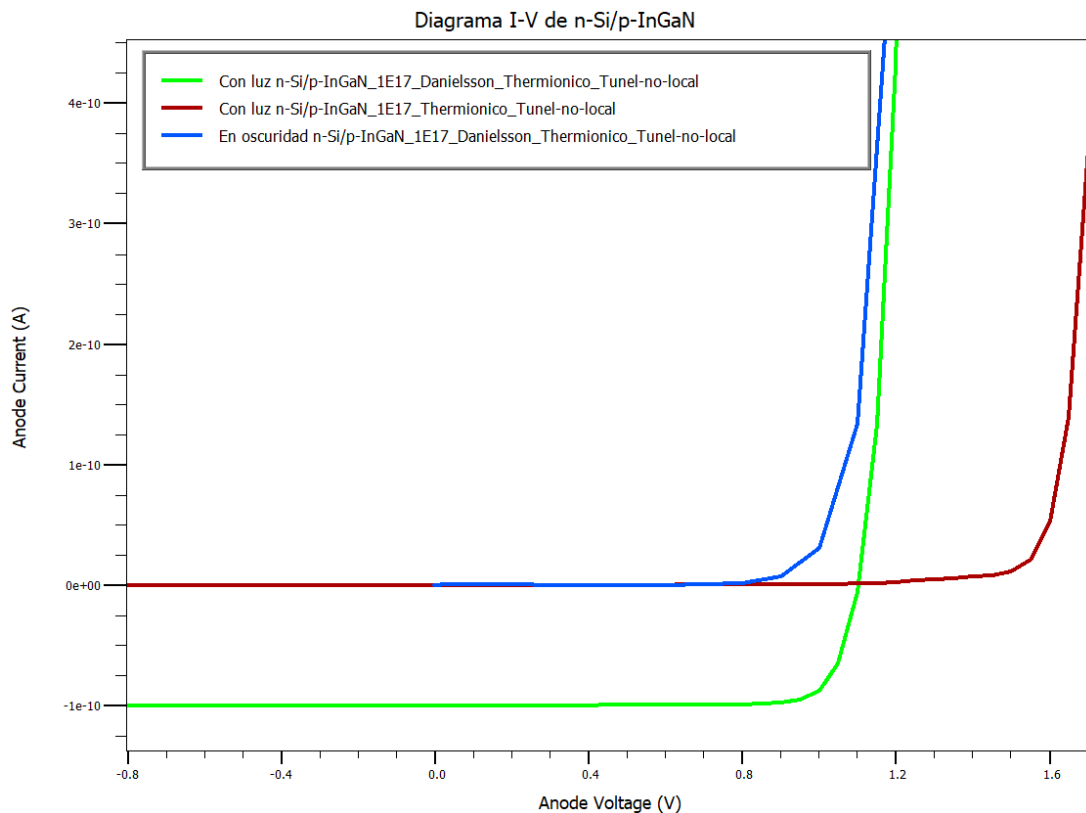


Figura 46. Respuesta I-V de Si/InGaN con 71% de InN con la habilitación del modelo transmisión termiónica y Danielsson

Ahora se varía el dopado, para reconocer que concentración de dopado podría generar una respuesta fotovoltaica mayor con parámetros solares óptimos. La respuesta J-V tiene independencia del área de incidencia de la luz. Los dispositivos, bajo iluminación, con polarización de -1.5V a 2V, de $n-Si/p-In_{71}Ga_{29}N$ con los modelos Th-T, consumen potencia, ya que tiene una densidad de corriente negativas con respecto al cátodo. El ancho de banda, del elemento ternario es de $1.4079eV$ y el voltaje de saturación (líneas negra, roja y azul) ronda de 1.6V-1.7V al ocurrir esto se tiene un consumo y no una generación. Otro aspecto importante a mencionar es que para los dispositivos con los modelos D-Th-T, a mayor dopado se tiene un mayor Voltaje de circuito abierto pero menor corriente de corto circuito, se puede deducir de la figura 47 que hay una mayor concentración de portadores minoritarios (cuasipartículas electrones) y por lo tanto un Voc mayor, mientras que para el Jsc , que se debe a la generación y recolección de portadores generados por la luz , de igual manera está relacionada con las longitudes de difusión , y como se menciona en [32] a mayores dopados la longitud de difusión disminuye por lo que la corriente de corto circuito disminuye.

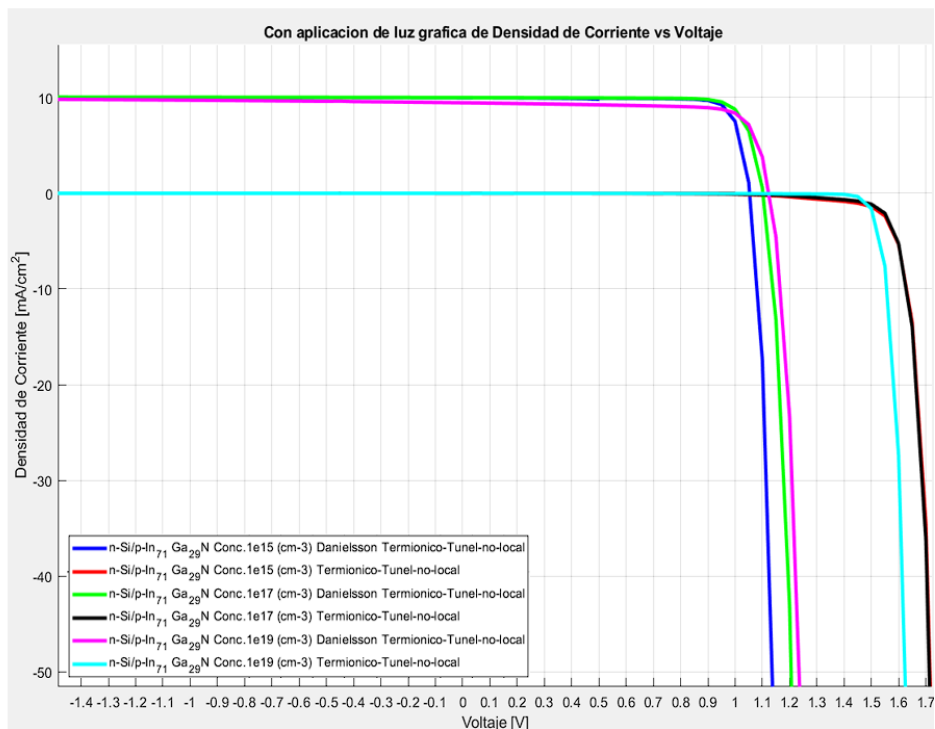


Figura 47. Respuesta J-V de Si/InGaN con 71% de InN con la habilitación del modelo transmisión termiónica y Danielsson variando la concentración de donadores.

En la tabla 5, a dopados de $1e17$ con el modelo Danielsson se tiene una mejor respuesta fotovoltaica, teniendo un factor de llenado del 81% y una eficiencia del 6.56%. Esto nos ayuda en determinar, el dopado. El rendimiento del dispositivo no disminuye tanto, así que en la fabricación esto se tomara en cuenta para una propuesta de una celda solar tipo PIN.

Tabla 8 Parámetros solares n-Si/p-InGaN.

Estructura	Isc (A)	Jsc (mA/cm ²)	Voc (V)	Pm (W)	Vm(V)	Im (A)	FF (%)	Potencia incidente	Eficiencia (%)
n-Si/p-InGaN 1e15 Termionico	-1.16E-13	-0.0115591	X	1.16E-13	-1	-1.16E-13	X	0.138049	0.00837333
n-Si/p-InGaN 1e17 Termiónico	-7.71E-14	-0.00771306	X	1.54E-13	-2	-7.71E-14	X	0.138049	0.0111744
n-Si/p-InGaN 1e19 Termionico	-7.43E-14	-0.00743399	X	1.51E-13	-1.95	-7.76E-14	X	0.138049	0.0109581
n-Si/p-InGaN 1e15 Danielsson	1.00E-10	10.0403	1.05298	8.81E-11	0.95	9.27E-11	83.2857	0.138049	6.37829
n-Si/p-InGaN 1e17 Danielsson	1.00E-10	10.042	1.10201	9.07E-11	0.95	9.54E-11	81.9203	0.138049	6.56695
n-Si/p-InGaN 1e19 Danielsson	9.87E-11	9.87466	1.12255	8.37E-11	1	8.37E-11	75.5005	0.138049	6.0624

Variación del espesor de la monocapa InGaN.

Se ha mencionado que los materiales depositados con la técnica de ALD es tardado y más caro que en otras técnicas, además que el aumento del espesor de capas de los materiales ternarios InGaN, tienen una repercusión en los defectos del material, agravando el funcionamiento de cualquier dispositivo. Dicho lo anterior, se realizó simulaciones con la variación de los espesores de $p - \text{In}_{25}\text{Ga}_{75}\text{N}$ (la mejor capa para efectos fotovoltaicos) con una concentración de $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ de aceptores como dopante y con el modelo de emisión termiónica y tuneleo local. Los espesores simulados son 10nm, 15nm, 20nm y 25nm (figura 48).

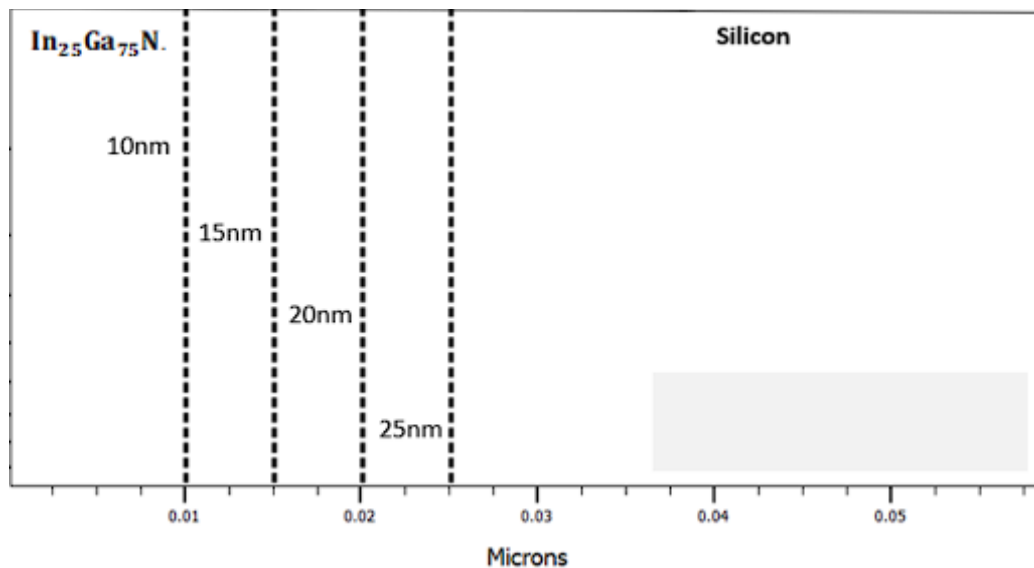


Figura 48. Espesores en la simulación.

La densidad de corriente de cortocircuito es el producto de la absorción dependiente de la longitud de onda y el espectro solar AM1.5G. La variación en el espesor de la capa de $p - \text{InGaN}$ cambia la cantidad de luz absorbida en la región activa. En las respuestas J-V para películas nanométricas (fig.49).

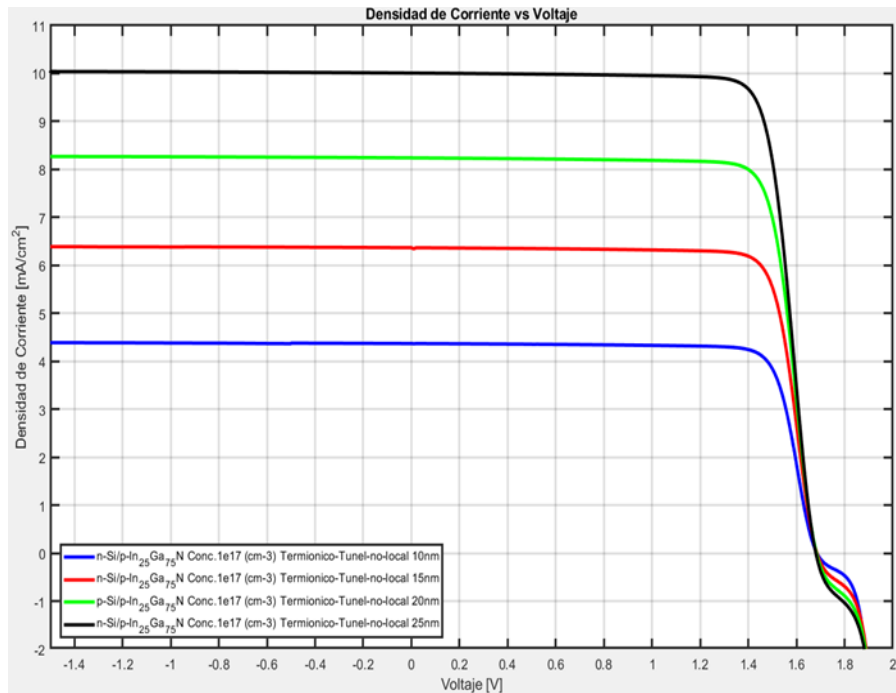


Figura 49. Respuesta J-V de N-Si/P-InGaN Variando los espesores de la capa.

Tabla 9. Parámetros solares N-SI/P-INGAN

Estructura	Isc (A)	Jsc (mA/cm2)	Voc (V)	Pm (W)	Vm(V)	Im (A)	FF (%)	Potencia incidente	Eficiencia (%)
n-Si/p-InGaN_10nm	4.39E-11	4.38774	1.68521	6.00E-11	1.44	4.17E-11	81.1291	0.138049	4.34549
n-Si/p-InGaN_15nm	6.39E-11	6.38989	1.68519	8.73E-11	1.43999	6.06E-11	81.0883	0.138049	6.32509
n-Si/p-InGaN_20nm	8.27E-11	8.26924	1.68311	1.12E-10	1.43	7.86E-11	80.7808	0.138049	8.14428
n-Si/p-InGaN_25nm	1.00E-10	10.0402	1.68031	1.36E-10	1.40999	9.62E-11	80.3899	0.138049	9.82427

Análisis de resultados de la monocapa nitruro de galio indio para aplicaciones de fotodetección.

Se realizó el estudio de eficiencia cuántica externa e interna de la heteroestructura $\text{Si}/\text{In}_{25}\text{Ga}_{75}\text{N}$ bajo las mismas condiciones de excitación de luz. En donde se tiene una eficiencia cuántica externa de 42% y 48% de eficiencia cuántica interna en aproximadamente 300nm de longitud de onda, que es el aporte optoelectrónico de la película de InGaN, mientras que, para el silicio, aunque se tiene menor contribución, pero de igual forma presenta mayor interacción con longitud de onda de 300nm a 1000nm (fig.50).

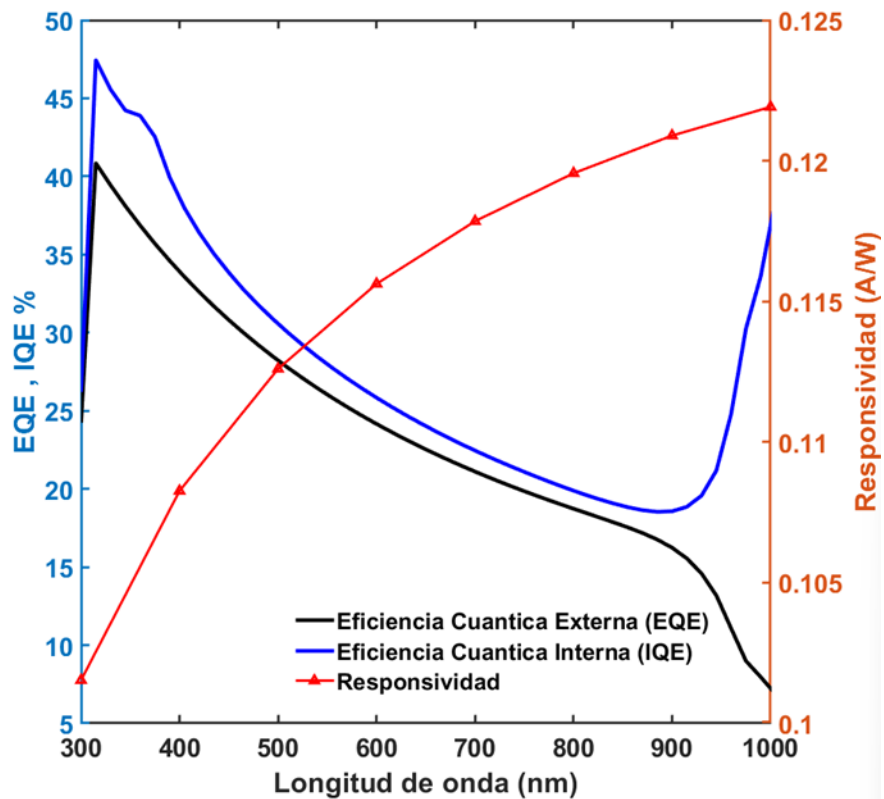


Figura 50. Eficiencia cuántica externa (EQE), eficiencia cuántica interna (IQE) y responsividad de la heteroestructura Si/InGaN

En cuanto a la responsividad con un haz monocromático de 100nm, se tiene un aumento continuo en cuanto aumentamos la longitud de onda y mayor que la heteroestructura Si/GaN, cabe señalar que el área efectiva del dispositivo es de $1e-8\text{cm}^2$ con una potencia de $1\text{W}/\text{cm}^2$.

En la composición ternaria $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ al variar la composición molar del InN, modificamos tanto la afinidad electrónica, el ancho de banda del material, así como la absorción del material etc., por lo que, los pares electrón-hueco fotogenerados no serán los mismos. Como se muestra en la figura 51, la mayor eficiencia cuántica se encuentra en una composición de InN del 30% y conforme aumentamos la razón molar restringimos la fotocorriente a longitudes de onda cercanas al ultravioleta.

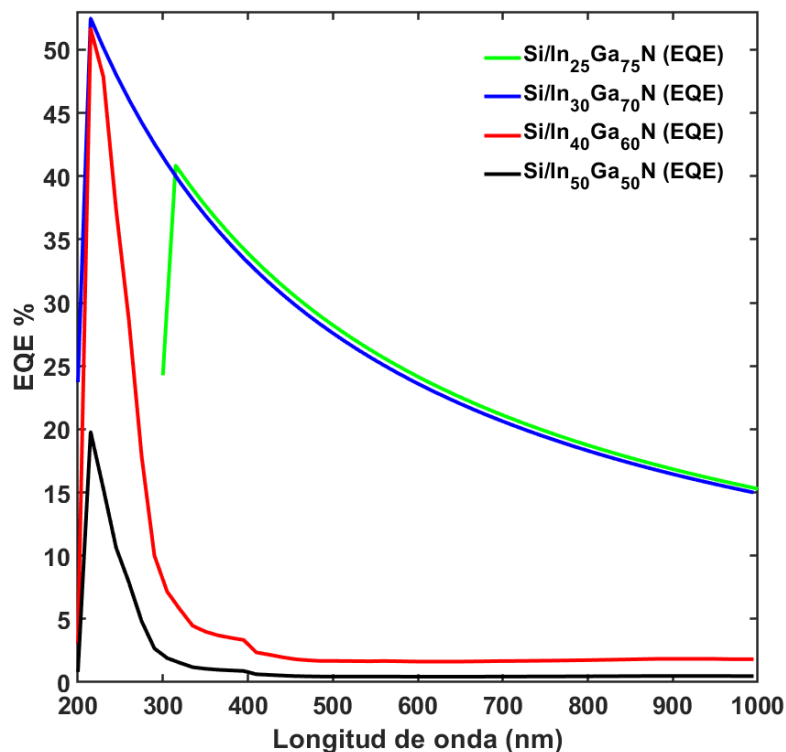


Figura 51. Eficiencia cuántica externa (EQE) variando la composición iNN en la heteroestructura SI/INGAN.

Con una eficiencia cuántica externa del 53% y una mayor cobertura de longitud de onda, podría funcionar mejor para aplicaciones en celdas solares y con la restricción de los pares electrón hueco, a ciertas longitudes de onda menores a 300nm es posible un fotodetector que sea funcional para esa región del espectro.

CAPITULO III

Métodos de depósito y técnicas de caracterización.

En el presente capítulo se dará una explicación de la técnica de depósito ALD y PEALD utilizada para el depósito de las capas de los materiales nitruro de galio y nitruro de galio indio, así como del depósito del metal empleado para los contactos de los dispositivos, además se presentara las técnicas de caracterización que fueron empleadas para el análisis de las películas que conforman los dispositivos fotovoltaicos fabricados; tales como: Difracción de rayos X (DRX), microscopia electrónica de barrido (SEM) y Espectroscopia de energía dispersiva de rayos X (EDS). Asimismo la caracterización eléctrica : medición I-V, C-V y fotorespuesta de las celdas solares Si/GaN y Si/InGaN , para la obtención de parámetros que puedan incorporarse a la simulación.

Técnica de depósito ALD

El depósito de capas atómicas es un método de fabricación que utiliza reacciones químicas de superficie, para crear fuertes enlaces químicos entre el sustrato y la película depositada y con la película en sí misma. El proceso inicia con la inclusión del sustrato en el reactor, posteriormente la especie química A es introducida, la cual reacciona con la superficie y forma una monocapa química-absorbida. El exceso del precursor es extraído por una bomba de vacío (purga) que utiliza el gas inerte (argón) como acarreador de los residuos, una vez removido, el precursor B es introducido al reactor, reaccionando con la monocapa A y forma la monocapa química-absorbida del segundo precursor, e igualmente la bomba de vacío extrae los residuos, esto secuencialmente va formando una capa más gruesa del material deseado.

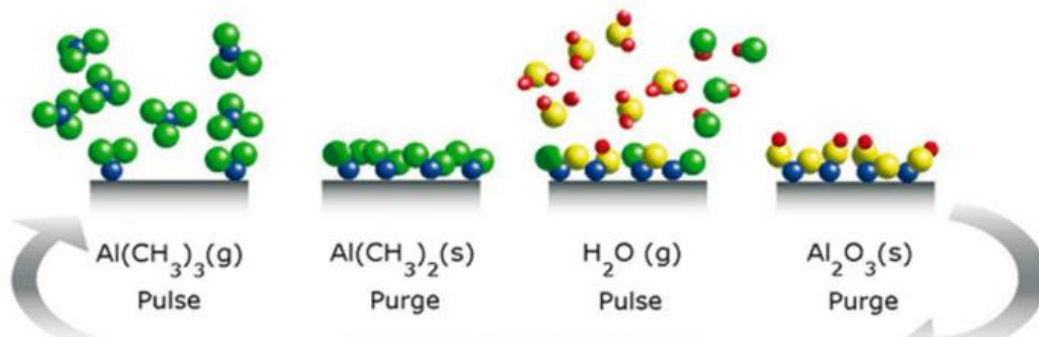
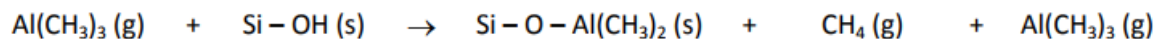
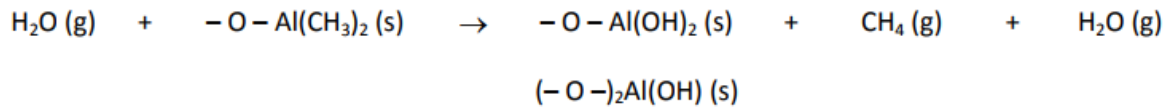


Figura 52. Proceso ALD

La imagen 52, es un ejemplo del proceso ALD de un depósito de Al_2O_3 en donde utiliza los precursores de agua (H_2O) Y trimetil aluminio (TMA), de esta manera la molécula $\text{Al}(\text{CH}_3)_3$ reacciona con los grupos OH nativos de la superficie del sustrato, para posteriormente realizar la purga de los subproductos de la reacción, formando la monocapa $-\text{O}-\text{Al}(\text{CH}_3)_3(\text{s})$.



Posteriormente se introduce el precursor de agua (H_2O) que reacciona con los nuevos grupos Methyl de la molécula TMA química-absorbida para crear puentes de oxígeno (-o-) entre los átomos de aluminio y al realizar la purga de los subproductos, se obtiene el material deseado de $(-o-)_2Al(OH)_2(s)$, este proceso repetitivo nos va a dar el grosor de la capa deseada.



PEALD

Para el proceso de ALD asistido por plasma, trae consigo 2 pasos más: La dosificación de precursores y liberación de radicales plasmáticos. Este último son buenos co-reactantes, porque son extremadamente reactivos. En el Manual fiji [33] mencionan el uso de dos diferentes estados de vacío de 100's mTorr, para la dosificación de precursores que utiliza una bomba seca (en bruto) y para la liberación de radicales (plasma), una bomba turbo para tener una presión de 10's mTorr.

El proceso de funcionamiento del PEALD que se muestra en la figura (), se describe mediante 4 pasos:

- Bombeo a través de la válvula "Reactor Rough", El gas fluye hasta que la presión se estabiliza.
- El precursor es introducido al reactor, seguido de ello, la válvula rough purga y retira los excedentes del precursor y las reacciones de los subproductos.
- Luego de la purga del precursor, la línea de escape cambia (la válvula rough se cierra, la turbo "isolation" y las válvulas de compuerta del reactor se abren).

- Después de que el flujo se establece, se enciende la purga de argón a través de la trampa y se enciende la fuente de plasma y una vez que la fuente de plasma es apagada y el sistema vuelve de la línea turbo a la línea rough el ciclo se repite n veces.

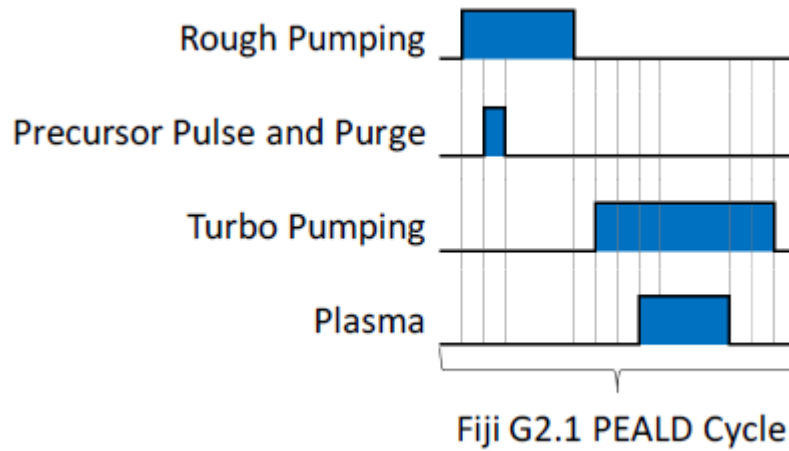


Figura 53. Proceso de funcionamiento ALD.

Difracción de rayos-X (DRX).

La difracción de rayos X (DRX) es una técnica que se utiliza para analizar la estructura atómica o molecular de los materiales, al hacer incidir rayos x en un sólido (cristal) se producen rayos X difractados paralelos, cuyas direcciones e intensidades dependerán de la estructura cristalina y la composición química. El patrón resultante entre el haz de rayos x con los materiales, se traduce en intensidades más altas y bajas que son causadas por las interferencias constructivas o destructivas que son descritas por la ley de Braggs [34]:

$$n\lambda = 2d\sin\theta \dots\dots\dots (32)$$

En el que los máximos de difracción solo se encuentran para direcciones de incidencia y reflexión, de los cuales los planos adyacentes del sistema interfieren de manera constructiva, con diferencias de fase de 2π radianes en donde n es un numero entero, d es el espaciamiento interatómico y θ es el ángulo de incidencia entre el plano atómico y el haz incidente (figura 54).

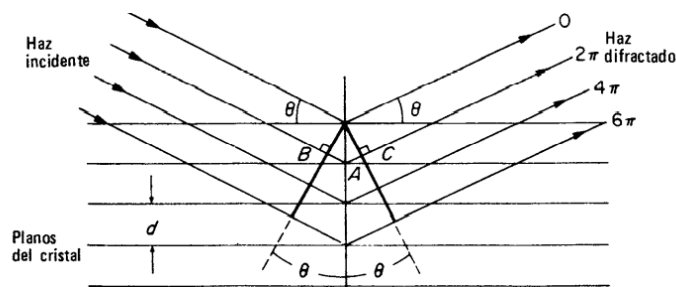


Figura 54. Haz incidente y difractado.

Para que ocurra la difracción: El Angulo de incidencia debe ser igual al Angulo refractado y si la diferencia de longitud es igual a un número entero de longitudes de onda. El equipo de necesario para la caracterización estructural XDR , utiliza un difractómetro que consiste de 3 elementos principales (figura 55): El tubo catódico ; genera rayos x , aplicando calor a un filamento , lo que produce electrones que son direccionados mediante la aplicación de un voltaje; Portamuestras, donde se coloca el material de estudio y el detector de rayos x, procesa la señal convirtiéndola en una tasa de conteo para enviar estos datos a la computadora dando una patrón característico del material.

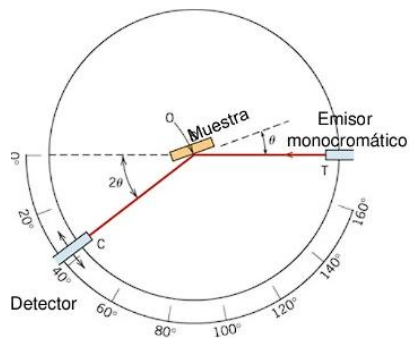


Figura 55. Esquema de equipo de difracción.

Microscopia electrónica de barrido (SEM).

El microscopio electrónico de barrido (SEM, Scanning Electron Microscope) es un instrumento que permite la observación y caracterización superficial de materiales, dando información morfológica y de composición química rápida, eficiente y simultáneamente del material analizado. Esta técnica de microanálisis detecta las señales emitidas después de que un haz de electrones finamente enfocado interacciona con la superficie de una muestra. En este proceso se producen varios tipos de señales electrones retrodispersados, fotones de rayos x y otros fotones de diversos rangos de energía. Precisamente con los electrones dispersados y secundarios se puede construir imágenes del material. Estos microscopios se componen de una columna de electrones, consolas de control y sistemas de adquisición de imágenes. En la parte superior (figura 56) se encuentra

el emisor de electrones , que es conducido por lente electromagnéticos , el sistema de deflexión mueve el haz en forma de zigzag para hacer el barrido superficial del material produciendo estas señales que son colectadas por detectores y cada uno de ellos nos brinda información específica; los rayos secundarios , producen imágenes SEI (secondary Electron Image) de morfología superficial ; los electrones retrodispersados producen imágenes con diferente brillantez en función de la composición química y topográfica de la superficie (BEI, Backscattered Electron Image) y finalmente los rayos X , EDS (Energy Dispersive Spectrometer) obtienen información químico-composicional de la muestra.

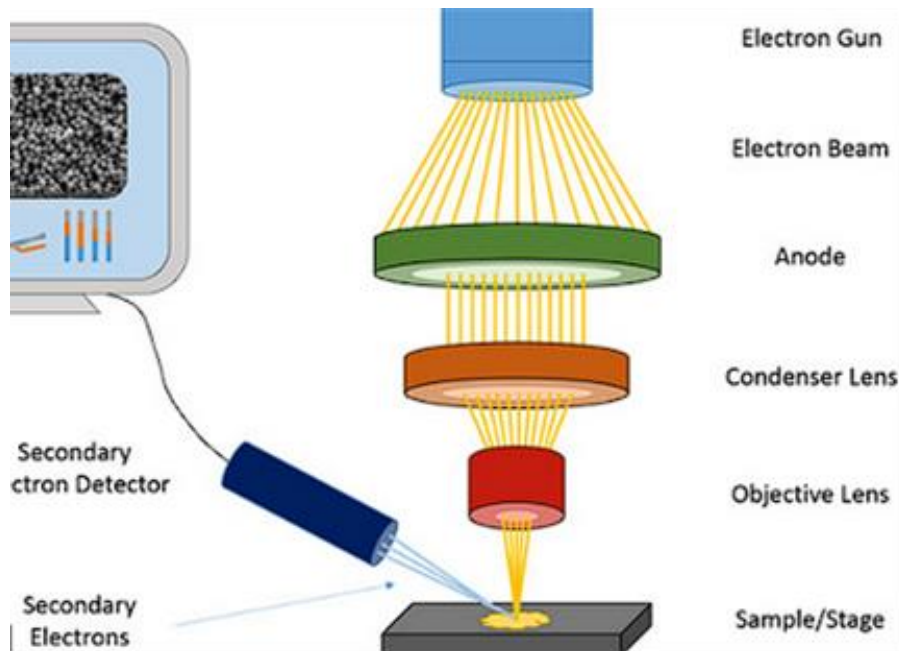


Figura 56. Esquema de equipo SEM.

Espectroscopia de rayos X de energía dispersiva (EDS).

La espectroscopia de energía dispersiva (EDS), es una técnica analítica que permite la caracterización química/análisis elemental de materiales, mediante rayos X emitidos como resultado de la interacción de los electrones del haz primario con los átomos de la muestra. Un material excitado por una fuente de energía disipa parte de la energía expulsando un electrón del núcleo. Para devolver el átomo ionizado a su estado fundamental, un electrón de la capa externa de mayor energía, llena la capa interna vacante y durante proceso libera una cantidad de energía igual a la diferencia de energías en forma de rayos X, que tiene un espectro característico basado en su átomo de origen. Esto permite el análisis de la composición de un volumen de muestra específico excitado por la fuente de energía siendo la posición de los picos en el espectro el que identifica el elemento y la intensidad de la señal correspondería con la concentración del elemento.

Perfilometria.

Es una técnica de alta precisión para determinar el espesor de películas delgadas, con el equipo Dektak del instituto de física IFUAP, se pueden medir espesores menores a 100\AA . La muestra que se requiera medir necesita una referencia para poder comparar entre las 2 superficies y determinar el grueso de la capa depositada, por lo que se recomienda cubrir una zona del depósito. De esa manera la aguja que recorre el área superficial podrá detectar el sesgo y determinar de manera precisa el espesor de la capa.

Espectroscopia de ultravioleta visible Uv-vis.

La espectroscopia óptica es una de las técnicas de caracterización más utilizadas para el estudio de materiales, se basa en el proceso de absorción de la radiación ultravioleta-visible, que causa la promoción de un electrón a un estado excitado. Los electrones que se excitan al absorber radiación de esta frecuencia son los electrones de enlace de las moléculas, por lo que los picos de absorción se pueden correlacionar con los distintos tipos de enlace presentes en el compuesto. El espectro UV-Visible es una representación gráfica de la cantidad de fotones que se absorben, expresada en términos de absorbancia, en función de la longitud de onda de dichos fotones. Debido a ello, la espectroscopía UV-Vis se utiliza para la identificación de los grupos funcionales presentes en una molécula. Las bandas que aparecen en un espectro UV-Vis son anchas debido a la superposición de transiciones vibracionales y electrónicas. Durante la caracterización la luz puede ser absorbida, transmitida o reflejada.

Mediante el modelo Tauc plot, se puede determinar el ancho de banda y el tipo de transición del material.



Figura 57. Equipo UV-VIS

Caracterizaciones eléctricas.

Las medidas eléctricas típicas que se realizan en el estudio de dispositivos semiconductores son I-V, C-V y fotorespuesta, de estos estudios es posible la extracción de parámetros importantes que son inherentes al dispositivo. Para estas medidas se utilizó el analizador de parámetros de dispositivos semiconductores B1500A [35].



FIGURA 58. EQUIPO KEYSIGHT B1500A

Para la medida en I-V, C-V en oscuridad y con luz, se utilizó una lámpara de halógeno con una potencia de 300mW/cm² a un Angulo de 40°, en una caja negra y se hizo corridas de voltaje de -2V hasta 3V, al aplicar un potencial se mide la corriente resultante, fotorespuesta o capacitancia para poder hacer las diferentes caracterizaciones y poder obtener los parámetros de comportamiento del dispositivo fotovoltaico.

Medida de corriente contra voltaje en oscuridad con aplicación de luz.

Con la medida de I-V en oscuridad de una celda solar, lo que se requiere es obtener una curva característica tipo diodo para derivar un modelo de circuito equivalente (figura 59).

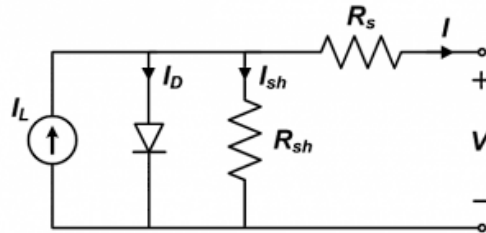


Figura 59. Diagrama equivalente de una celda solar.

Este modelo se describe en [36], donde la ecuación es gobernada por la ley de corrientes de Kirchhoff, en donde I_L es la corriente fotogenerada, I_D es la corriente dependiente del voltaje de pérdida por recombinación e I_{sh} es la corriente que pasa por la resistencia shunt. La ecuación del modelo simple toma en cuenta la resistencia en serie, que es la resistencia en los contactos, la resistencia shunt, toma en cuenta la resistencia en la interfaz de la unión, el diodo que es la representación de una unión PN y una fuente de corriente que es la corriente fotogenerada, la ecuación 11 [37].

A partir de este modelo podemos realizar suposiciones de una gráfica I-V con luz y oscuridad y obtener valores como el factor de idealidad (n), la corriente de corto circuito (I_0), además como se explica en [37], el cambio de la corriente respecto al voltaje en los puntos de V_{oc} y I_{sc} es posible determinar también la resistencia en serie y la resistencia shunt (figura 60)].

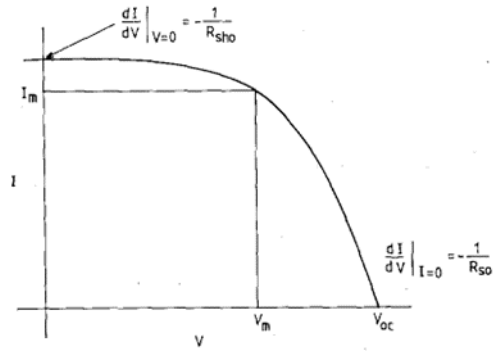


Figura 60. Representación del cálculo de resistencia en serie y resistencia shunt

Ahora de las curvas I-V, con la aplicación de luz, se puede calcular los parámetros solares como son: Corriente de corto circuito (I_{sc}), Voltaje de circuito abierto (V_{oc}), Corriente máxima (I_m), Voltaje máximo (V_m), potencia máxima, factor de llenado y la eficiencia de la celda solar (figura 61).

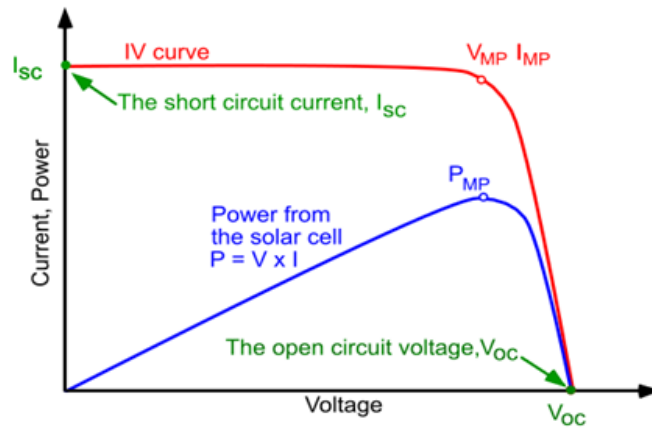


Figura 61. Grafica I-V de una celda solar

Medida de Capacitancia contra voltaje.

La caracterización C-V se usa para estudiar las propiedades básicas de los dispositivos semiconductores, tales como: la barrera de potencial, la región de deplexion, el dopado de los materiales, las densidades de trampa en la interfaz, tiempos de relajación. La ecuación de la capacitancia de la unión para una heterounión se expresa como:

$$C' = \left\{ \frac{q\epsilon_s N_a N_d}{2(V_{bi} + V_R)(N_a + N_d)} \right\}^{1/2} \dots \dots \dots (33)$$

En donde: q, Es la carga del electrón.

ϵ_n , Es la constante dieléctrica del semiconductor tipo n.

ϵ_p , Es la constante dieléctrica del semiconductor tipo p.

N_a , Es la concentración de aceptores.

N_d , Es la concentración de donadores.

V_R , Es el voltaje aplicado en condición inversa.

V_{bi} , Es la barrera de potencial.

Si en la unión de semiconductores, casi toda la región de carga espacial se extiende hacia la región de bajo dopado, la capacitancia de la unión es:

$$C' \approx \left\{ \frac{q\epsilon_s N_d}{2(V_{bi} + V_R)} \right\}^{1/2} \dots \dots \dots (33.1)$$

Finalmente, al asumir un solo lado de la función de la concentración de bajo dopado la ecuación de reduce a:

$$\left(\frac{1}{C'} \right)^2 = \frac{2(V_{bi} + V_R)}{q\epsilon_s N_d} \dots \dots \dots (33.2)$$

Que si se grafica con respecto al voltaje es, bajo una alta frecuencia se localiza tanto la concentración de dopado como la barrera de potencial V_{bi} .

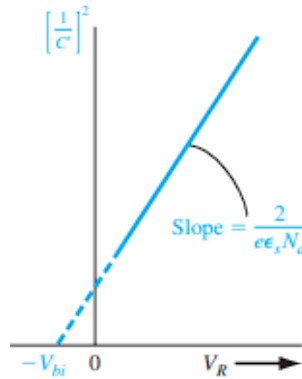


FIGURA 62. Ejemplo del cálculo de barrera de potencial a partir $1/C^2$

La capacitancia de difusión descrita por la ecuación [38], describe el mecanismo de carga y descarga de huecos en la región n y electrones en la región p y ocurre a voltaje de polarización directa y normalmente es más grande la capacitancia de la unión en cuanto magnitud.

Para el cálculo de densidad de trampas se utiliza la ecuación explicada en [39], donde se necesita la conductividad G_p , ω es la frecuencia y A es el área.

$$N_{ss} = \frac{(G_p/\omega)_{max}}{0.402qA} \dots\dots\dots (34)$$

Fotorespuesta.

Una de las propiedades importantes en un fotodiodo, se mide a través de la fotorespuesta, en donde se puede determinar la fotocorriente que genera el dispositivo al interactuar con la luz. De esta caracterización se determina los tiempos de subida y de caída de los pulsos a determinados tiempos de exposición del haz de luz (figura 63). De esta forma se puede comparar la respuesta que tienen diferentes materiales.

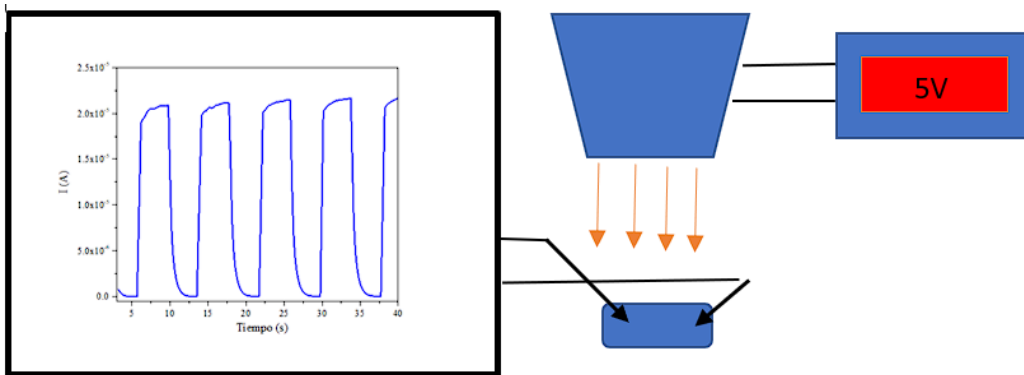


Figura 63. Ilustración de la medición de fotorespuesta.

Responsividad.

La responsividad de un fotodiodo es la razón de la fotocorriente generada y la incidencia de potencia óptica. La capacidad de respuesta de los dispositivos suele ser más alta en una región de longitud de onda en la que la energía del fotón está un poco por encima de la energía de la banda prohibida y disminuye bruscamente en la región de la banda prohibida, donde la absorción disminuye. Para la caracterización se utiliza una luz monocromática que es condicionada para obtener cierta longitud de onda de 300nm a 700 nm, en longitud de onda mientras medimos la corriente resultante en el dispositivo de esta manera conociendo la potencia de la lámpara, el área efectiva del dispositivo y la fotocorriente generada es posible obtener la responsividad. Como se menciona en [23], la responsividad está relacionada con la eficiencia cuántica mediante la siguiente ecuación.

$$R = \eta \frac{q}{h\nu} \dots \dots \dots (35)$$

Siendo η , la eficiencia cuántica, $h\nu$, la energía del fotón y q , la carga del electrón

CAPITULO IV

Fabricación y caracterización de monocapa Si/GaN y Si/InGaN crecidas mediante la técnica de depósito ALD.

Uno de los objetivos de esta tesis es la fabricación de dispositivos fotovoltaicos tipo tándem, usando una oblea de silicio como capa absorbente y el depósito de la capa emisora III-nitruro, por medio de la técnica de depósito PEALD además de caracterizar eléctrica y morfológicamente las capas crecidas de nitruro de galio y nitruro de galio indio, teniendo más información para corroborar los datos obtenidos en la simulación para la retroalimentación del código.

Fabricación de las heteroestructuras n-Si/n-GaN y n-Si-n/n-InGaN por medio de la técnica de depósito de capas atómicas asistido por plasma (PEALD).

Una vez realizado el estudio de los dispositivos Si/III-nitruros, basados en la simulación de dispositivos semiconductores, por medio del software Silvaco atlas, se determinó los parámetros ideales, para tener dispositivos optoelectrónicos funcionales, sin embargo, no fue posible la compensación de los materiales de las películas GaN e InGaN, por problemas técnicos con el equipo ALD. Se propuso la fabricación de las heteroestructuras n-Si/n-GaN y n-Si/n-InGaN con un silicio de bajo dopado, para poder obtener un comportamiento tipo diodo.

Proceso general de fabricación de los dispositivos.

El proceso de fabricación de los dispositivos fotovoltaicos Si-n/GaN-n y Si-n/InGaN-n se llevó a cabo mediante los siguientes pasos:

- Limpieza de sustratos.
- Proceso PEALD.
- Finalización de proceso.
- Colocación de muestras en cámara de guantes.
- Depósito de contactos metálicos.

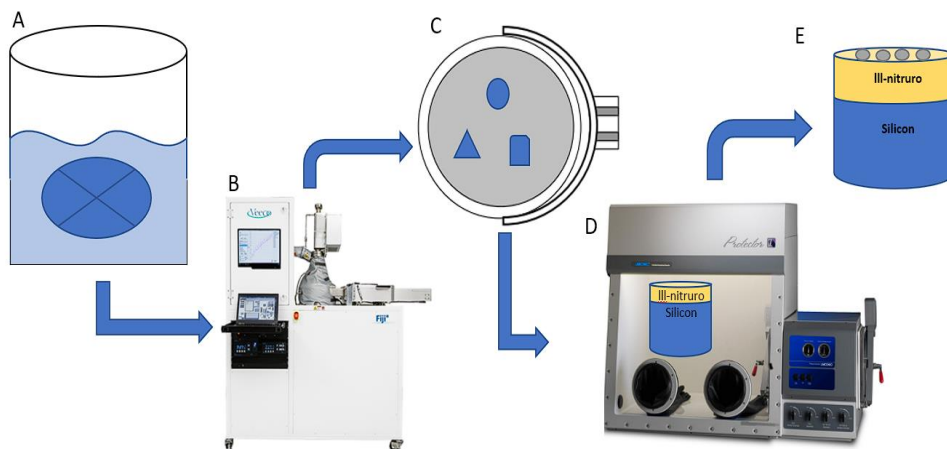


Figura 64. Proceso de fabricación de Si/InGaN Y Si/GaN

Limpieza de obleas.

Como se demostró con las simulaciones, el silicio tipo n con baja concentración de donadores, favorece el transporte en la unión Silicio y el material III-V compuestos por nitruros, lo que favorece el movimiento de los portadores de carga a través de las barreras de potencial. Así que la oblea utilizada tiene una resistencia de 1-10 ohm. La primera limpieza de los sustratos fue mediante “RCA CLEAN”, el cual es un proceso para remover los iones metálicos y la capa de oxido que se forma durante el proceso.

Los 3 procesos que se realizaron fueron: RCA I, se prepara una solución 3:1 (HCL: HNO₃), se introducen las muestras durante 20min a 80°C y se enjuagan con agua desionizada; RCA II, se prepara una solución 5:1:1 (H₂O: NH₄OH: H₂O₂) para introducir las muestras por 20 min a 80°C y se enjuagan en agua desionizada; HF al 10%, se sumergen las muestras en HF para remover la capa de oxido formada por los anteriores procesos y finalmente en agua desionizada se enjuagan las muestras para posteriormente secarlas, para tenerlas listas e introducirlas al reactor ALD (figura 65).

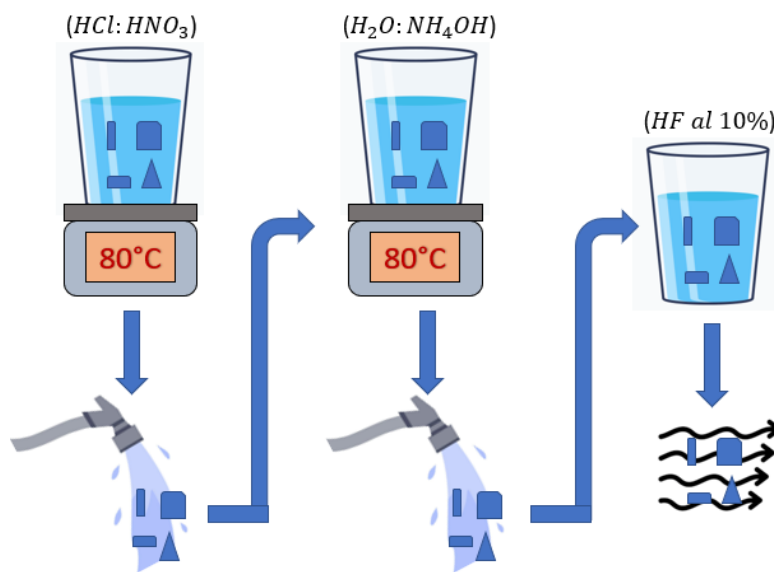


Figura 65. Proceso de limpieza de sustratos.

Proceso PEALD

En el encendido de la máquina, nos aseguramos de seguir el siguiente proceso:

- Revisión de gases: presión y abertura de los gases de argón (Carrier), argón (plasma), nitrógeno e hidrógeno.
- Encendido y revisión de temperatura de enfriamiento de chiller.
- Encendido del sistema ALD: Fuente generadora de nitrógeno, bomba seca, interruptor principal, interruptor secundario, fuente generadora de radiofrecuencia RF, Fuente de ajuste de RF (matching), encendido de laptop y se abre programa ALD.
- Cambio de precursores.

Inicio y terminación del proceso.

Posterior al encendido del equipo se carga el proceso programado al software para dar inicio al crecimiento, en este paso se recomienda una limpieza con plasma inerte de argón a 50 W, para quitar algún componente de la superficie y preparar la muestra para el depósito del material. Lo primero que hace el sistema es llegar a la presión de 10mTorr y comienza con la estabilización de temperaturas dentro de la cámara, líneas de gas y precursores por medio de chaquetas térmicas y finalmente cuando está listo, el sistema inicia automáticamente el proceso de crecimiento del material que nosotros designamos. Luego de que el sistema termine con los ciclos de crecimiento que establecimos, detiene el proceso para empezar con el apagado de resistencias, lo que recomienda el fabricante es hacer una purga del sistema durante 1hr para deshacerse de cualquier subproducto que haya quedado en el reactor. Cuando terminamos con el crecimiento del material, llevamos las muestras a la cámara de guantes, para posteriormente colocarle los contactos de pasta de plata, y con un calentamiento de 60° por 3 horas secamos la pasta para las caracterizaciones eléctricas de los dispositivos.

Experimento I: Depósito de capa de nitruro de galio sobre una oblea de silicio tipo n.

El proceso inicia con la introducción de los sustratos de silicio al reactor, una vez dentro, se realiza la secuencia de alto vacío necesaria, para el funcionamiento de la máquina. Este sistema lo hace al tener dos caminos separados de bombeo, que son controlados por la apertura y cierre de las electroválvulas “rough”, “isolation” y “gate”, que permiten controlar el camino de cada bomba por separado, y llegar al vacío de 10s mTorr.

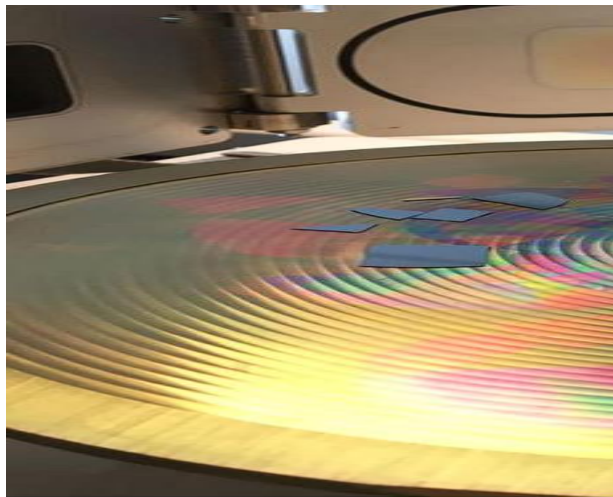


Figura 66. Introducción de muestras al reactor.

A las muestras de silicio (dentro del reactor), se les hizo una segunda limpieza seca con plasma en un ambiente de argón a 100W. Esta tecnología descompone y vaporiza las sustancias orgánicas que pudiesen haberse adherido a la superficie del sustrato. Las ventajas de este método son que no produce residuos, además de que ayuda a tratar la superficie antes del depósito. Durante el proceso la superficie se hace hidrófila, rompiendo los enlaces moleculares, dejando así, grupos hidroxilos en la superficie que mejoran la calidad del depósito de la capa.

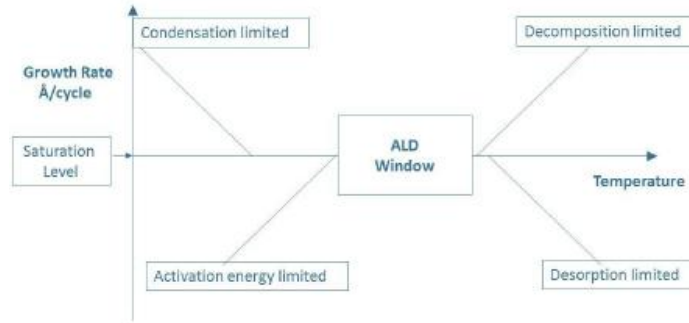


Figura 67. Ventana de depósito ALD.

Para el depósito de la película delgada nitruro de galio (GaN) en silicio (100), se introduce la programación del proceso (receta) con los siguientes parámetros de depósito PEALD (tabla 10). En donde se toma en consideración la ventana de proceso ALD (ALD Windows), en ella nos indica que, a cierto rango de temperatura, la tasa de deposición será bien definida y a medida que se sobrepase o no alcance esta temperatura, puede afectar la calidad del depósito. La temperatura del reactor se fija en 300°C, que es una medida que ha funcionado bien en depósitos anteriores de este material, mientras que para el precursor de TMG, se mantiene a temperatura ambiente, ya que este precursor tiene una alta presión de vapor a temperatura ambiente; tanto así que no necesita un calentamiento del precursor.

Tabla 10 Parámetros de depósito GaN

Parámetros de deposito	GaN
Precursor	TMG (trimetyl galio).
Temperatura del precursor	TMG 25°C.
Temperatura del reactor	300°C.
Tiempo de exposición del precursor.	TMG, 0.015s.
Tiempo de purga	TMG, 10s.
Tiempo de exposición de plasma N_2H_2 a 270W	Relación 50sccm-50sccm, 20s.
Tiempo de exposición de plasma Ar a 50W	100sccm, 10s.
Ciclos	500 ciclos.
Crecimiento por ciclo	~0.2 Å/ciclo.

El proceso de depósito visto en la figura 66, empieza con: 1) un pulso del precursor de TMG de 0.015s, donde la molécula trimetyl es descompuesta para ser chemi-absorbida en la superficie del silicio formándose una capa. 2) los subproductos de las reacciones químicas son purgados durante 20s , para retirar los subproductos de la reacciones químicas , 3) Se introduce el co-reactante, usando una combinación de los gases de nitrógeno e hidrogeno con una relación 50:50 sccm, que reacciona con la superficie depositada y para aumentar la reactividad se aplica un plasma de 270W por 20s , 4) se eliminan los subproductos remanentes de grupos Methyl con una purga de 5s , 5) y al final ,se aplica un plasma de argón de 50W , con un flujo constante de 100sccm por 10s , esto para mejorar la cristalinidad de material .Este proceso se repitió por 450 ciclos, teniendo un crecimiento teórico por ciclo $\sim 0.2\text{Å}/\text{ciclo}$, para el nitruro de galio (GaN).

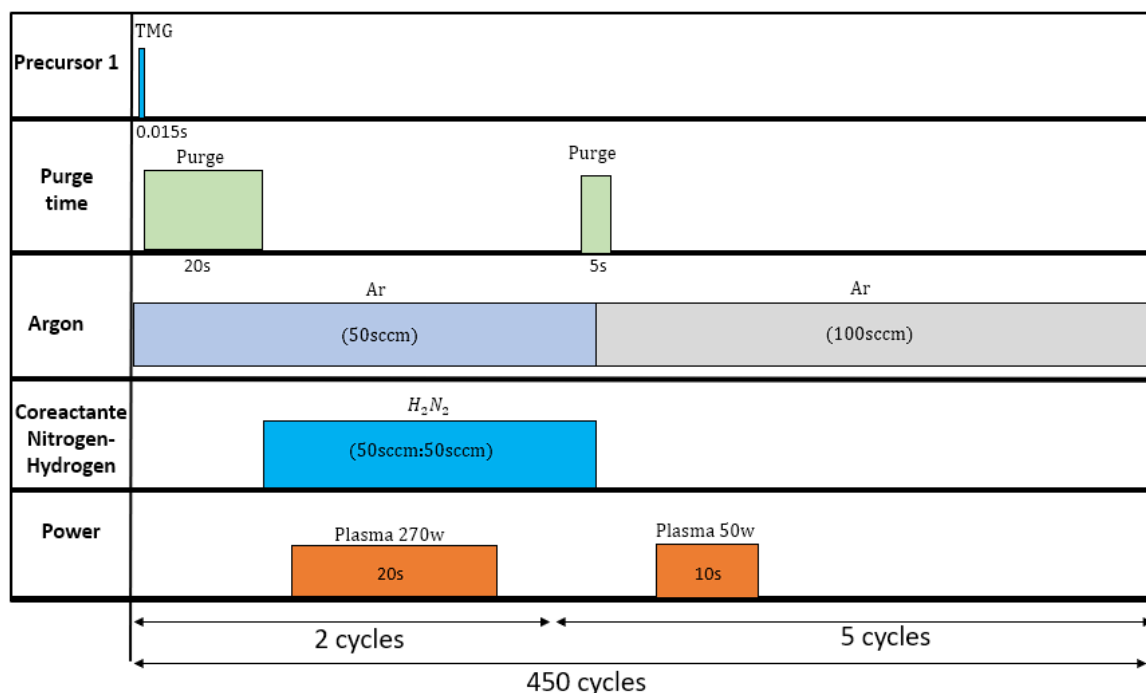


Figura 68. Proceso de depósito de GaN en silicio

Cuando termina el proceso PEALD, comienza la purga total del sistema, por 1hr para deshacerse de los subproductos de las reacciones químicas que se pudiesen haber quedado dentro del reactor, posteriormente al tiempo de purga, se ventila el sistema (presión del ambiente 760Torr) para poder abrir el reactor y retirar los sustratos de la cámara. Con los 500 ciclos, se logró depositar un aproximado de 10nm de película de nitruro de galio. Estas muestras fueron colocadas en la cámara de guantes.

Experimento II: Depósito de capa de nitruro de galio indio sobre una oblea de silicio tipo n.

El proceso de preparación del sistema-muestra antes del depósito se divide en :1) La introducción de los sustratos limpios al reactor, 2) El sistema se lleva a una presión de 10mTorr, 3) limpieza con plasma de argón 100W ,4) se carga receta para introducir los parámetros necesarios para el proceso (tabla 11).

Tabla 11 .Parámetros de depósito ALD para la película InGaN.

Parámetros de dispositivo	InGaN
Precursor	TMG (Trimetyl galio) y TMI (Trimetyl indio).
Temperatura del precursor	TMG 25°C y TMI 45°C.
Temperatura de reactor	220°C.
Tiempo de exposición del precursor.	TMG ,0.015s y TMI,0.06s.
Tiempo de purga	TMG,10s y TMI 5s.
Tiempo de exposición de plasma N_2H_2 a 270W	Relación 50sccm-50sccm, 20s.
Tiempo de exposición de plasma N_2 a 270W	50sccm, 60s.
Ciclos	40 superciclos.
Crecimiento por Ciclos	~3.4 Å/superciclo.

En el crecimiento de InGaN, se utilizaron 2 precursores; El Trimetyl galio (TMG) y el Trimetyl indio (TMI), como se muestra en la tabla. Para el trimetyl indio, se requiere de un calentamiento del precursor. Esto se logra por medio de una chaqueta térmica, que aumenta la temperatura del precursor a 45°C, suficiente para tener una presión de vapor adecuada [40]. La temperatura del reactor es un parámetro importante, ya que el precursor del trimetyl indio es más volátil, por lo que se podría perder la “ventana ALD” y tener un crecimiento inadecuado, así que, la temperatura del reactor se estableció a 220°C.

Composición atómica de la película InGaN.

El enfoque más común para la síntesis de un material ternario por ALD es alternar entre varios ciclos de dos procesos ALD binarios lo que conocemos como superciclos. Realizando n ciclos del proceso binario GaN y m ciclos InN se forma la película delgada del elemento ternario InGaN. En at [41] mencionan sobre los tipos de materiales ternarios que se pueden formar en el proceso ALD:

- Homogéneos
- Multicapas
- Dopado.

En nuestro caso requerimos de una película homogénea, y con una concentración de entre 25% a 45% de GaN y 75% a 55% de InN.

Tabla 12 Valores de composición atómica calculados.

Elemento binario	GaN	InN
Ciclos	2	5
Razón de ciclo	$CR_I = 0.71429$	$CR_{II} = 0.28571$
Densidad atómica	$\rho_I = 6.1$	$\rho_{II} = 6.81$
Crecimiento por ciclo	$g_I = 0.2$	$g_{II} = 0.6$
Composición atómica (%)	~43%	~57%

Cuando se depositan materiales ternarios por ALD, la tasa de crecimiento y la composición de la película debe seguir la regla de las composiciones (rule of mixtures) [41], por lo que el cálculo de la composición es de acuerdo con la siguiente ecuación: De acuerdo con la tabla para los valores seleccionados de este depósito se obtiene una composición de InN del 57% y 43% para GaN.

$$\text{Composición atómica (\%)} = \frac{\rho_I g_I CR_I}{\rho_I g_I CR_I + \rho_{II} g_{II} CR_{II}} \times 100\%$$

Proceso PEALD de InGaN.

En la tabla 11, se expusieron los parámetros de depósito que se utilizaron para crecer el material $In_{57}Ga_{43}N$, conforme al cálculo aproximado que se realizó de composición atómica y las consideraciones de depósito reportadas. Como se muestra en la figura 67, se estableció 40 superciclos (5 ciclos normales de InN y 2 ciclos de GaN). El proceso de depósito empieza con 1) un pulso del precursor de TMG de 0.015s, la molécula trimetyl es descompuesta y es chemi-absorbida en la superficie del silicio, para depositar la capa de galio 2) los subproductos de las reacciones químicas son purgados durante 20s, 3) se introduce el co-reactante, que es una combinación de los gases de nitrógeno e hidrogeno con una relación 50:50 sccm que, reacciona con la superficie depositada y para aumentar la reactividad se aplica un plasma de 270 W por 20s 4) se deshace de los subproductos con una purga de 5s, este proceso lo realiza 2 veces (con una razón de ciclo de 0.28) y continua con el ciclo del InN en donde 1) se estable un flujo constante de nitrógeno a 50sccm, 2) se inyecta el precursor de trimetyl indio por 0.06s y se realiza purga por 10s 3) se activa el plasma a 270W de nitrógeno para el co-reactante y 4) se realiza purga de los subproductos.

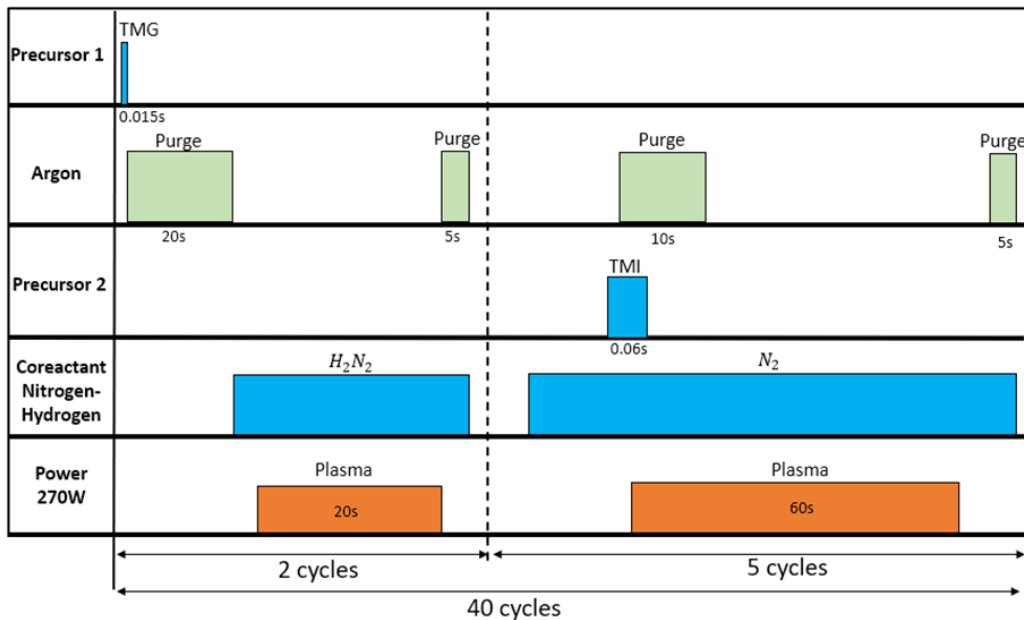


Figura 69. Proceso de depósito de Si/InGaN.

Este proceso lo hace por 5 ciclos (con una razón de ciclo de 0.71), y 40 superciclos forman la película de nitruro de galio indio (figura 70).

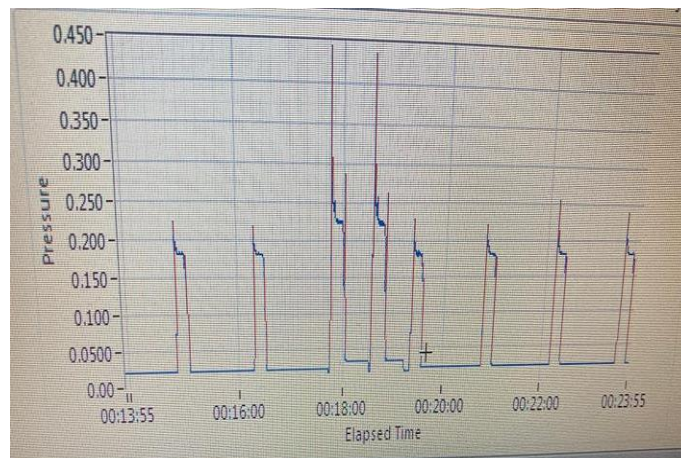


Figura 70. Variación de la presión interna del reactor al inyectar los gases. \square .

En la figura 68 se muestra la interfaz de usuario, de la maquina ALD asistido por plasma. En la imagen se notan los cambios en la presión interna al inyectar los pulsos de los gases, los pulsos más grande son los pulsos del trimetyl galio y los pequeños son los del trimetyl indio. El proceso termino con los 40 superciclos en un tiempo de 3hrs de proceso, 1hr de purga y 1 hr de estabilización del sistema. El depósito era visible sobre todo en vidrio (figura 69)

Con los 40 superciclos, se logró depositar un aproximado de 13.6nm de película de nitruro de galio indio.



Figura 71. Fin del proceso de depósito de InGaN.

Difracción de rayos x de las películas InGaN y GaN (XDR).

La caracterización estructural de los depósitos de los materiales InGaN y GaN en silicio, se realizó por medio de la técnica de caracterización XDR, en donde se especificó un haz rasante con un rango de medición de entre 1° a 70° . En el estudio del dispositivo Si/GaN (figura 72), se pueden encontrar los picos característicos en los ángulos del compuesto GaN en 32.38° , 34.44° y 36.54° que corresponden a los planos de difracción (100), (002) y (101) respectivamente. De acuerdo con la carta cristalográfica (96-723-4260), concuerdan los tres 3 picos del nitruro de galio (GaN), cuya estructura cristalina es de tipo hexagonal [42].

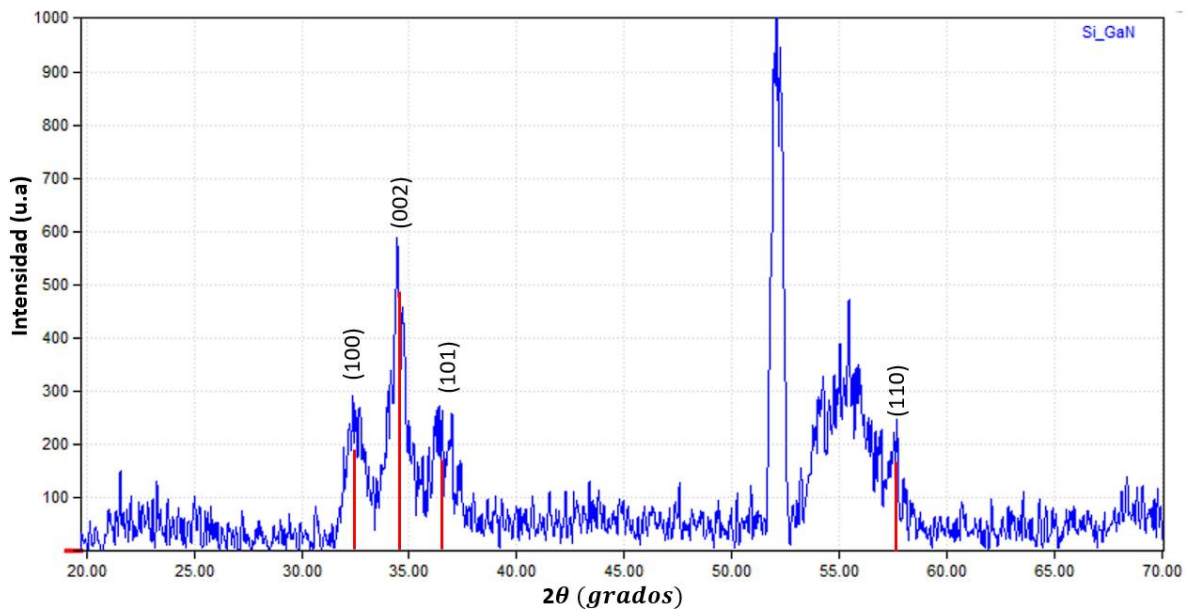


Figura 72. Difractograma de Si/GaN.

En el caso del material ternario InGaN con una estructura hexagonal, se espera que los picos característicos de cada material binario InN y GaN, se desfasen hacia valores más bajos 2θ , como se muestra en [43], si la razón de superciclos aumenta, la concentración In aumenta. De esta manera (figura 73) los picos característicos del nitruro de indio (InN) con la estructura cristalina hexagonal que tiene picos 2θ representativos en: 29.10° , 31.15° , 33° , 43° , 52° , 56.65° , 61.45°

y 62.60° de acuerdo con [44], y el nitruro de galio (GaN) son: 32.3° , 34.44° , 36.7° , 48° , 57.65° , 60.5° y 63.16° (carta cristalográfica 96-723-4260 de la base de datos COD) son recorridos.

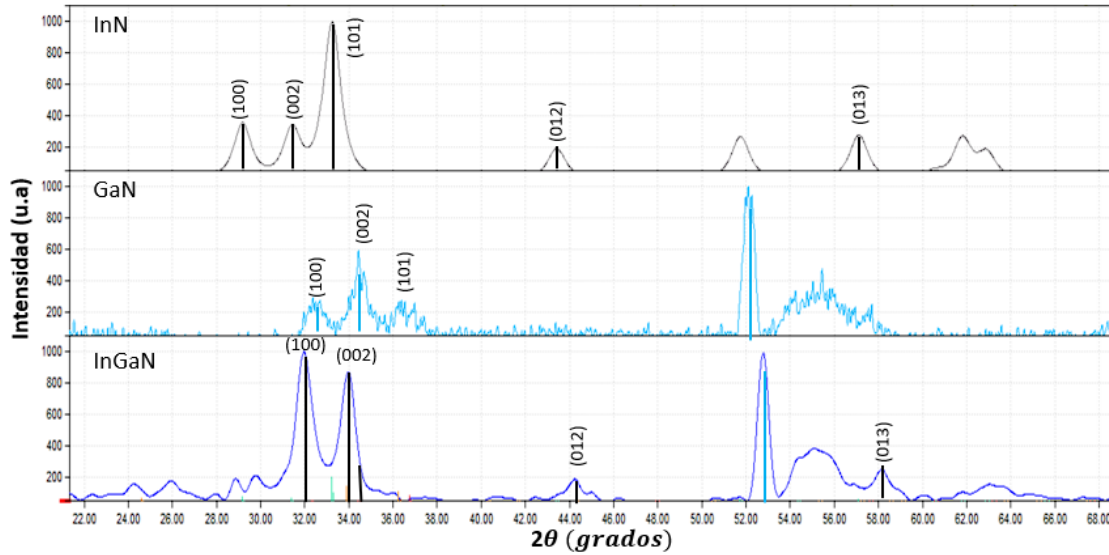


Figura 73.-Comparacion de los Difractogramas A) InN, B) GaN y C) InGaN.

Los picos que se mencionan en [44] a una razón de superciclo de 0.75 a ángulos a 2θ son 31° , 33° y 35° correspondientes a los planos (100), (002) y (101) mientras que a una razón de 0.50 de superciclo reportan ángulos a 2θ a 32° , 34° 35.5° , para nuestro crecimiento la razón de superciclo fue de 0.71 con ángulos en 31.9° y 33.95° correspondientes a los planos (100) y (002). A diferencia de lo reportado en el artículo, la orientación en el plano 101 no está presente en el difractograma (figura 74).

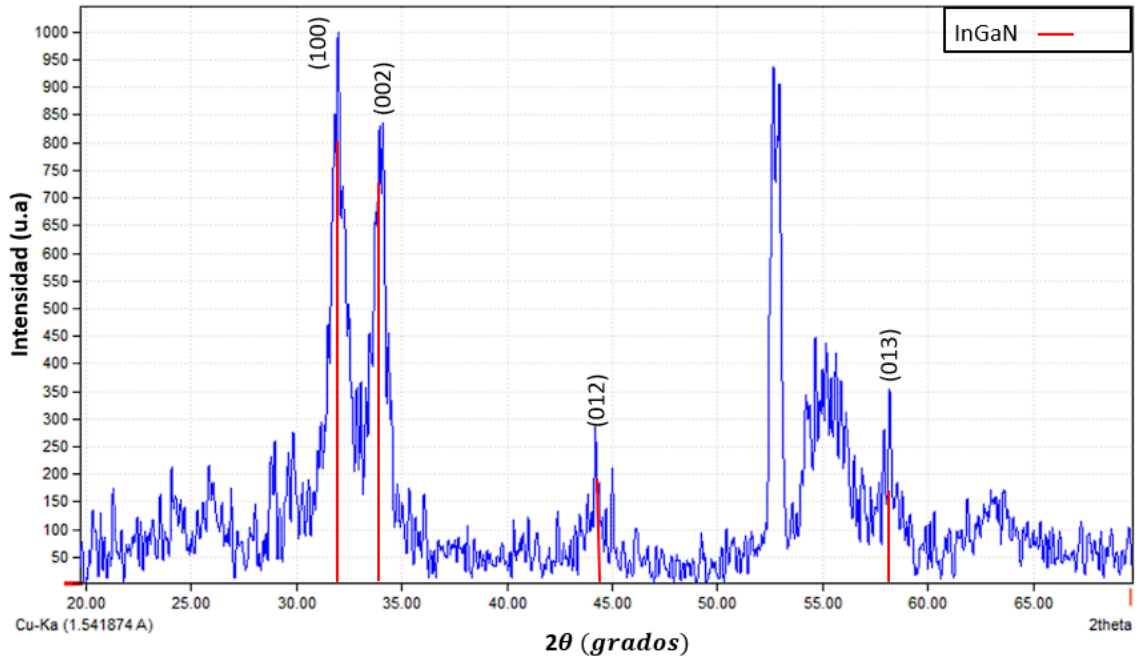


Figura 74. Difractograma de InGaN.

Reflectometría de rayos X (XRR) Si/GaN y Si/InGaN.

La técnica XRR, se realiza para investigar las heteroestructuras, las superficies y las interfaces de capa delgada de las heteroestructuras. Los parámetros especificados fueron: Angulo critico 2θ a 0.5 grados, barrido de 0 a 3.5, con el difractor para medir ángulos de 0.3-10 grados, tamaño de rejilla 1 grado y con paso angular 0.001grados.

La interferencia de los haces de rayos X parcialmente reflejados crea un patrón de oscilación que se observa en las gráficas de reflectividad (figura 75 y figura 76) de los dispositivos Si/InGaN y Si/GaN. Para el análisis de los datos de reflectividad se utilizó el software XGEN para realizar el ajuste de los datos experimentales y estimar de manera precisa el espesor de las películas, la densidad y la rugosidad de las películas GaN e $In_xGa_{1-x}N$.

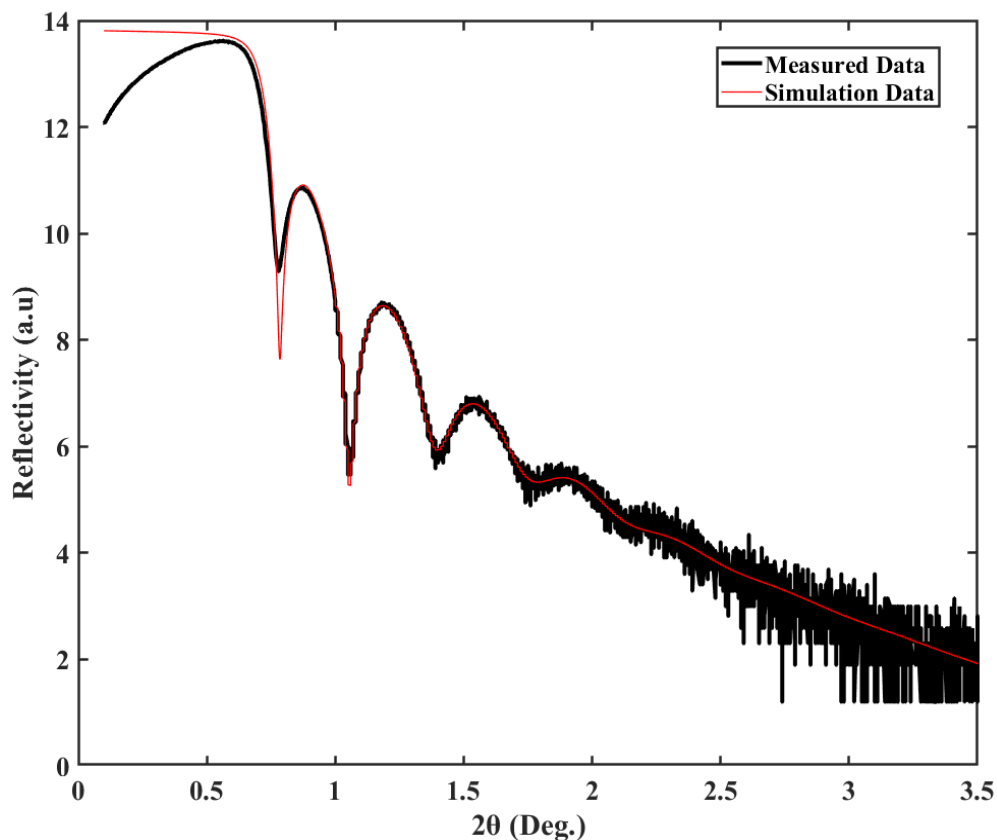


Figura 75.- Medición de reflectividad de la monocapa GaN

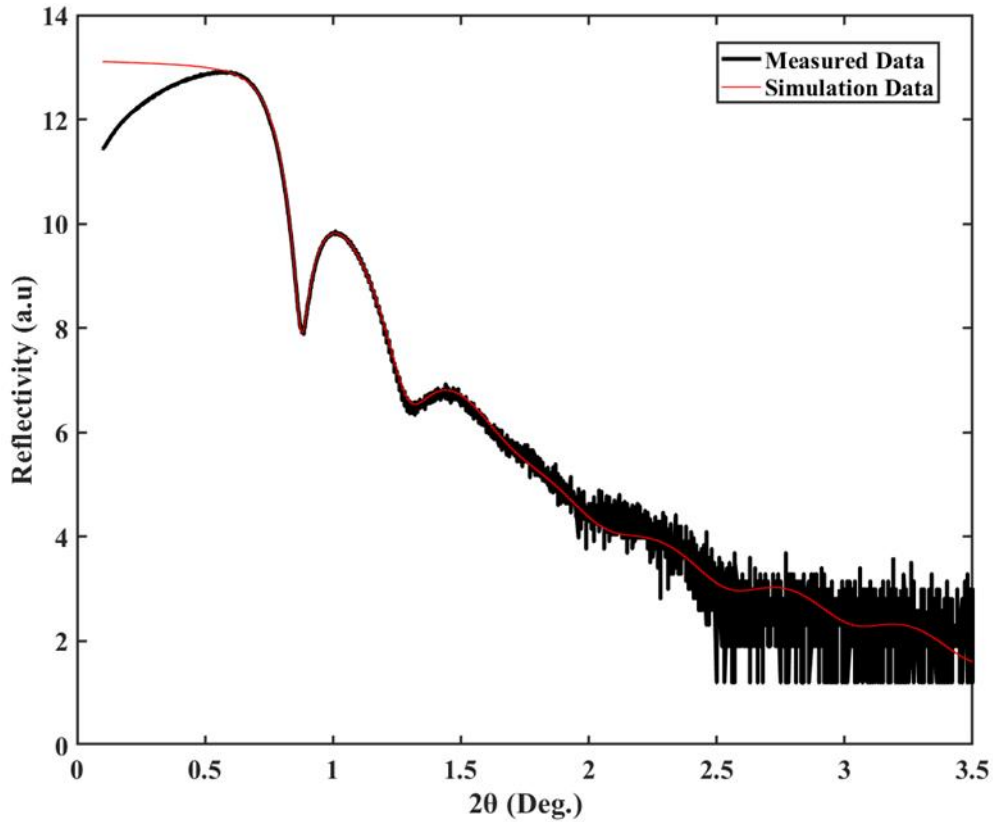


Figura 76. Medición de reflectividad de la monocapa InGaN

El perfil de GaN muestra dos franjas de Kiessing adicionales en comparación con $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, lo que indica la diferencia de espesor, los resultados evidencian una mayor densidad y la formación del material SiO_2 en la interfaz de unos pocos nanómetros, Por otro lado, el tratamiento con ALA reveló que el crecimiento aumentó a $\sim 0,4 \text{ \AA}$ por ciclo. Los parámetros calculados se muestran la tabla [13].

Tabla 13 Datos calculados de la gráfica XRR

	Si/GaN	Thickness (nm)	Roughness (nm)	Density (g/cm³)
Layer	GaN	19.3	1.26788	6.15
Interface layer	SiO_2	1.39	4	2.64
	Si/$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	Thickness (nm)	Roughness (nm)	Density (g/cm³)
Layer	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	14.4	0.557623	6.79
Interface layer	SiO_2	2.8	23.22	2.64

Espectrometría de masas de iones secundarios (Secondary-ion mass spectrometry, SIMS)

Para analizar la composición de las superficies sólidas y las películas delgadas del proceso PEALD de las heteroestructuras Si/GaN y Si/InGaN, se realiza la técnica SIMS. Las figuras 77 y 78, muestran los perfiles de profundidad de espectroscopia de masas de iones secundarios para Si, Ga, N e In del crecimiento de las muestras de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ y GaN sobre silicio. Los elementos constitutivos de los III-Nitruros presentan una distribución uniforme. Además, se observa claramente una Inter difusión en la interfase Sustrato/película; este fenómeno es generado por los átomos de Ga que se difunden en la oblea de silicio como niveles de aceptación poco profundos. De estos datos se puede observar que el espesor de la capa de nitruro de galio (GaN) es de aproximadamente 20nm-25nm mientras que para el nitruro de galio indio está entre 7nm- 12nm.

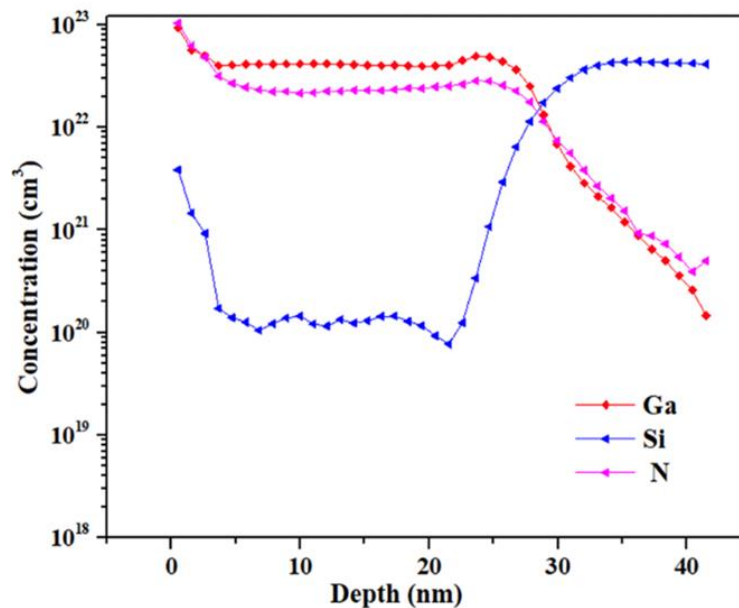


Figura 77.- SIMS de la heteroestructura Si/GaN

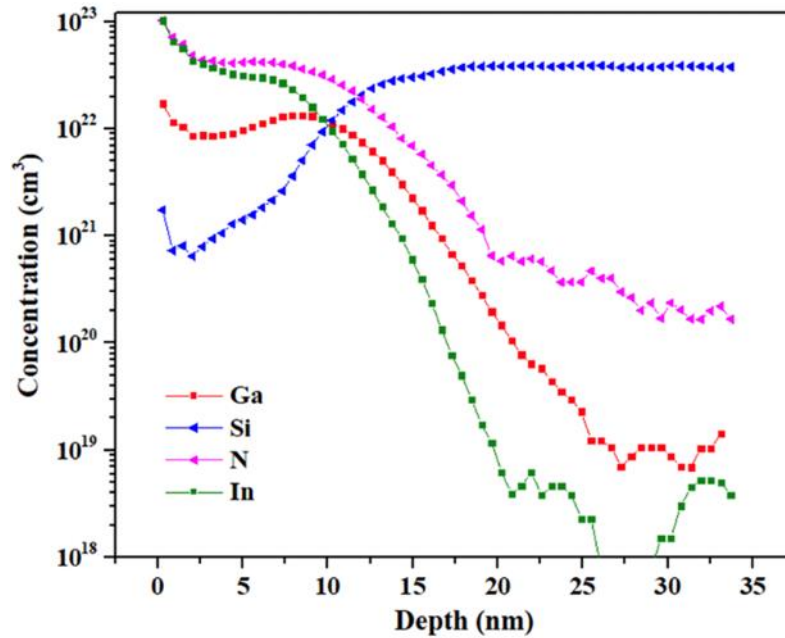


Figura 78.- SIMS de la heteroestructura SI/INGAN

El espesor calculado de SIMS contrasta con el cálculo teórico de la capa de nitruro de galio que se esperaba de 10nm, una de las posibles causas es la incorporación del ciclo de plasma de galio (ALA) y la pérdida de vacío que presentó el reactor.

Microscopia electrónica de barrido (SEM) y Espectroscopia de rayos X de energía dispersiva (EDS) de la película InGaN en silicio.

Se realizó la medición (SEM) y (EDS) en la superficie del sustrato (figura 79), para conocer la relación atómica que se formó entre los compuestos GaN, InN y silicio.

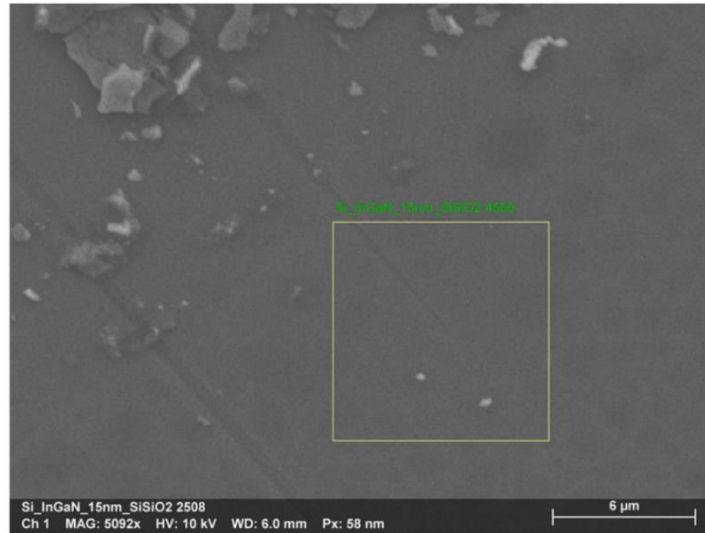


Figura 79.- Imagen SEM de la superficie de Si/InGaN.

En la figura 80, se muestran los espectros EDS de la película de InGaN. De esta grafica se nota la gran diferencia entre la capa absorbente de silicio y la película nanométrica de InGaN, en donde la señal correspondiente al silicio es mucho mayor que los elementos que componen al semiconductor ternario. Los elementos galio, nitrógeno e indio están presentes en la superficie, sin embargo, también se registró oxígeno.

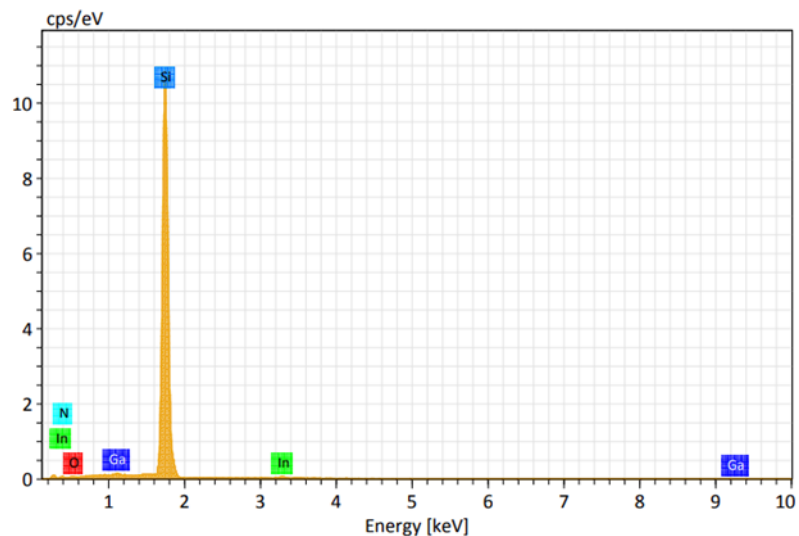


Figura 80. Espectro de EDS de Si/InGaN, análisis composicional.

En la siguiente tabla 14, se observan los porcentajes de cada elemento y su composición atómica.

Tabla 14 Composición atómica de los elementos Galio, indio, nitrógeno y oxígeno

Análisis composicional						
Galio %at.	Silicio %at.	Nitrógeno %at.	Oxígeno %at.	Indio %at.	Ga/N %at.	Fracción del Indio %at.
0.18	97.21	1.71	0.43	0.47	0.1052	0.7230

De acuerdo con el análisis composicional, se corrobora la mayor incorporación de indio que de galio, esto por el proceso de 5:2, Como se muestra del análisis SEM (figura 81), el oxígeno disminuye mucho en el bulk, pero el galio escasea en el material ternario.

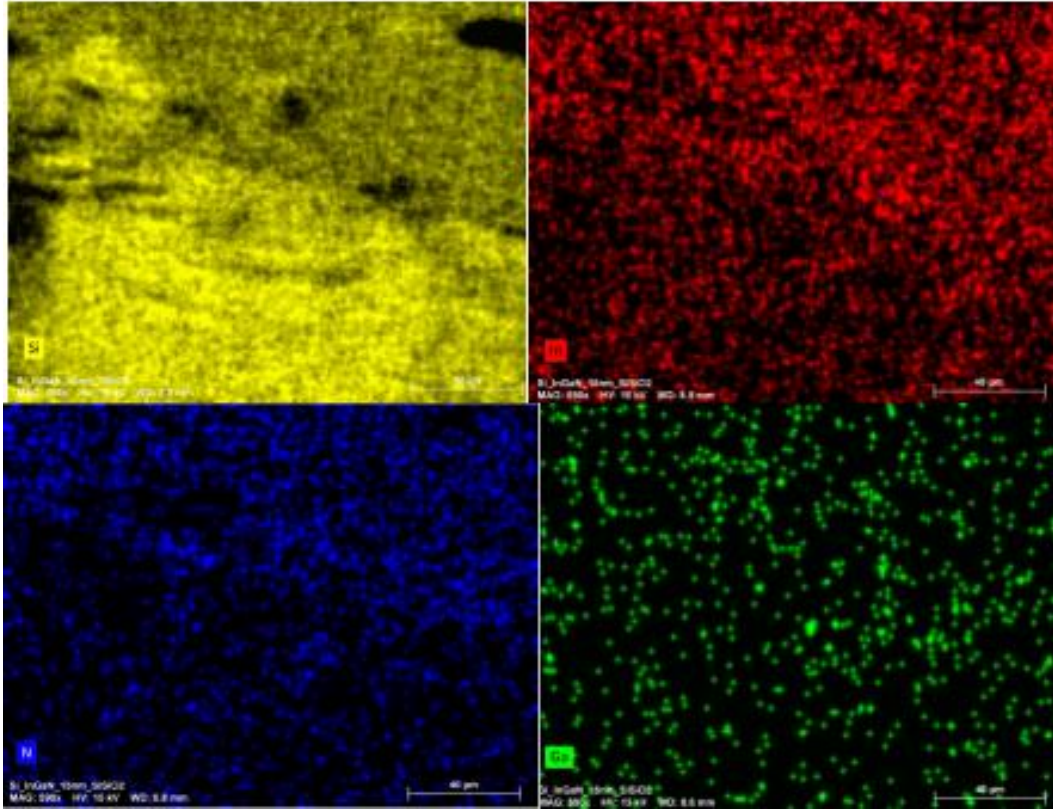


Figura 81. Mapeo elemental de SI/INGAN

Perfilometria.

Las capas de InGaN Y GaN fueron evaluadas para calcular el espesor de las películas, estas mediciones se hicieron con el equipo dektak, donde se obtuvieron los siguientes resultados.

Tabla 15 Espesores de películas nanométricas medidas con el perfilómetro.

Espesor de la capa InGaN	Espesor de la capa de GaN
5.80nm	9.35nm

Se difiere del cálculo con XRR Y SIMS debido a que no se dejó un escalón apropiado antes del depósito.

Espectroscopia de ultravioleta-visible (UV-VIS).

Se realizó la caracterización UV-Vis en el laboratorio central de IFUAP. Para ello se colocó un sustrato de silicio, para anular la línea base y obtener la medición únicamente de las películas. La respuesta es la absorbancia contra longitud de onda de las películas InGaN Y GaN. Estos datos nos sirven para calcular la transmitancia, coeficiente de absorción y reflectividad. Una vez obtenido estos parámetros pudimos calcular el ancho de banda prohibida utilizando la función de Kubelka Munk $F(R)$ que está relacionada con los coeficientes de absorción y de dispersión. Se grafica la función de Kubelka versus la longitud de onda y de la parte más lineal trazamos una línea recta que cruce con eje x. Esta coincidencia con el ancho de banda de las películas InGaN (rojo) Y GaN (negro). Con un ancho de banda para el nitruro de galio de 3.35eV y 3.15eV para el nitruro de galio indio (Fig.82). El ancho de banda de GaN corresponde con lo reportado [8], pero en el InGaN se esperaba un ancho de banda cercano al InN por la concentración mayor de indio que se depositó además como se reveló en EDS y por la caracterización XDR nos indicaron la presencia mayor del InN. Esto nos indica la formación de nanocristales de GaN durante la formación del material.

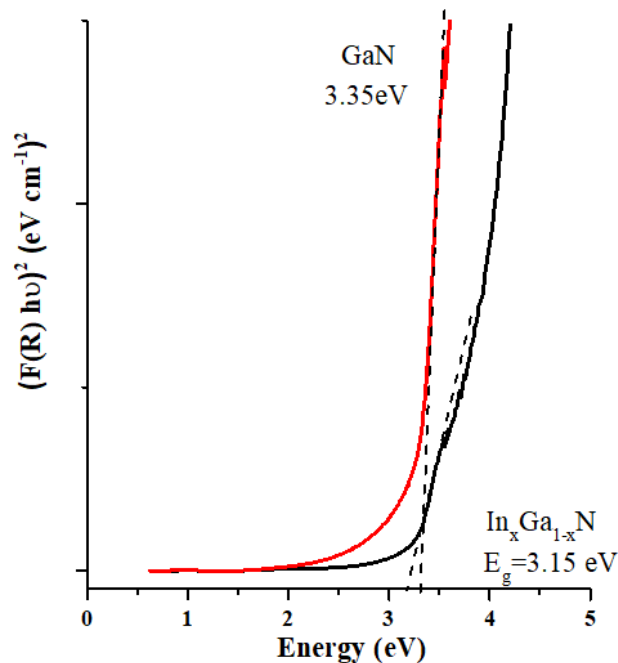


Figura 82. $F(R)$ vs energía para el cálculo del ancho de banda de las películas InGaN y GaN.

Caracterizaciones eléctricas.

Las mediciones eléctricas se usan para evaluar el desempeño del dispositivo para la aplicación deseada, aunque también se aplican para obtener parámetros físicos de las respuestas I-V; corriente de saturación y factor de idealidad, y C-V; barrera de potencial, dopado, región de carga entre otros. Específicamente para aplicaciones solares, se utilizan estas mediciones para evaluar la eficiencia energética que tiene la celda solar al comparar la respuesta con luz y oscuridad además podemos encontrar fotocorriente, factor de llenado, eficiencia, voltaje de circuito abierto, corriente de corto circuito y potencia de la celda solar.

Medición I-V

Se realizaron las mediciones de corriente contra voltaje utilizando los siguientes componentes: caja negra, lampara de halógeno de 300mW/cm², microscopio, puntas de oro, sistema keysight de caracterización de semiconductores y fuente de poder. La metodología de caracterización I-V se hizo de la siguiente manera:

- Encendido de sistema keysight.
- Colocación de muestras en el Chuck
- Encendido de bomba de vacío
- Se colocan las puntas sin tocar el sustrato
- Comenzamos con el ciclo de calibración
- Parametizamos a través de la interfaz de usuario[tabla].
- Colocamos la punta de medida en el contacto de plata o aluminio.

Se hace contacto con la segunda punta que aplica el potencial con la superficie trasera (para medir transversalmente). Realizamos medición en oscuridad y posteriormente aplicamos un escalón a la lampara de halógeno para encenderla por el tiempo que le toma la medida.

La muestra que se midió primero fue de Silicio /InGaN, con la siguiente medida (figura 83a). En ella, se tiene un comportamiento tipo Shockley en oscuridad y al encender la lámpara, se dispara la gráfica a medidas de 6 órdenes de magnitud en corriente y hay conducción eléctrica en ambas polaridades. En la escala logarítmica, con polarización directa hay mayor corriente. De la figura 83b, con el logaritmo de la corriente, se aprecia el corrimiento en el eje del voltaje, lo que nos indica que, si hay un aporte fotovoltaico de la heteroestructura, aunque sea bajo. Si nos acercamos a la gráfica de la figura 83a, la respuesta parte del cuarto cuadrante con una corriente de corto circuito ($V=0V$) y sube hasta el voltaje de circuito abierto ($J=0 A$) (lo que se espera en celdas solares) y continua en el primer cuadrante. De la gráfica con luz.

Para la celda Si/GaN se tiene un comportamiento de diodo, en oscuridad con la gráfica en rojo, en azul con la aplicación de la lámpara y en verde la potencia (figura 84). Al encender la lámpara hay un aumento en la corriente y en la escala logarítmica un corrimiento de la gráfica coincidiendo con el voltaje de circuito abierto de 0.3 V, mayor que la capa de InGaN. Esta respuesta tiene un aporte fotovoltaico al estar ubicada en el cuarto cuadrante lo que indica que sin aplicación de voltaje y con solamente el haz de luz, hay un aumento en la corriente, y esto se debe a la fotocorriente generada por la heteroestructura.

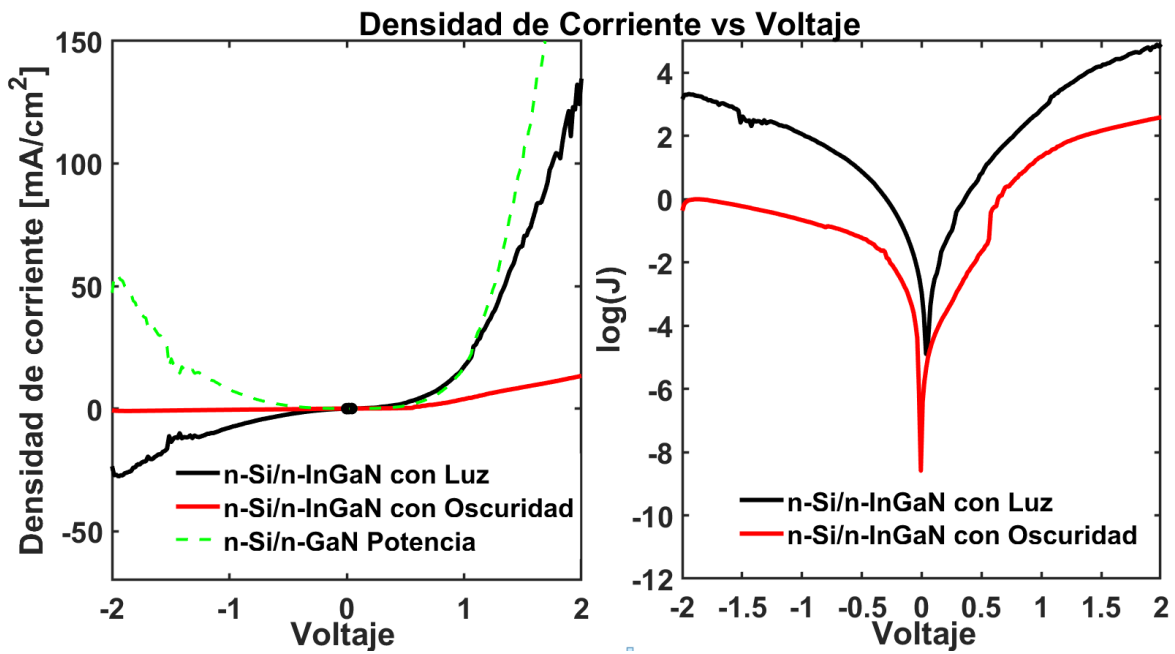


Figura 83.- Medición I-V y LOG I VS V de la heteroestructura Si/InGaN

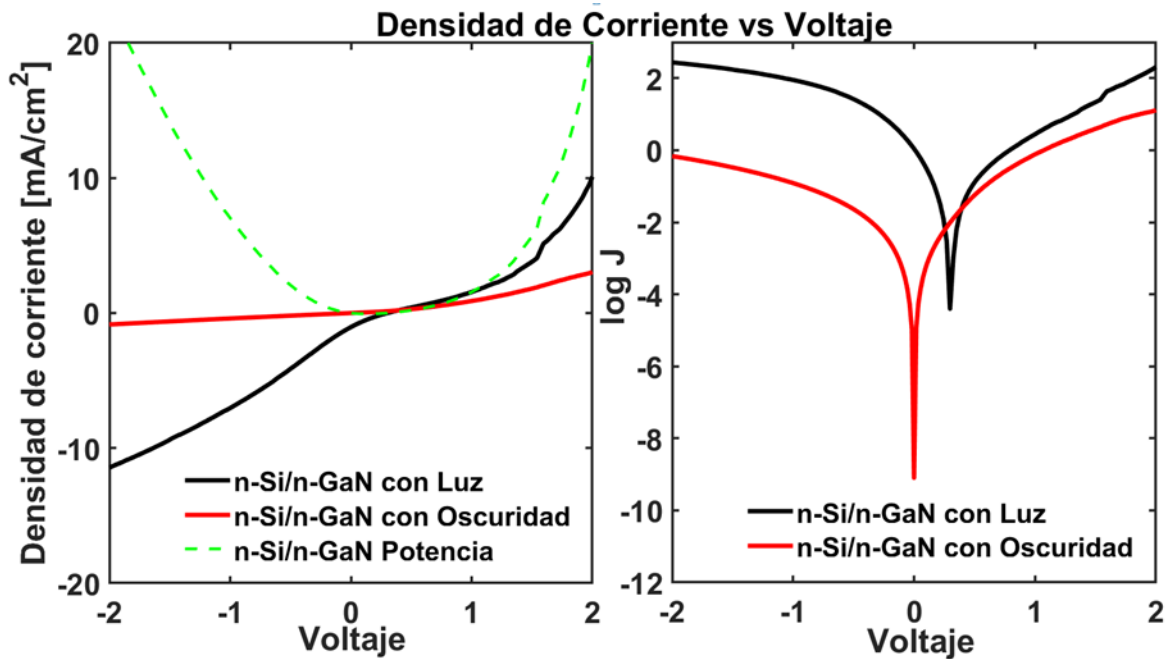


Figura 84.- Medición I-V y LOG I VS V de la heteroestructura Si/GaN.

Los parámetros solares de esta celda son los siguientes

Tabla 16. Parámetros fotovoltaicos de la celda solar Si/InGaN y Si/GaN

Material	Pmax	Vmax	J max	Jsc	Voc	FF
Si/InGaN	-0.46201	0.0180	-0.0257	-0.0509	0.0429	21.1840
Si/GaN	-0.0652	0.1353	-0.4824	1.0426	0.3026	20.68

De las graficas I-V en oscuridad, se pueden obtener los valores de coeficiente de idealidad (n) y de corriente de saturación (I₀). Para ello se utiliza el modelo presentado en [45] .“The integral difference function concept and the G method”, en donde se propone un operador para suprimir el efecto de la resistencia en serie, esta función D aplicada al modelo de diodo con resistencia en serie, asume que la I >> I₀, por lo que la ecuación se simplifica:

$$D \approx n v_{th} \left[\ln \left(\frac{I}{I_0} \right) - 2 \right] \dots\dots\dots (36)$$

En el cual ya no contiene la resistencia en serie, dividiendo este operador entre la corriente nos queda:

$$G \equiv \frac{D}{I} \approx n v_{th} [\ln(I) - (\ln(I_0) + 2)] \dots\dots\dots (36.1)$$

Si graficamos el logaritmo de la corriente con respecto a la función G, podemos adquirir la corriente de saturación que es la función que corta con el eje x y de la pendiente extraemos el factor de idealidad. Como se nota en la figura (85) se graficaron ambas funciones para Si/InGaN y Si/GaN, en donde se tienen los valores de factor de idealidad que es aproximadamente de 2 para ambos dispositivos. Esto nos indica que la recombinación de portadores no solo se está llevando en transiciones banda a banda sino también en otros sitios, lo que concuerda con el factor de llenado bajo.

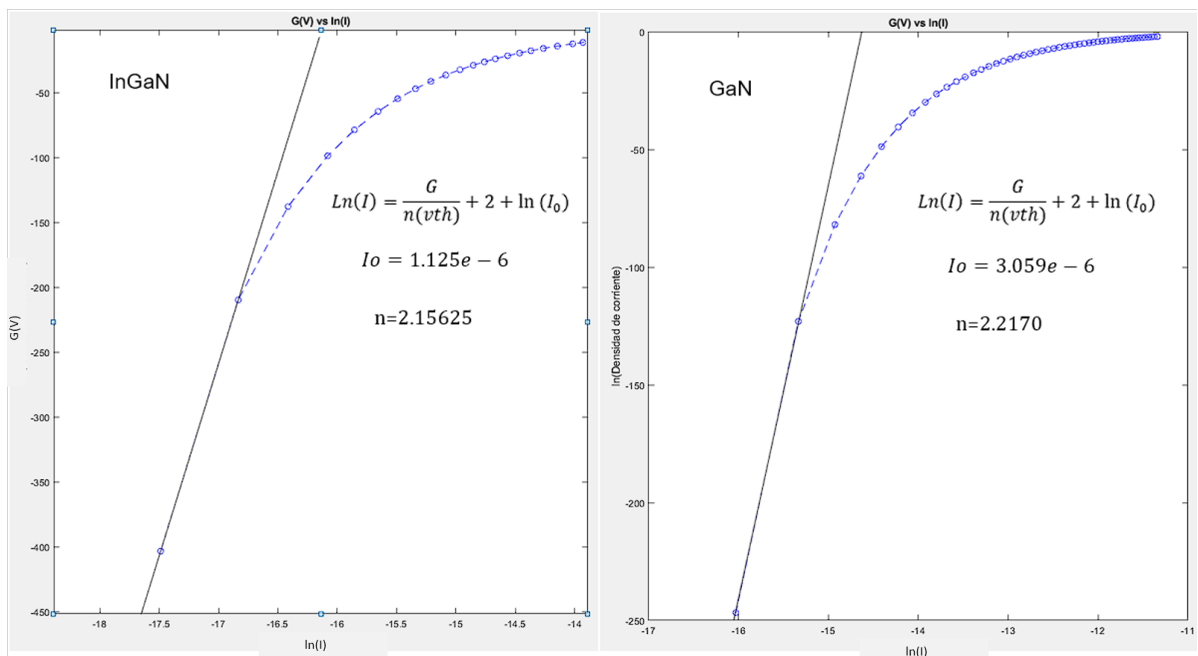


Figura 85. Función G vs log(corriente) para Si/InGaN Y Si/GaN, con el cálculo de factor de idealidad y corriente de saturación

La corriente de saturación para InGaN y GaN es de 1.125E-6 A y 3.059E-6 respectivamente (figura 85).

Medición de Capacitancia-Voltaje

En los dispositivos semiconductores, se realiza medidas de capacitancia-voltaje para evaluar la respuesta a diferentes frecuencias de voltaje para diversas aplicaciones. Además de conocer la velocidad de respuesta del semiconductor, se aprovecha el principio de un capacitor para conocer como los portadores de carga varían en función de la polarización en la interfaz semiconductor-semiconductor dando lugar a la capacitancia de transición. Cuando se evalúa la capacitancia de agotamiento, se puede obtener la barrera de potencial y el dopado de alguno de los semiconductores. Con la siguiente ecuación, se grafica la capacitancia obtenida experimentalmente (1 entre la capacitancia al cuadrado) contra voltaje y como se muestra en la figura, la intercepción será la barrera de potencial V_{bi} y la pendiente el cociente de las permitividades eléctricas de los semiconductores multiplicada por su dopado. La ecuación de la capacitancia de transición para heterouniones se escribe como [46]:

$$C_j' = \sqrt{\frac{q\epsilon_n\epsilon_p N_{ap}N_{dn}}{2(V_{bi} + V_R)(\epsilon_n N_{ap} + \epsilon_p N_{dn})}} \left(\frac{F}{cm^2}\right) \dots \dots \dots (37)$$

sí evaluamos esta expresión a $1/C^2$ y lo multiplicamos por área del contacto nos queda:

$$\frac{1}{C_j'^2} = \frac{2(\epsilon_p N_{ap} - \epsilon_n N_{dn})(V_{bi} - V)}{q(N_{ap}N_{dn}\epsilon_n\epsilon_p)A^2} \dots \dots \dots (37.1)$$

Para estos resultados se utilizaron los siguientes parámetros:

Tabla 17. Parámetros para el cálculo de la capacitancia de la unión.

Área	Dopado del silicio	Permitividad del silicio	Permitividad del nitruro de galio indio	Permitividad del nitruro de galio
0.0154cm ²	Nap=5e15cm ⁻³	$\epsilon_p=11.7$	$\epsilon_n=13.39$	$\epsilon_n=9.5$

La metodología de medición de capacitancia fue la siguiente: 1) Se coloca la muestra en el Chuck del microscopio, 2) se prende bomba se succión (para fijar la muestra) ,3) se separan las puntas del sustrato y se comienza calibración automática del equipo keysight para eliminar resistencias parasitas ,4) se hace contacto con la superficie metálica con ambas puntas y se termina la calibración 5) se parametriza interfaz con la aplicación de voltaje de -2 a 3 V a diferentes frecuencias. 6) se comienza con la medición.

En la figura 86a , se muestra la capacitancia contra voltaje a diferentes frecuencias, en donde notamos la caída de la capacitancia al aumentar la frecuencia , esto se explica en que a mayores velocidades que toman los portadores de carga al ser impulsados por voltajes cada vez más rápidos en donde ocupan-desocupan los estados trampas y llega el punto en que dejan de hacerlo tanto así que no almacenan esa carga y disminuye considerablemente , esto lo aprovechamos para que en ese punto donde la caída en $1/C^2$ se vuelve más lineal para obtener la barrera de potencial y el cálculo del dopado del nitruro de galio indio (InGaN) como se muestra en la figura 86b para el InGaN , A 500khz se traza una recta en la parte lineal y extraemos V_{bi} para luego utilizar de la ec, calcular el dopado.

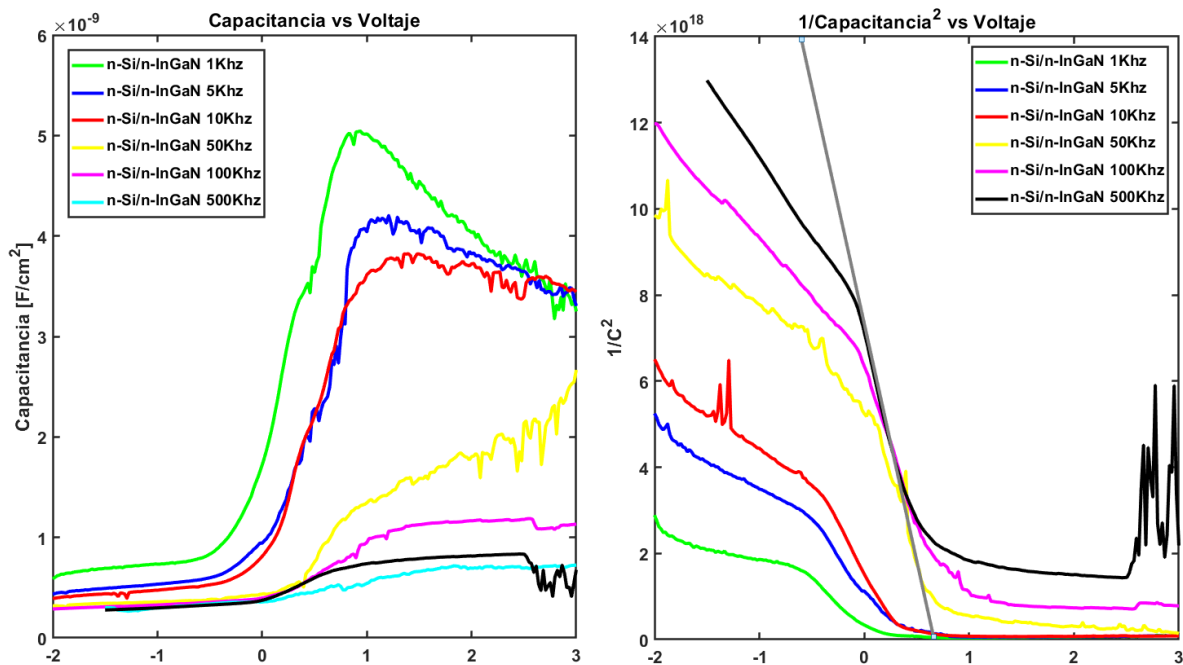


Figura 86. Capacitancia contra voltaje de Si/InGaN a las frecuencias de 1khz, 10khz, 50khz, 100khz, 300khz, 500khz, 800khz y 1Mhz

Por este método se la barrera de potencial para Si/InGaN es:

$$V_{bi} = 0.716 \text{ [eV]}$$

Y el dopado aproximado al evaluar ec.

$$N_{dn} = 1.031e16 \text{ [cm}^{-3}\text{]}$$

Para el nitruro de galio, se sigue el mismo proceso y se obtienen las siguientes graficas (Figuras 87a y 87b):

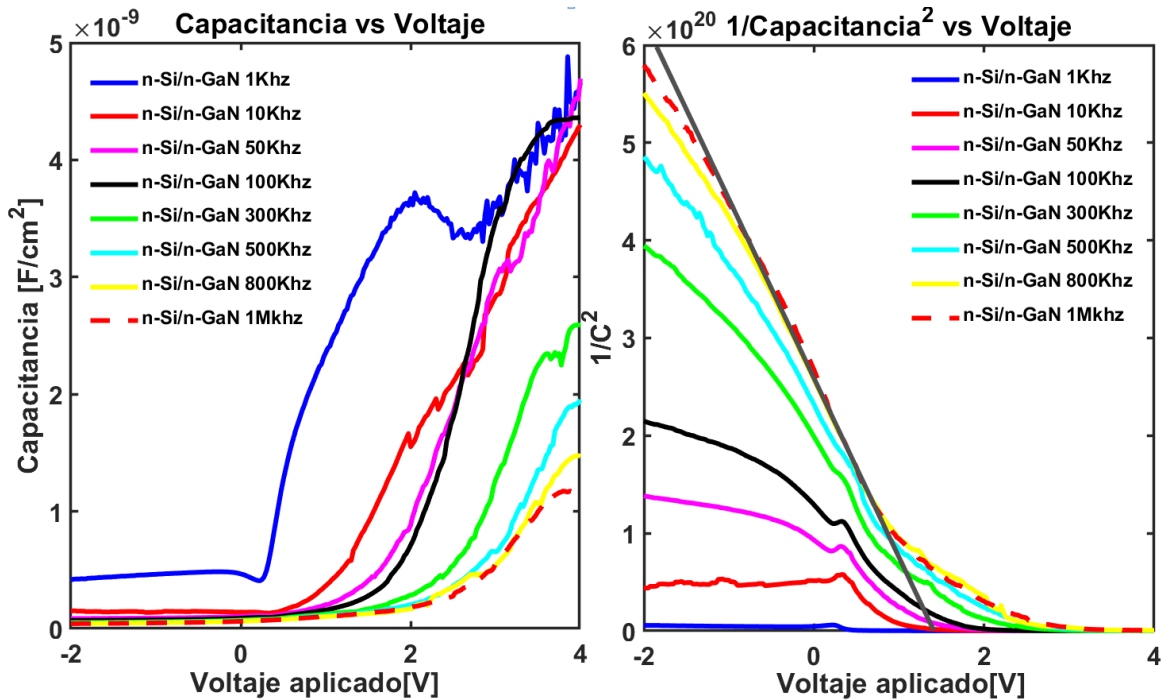


Figura 87a y 87b. Capacitancia vs voltaje y $1/C^2$ de Si/GaN a las frecuencias de 1khz, 10khz, 50khz, 100khz, 300khz, 500khz, 800khz y 1Mkhz

La barrera de potencial para Si/GaN es:

$$V_{bi} = 1.4 \text{ [eV]}$$

Para el dopado aproximado.

$$N_{dn} = \text{Dopado de GaN} = 2.852e14 \text{ cm}^{-3}$$

En la tabla 18, se resumen los métodos utilizados para el cálculo de parámetros como la corriente de saturación, el factor de idealidad, barrera de potencial, resistencia en serie, dopado y potencial de la unión

Tabla 18 Parámetros calculados de las caracterizaciones eléctricas.

	In_xGa_{1-x}N	GaN
From I-V Integral difference function concept and the G method		
Saturation Current I ₀ [A]	1.125E-6	3.059E-6
Ideality factor (n)	2.15	2.21
From Schottky model		
Barrier height [ϕ_b (eV)]	0.6	0.6224
Saturation Current I ₀ [A]	17.60E-7	8.3152E-7
Ideality factor (n)	1	1.0121
From Cheung method		
Series resistance (R _s)	1.4E5	1.3E5
Ideality factor (n)	1.15	1.076
From C-V		
Doping [cm ³]	3.105e15	6.857e15
Barrier Potential [eV]	0.7	1.33

Defectos en la interfaz

Los valores obtenidos de la densidad de la trampa de la interfase se calcularon utilizando la siguiente ecuación 34.

Donde A es el área de contacto, la frecuencia angular, G es la conductancia y w es la capacitancia máxima medida. La densidad de trampas de la interfaz no es muy diferente para ambos dispositivos, también un comportamiento notable es que las trampas de densidad fijan el nivel de Fermi, por lo que los regímenes de acumulación-agotamiento-inversión no se observan claramente para frecuencias a 1 KHz, desde un punto de vista tecnológico el presencia de trampas se comportan como resistencia parasitaria. La densidad de trampas para la muestra de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ y GaN disminuye con el aumento de la frecuencia, una razón posible se debe a que los niveles de trampas superficiales tienen una respuesta de tiempo grande, por lo que no pueden seguir la señal de CA, mientras que las trampas de nivel profundo tienen una respuesta de por vida. es largo.

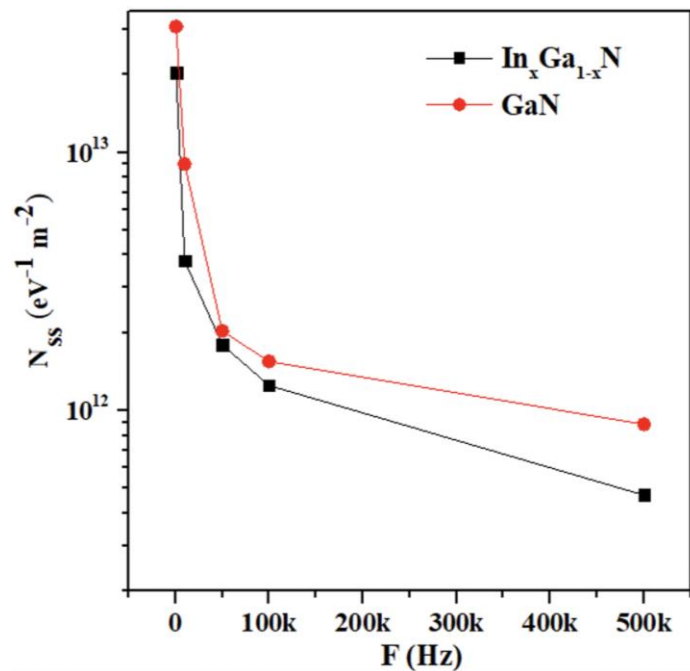


Figura 88. Densidad de defectos en la interfaz

Fotorespuesta.

Para la medición de fotorespuesta, se necesitó los siguientes componentes: Fuente de poder; para aplicar un escalón de 5V a un tiempo por ciclo 10s para el nitruro de galio y de 7 s para el nitruro de galio indio, un SCR; para controlar el disparo de manera eficiente sin perder retardos que afecten la medición.

La metodología: se calibro el equipo como si se midiera en I-V, se parametrizo con la medida en intervalos de 4ms, con 10001 muestras por medición y un total de medida de 40s, se colocó la muestra, y se midió la respuesta. Como se muestra en la figura 74 la fotocorriente que se genera para el dispositivo Si/InGaN es de $I_{ph}=2.3e-5$ A.

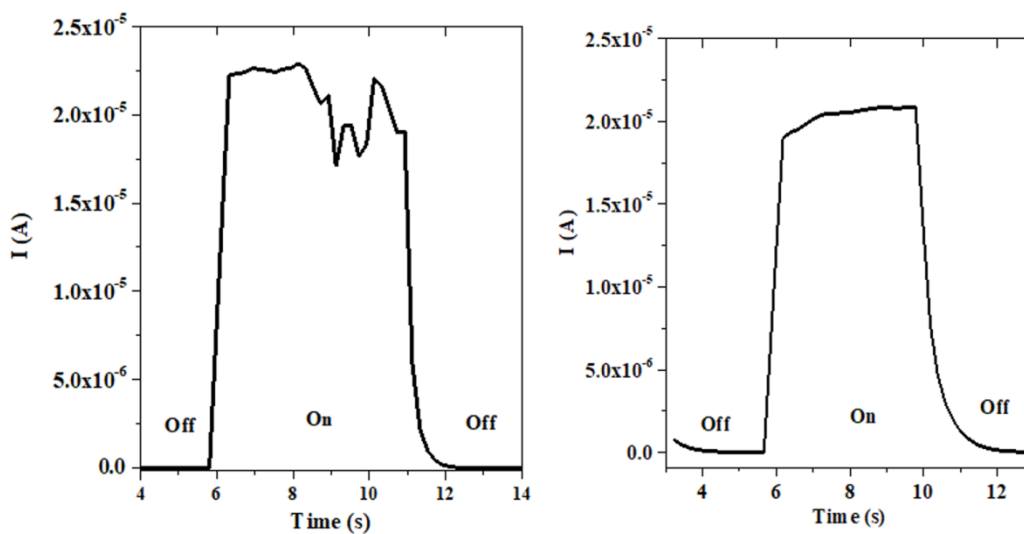


Figura 89. Fotorespuesta de la heteroestructura Si/InGaN y Si/GaN con pulsos de encendido y apagado de 5s Y 7s respectivamente

Para la heteroestructura Si/GaN (figura 90), la respuesta en fotocorriente indica una mayor estabilidad y una buena responsividad del dispositivo con una fotocorriente de $2.3e-5$ A.

A partir de la medición de fotorespuesta y con el aumento de la fotocorriente con el tiempo de iluminación, se realiza el ajuste con una función de doble exponencial: $F(t) = a \cdot \exp(-t/\tau_1) - b \cdot \exp(-t/\tau_2)$. De igual forma se hace para caída de la fotocorriente en función del tiempo de al apagar el haz de luz.

Se puede notar que la películas de InGaN y GaN en silicio, responden adecuadamente, incluso con una polarización de 0V en los dispositivos. Los parámetros calculados son mostrados en la tabla 19.

Tabla 19 Parámetros de caída y alce de la caracterización de fotorespuesta de las películas InGaN y GaN en silicio

Material	InGaN		GaN	
Nomenclatura	τ_1 (s)	τ_2 (s)	τ_1 (s)	τ_2 (s)
Tiempo de levantamiento (s)	0.2031	x	0.06397	x
Tiempo de caída (s)	0.2283	0.55	0.3553	0.5561

La fotorespuesta de las heteroestructuras Si/GaN y Si/InGaN muestra una rápida respuesta sobre todo con el nitruro de galio y corto periodo de recuperación, en la muestra de InGaN se nota pequeñas oscilaciones muestras es expuesta a la luz, mientras que para el GaN es más estable. La forma cuadrada que tienen ambas mediciones, nos indica un buen rendimiento como fotodetector, considerando que fue expuesta a una lámpara de halógeno.

Responsividad.

La responsividad, se realizó en el laboratorio de fotoluminiscencia CIDS, en él se mide en las longitudes de onda de 350nm-700nm con pasos de 10nm por medición a las que responden los dispositivos, utilizando una fuente monocromador. Para medir la potencia óptica se utilizó un fotodetector estándar de silicio (fig. 90).

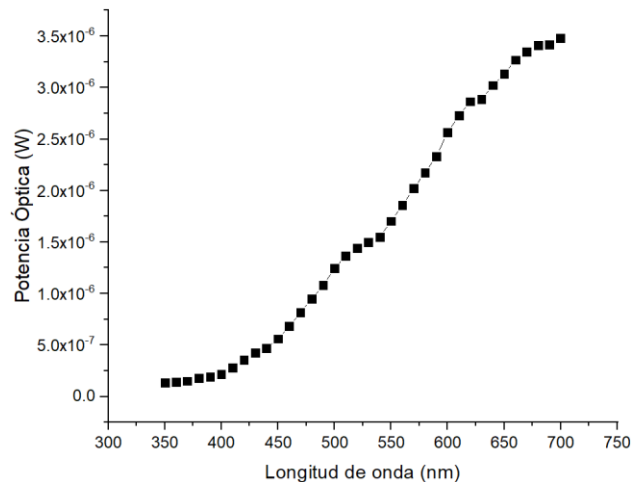


Figura 90. Potencia óptica incidente en la muestra.

La medición se realizó como se muestra en la figura 91, en donde se utilizó una fuente medidora de corriente vs voltaje, por cada longitud de onda de esta manera, se obtuvo la corriente fotogenerada. De la ecuación 35, se tiene la razón de la fotocorriente contra la potencia óptica calculada del fotodetector.

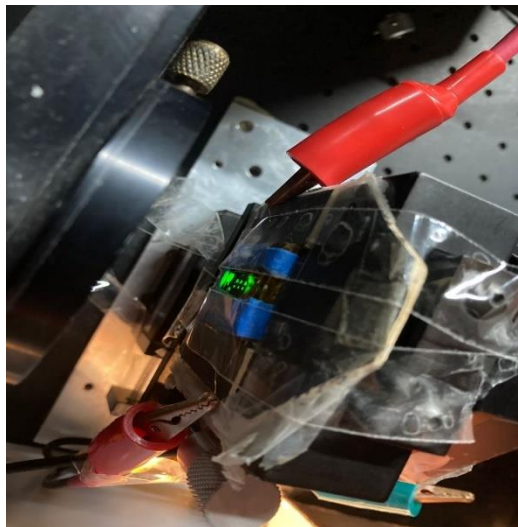


Figura 91. Medición de responsividad de los dispositivos.

La responsividad de las heteroestructuras n-Si/n-GaN e n-Si/n-InGaN (figura 92) en polarización de 0V en función de longitud de onda, muestra un espectro de banda de estrecho que para el nitruro de galio tiene una mayor fotocorriente en el ultravioleta 350nm mientras que para el InGaN responde en la longitud estrecha del visible en 400nm.

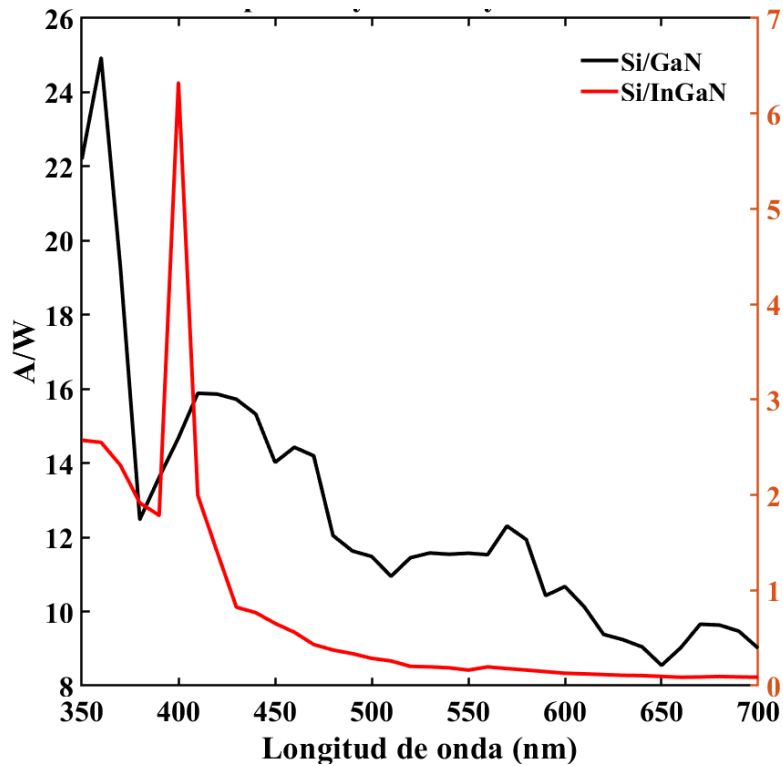


Figura 92. Responsividad de las heteroestructuras Si/GaN y Si/InGaN.

Conclusiones.

- Las películas n-InGaN y n-GaN crecidas en silicio por la técnica de fabricación PEALD, presentaron tanto comportamiento fotovoltaico como de fotodetección.
- El crecimiento del material GaN con la incorporación de un ciclo extra de argón, aumento el grosor teórico de 0.2 Å/ciclo a 0.4 Å/ciclo.
- A pesar de tener espesores de entre 10 a 20 nm, contribuyeron a la fotogeneración y discriminación de portadores de carga.
- Como se demostró en la simulación es posible fabricar celdas solares de alta eficiencia Si/GaN y Si/InGaN.
- La posibilidad de fabricar fotodetectores que cubran el espectro de 200nm a 300nm variando la composición molar del InN.
- La fotorespuesta obtenida de las películas III-nitruro, GaN e InGaN en silicio presentaron gran estabilidad y respuesta a la luz de excitación de la lámpara de halógeno.
- De acuerdo con la eficiencia cuántica, calculada en la simulación se demostró la contribución que tienen estas películas delgadas acopladas en silicio para aplicaciones optoelectrónicas.
- En ambas heteroestructuras Si/GaN e Si/InGaN se tuvo un comportamiento rectificante, esto podría deberse a la alta función de trabajo de la pasta de plata.
- De acuerdo con la medida de ancho de banda de InGaN presenta una similitud en la energía al nitruro de galio, lo que nos lleva a pensar en que se formaron cristales de GaN que están modificando el este parámetro.
- Los materiales GaN e InGaN por ALD han demostrado su potencial como dispositivos de alta eficiencia y funcionamiento.

Referencias bibliográficas

1. Green, M. A., Dunlop, E. D., Hohl-Ebinger, J., Yoshita, M., Kopidakis, N., Bothe, K., Hinken, D., Rauer, M., & Hao, X. (2022, 12 mayo). *Solar cell efficiency tables (Version 60)*. WILEY Progress in PHOTOVOLTAICS, 2–6. <https://doi.org/10.1002/pip.3595> .Res. Appl. A.
2. Gregory M Wilson, Mowafak Al-Jassim, Wyatt K Metzger, Stefan W Glunz, Pierre Verlinden, Gang Xiong, Lorelle M Mansfield, Billy J Stanbery, Kai Zhu, Yanfa Yan, Joseph J Berry, Aaron J Ptak, Frank Dimroth³, Brendan M Kayes, Adele C Tamboli, Robby Peibst, Kylie Catchpole, Matthew O Reese, Christopher S Klinga, Paul Denholm², Mahesh Morjaria, Michael G Deceglie, Janine M Freeman, Mark A Mikofski, Dirk C Jordan, Govindasamy Tamizh Mani and Dana B Sulas-Kern-.(2020, 9 septiembre).“The 2020 photovoltaic technologies roadmap”. Journal of Physics D: Applied Physics, Volume 53, Number 49.
3. M. Arif, W. Elhuni, J. Streque, S. Sundaram, S. Belahsene, Y. El Gmili, M. Jordan, X. Li, G. Patriarche, A. Slaoui, A. Migan, R. Abderrahim, Z. Djebbour, P.L. Voss, J.P. Salvestrini, A. Ougazzaden.” *Improving InGaN heterojunction solar cells efficiency using a semibulk absorber*”, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 159 (2017) 405–411.
<https://doi.org/10.1016/j.solmat.2016.09.030>.

4. M. Chavez Portillo, S. Gallardo Hernández, Y. Panecatl Bernal, I. Martinez Velis, J. Villanueva Cab, S. Alcántara, J. Alvarado, "Tunable band gap of III-Nitride alloys obtained by Plasma Enhanced Atomic Layer Deposition". *Optical Materials Volume 108*, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2020.110206>.
5. G. Bhuiyan, K. Sugita, A. Hashimoto, and A. Yamamoto, "InGaN Solar Cells: Present State of the Art and Important Challenges," in *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 2, no. 3, pp. 276-293, July 2012, doi: 10.1109/JPHOTOV.2012.2193384.
6. Chai, J., Kong, D., Chen, S., Chen, L., Wang, W., & Li, G. (2021). High responsivity and high speed InGaN-based blue-light photodetectors on Si substrates. *RSC Advances*, 11(40), 25079–25083. doi:10.1039/d1ra04739f
7. Capper, K. (2017). *Electronic and Photonic Materials* (2nd ed., Vol. 2). Springer Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-48933-9>.
8. Medjdoub, F., & Iniewski, K. (2011). *Gallium Nitride (GaN) Physics, Devices, and Technology* (1.a ed.). CRC Press. <https://doi.org/10.4324/b19387>
9. H Amano, Y Baines, E Beam³, Matteo Borg, T Bouchet, Paul R Chalker, M Charles, Kevin J Chen, Nadim Chowdhury, Rongming Chu, Carlo De Santi, Maria Merlyne De Souza, Stefaan Decoutere, L Di Cioccio, Bernd Eckardt, Takashi Egawa, P Fay, Joseph J Freedman, L Guido, Oliver Häberlen, Geoff Haynes, Thomas Heckel, Dilini Hemakumara, Peter Houston, Jie Hu, Mengyuan Hua, Qingyun Huang, Alex Huang, Sheng Jiang, H Kawai, Dan Kinzer, Martin Kuball, Ashwani

Kumar, Kean Boon Lee, Xu Li, Denis Marcon, Martin März, R McCarthy, Gaudenzio Meneghesso, Matteo Meneghini, E Morvan, A Nakajima, E M S Narayanan, Stephen Oliver, Tomás Palacios, Daniel Piedra, M Plissonnier, R Reddy, Min Sun, Iain Thayne, A Torres², Nicola Trivellin, V Unni, Michael J Uren, Marleen Van Hove, David J Wallis, J Wang, J Xie, S Yagi, Shu Yang, C Youtsey, Ruiyang Yu, Enrico Zanoni, Stefan Zeltner and Yuhao Zhang. (2018, Marzo). "The 2018 GaN power electronics roadmap". vol. 51, no. 16. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aaaf9d>

10. *Unusual strategies for using indium gallium nitride grown on silicon (111) for solid-state lighting*, Hoon-sik Kima,¹, Eric Brueckner^{b,1}, Jinzhou Song^{c,1}, Yuhang Li^{d,e}, Seok Kima, Chaofeng Lu^{d,f}, Joshua Sulking, Kent Choquette^g, Yonggang Huang^d, Ralph G. Nuzzo^{a,b,2}, and John A. Rogers^{a,b,g,2} A
11. O. Jani, H. Yu, E. Trybus, B. Jampana, I. Ferguson, A. Doolittle, and C. Honsberg. *Effect of phase separation on performance of III-V nitride solar cells. 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference, 2007. A*
12. Yamamoto, A., Sugita, K., Horie, M., Ohmura, Y. Islam, M. R., & Hashimoto, A. (2008). *Mg-doping and n+-p junction formation in MOVPE-grown In_xGa_{1-x}N (x~0.4). 2008 33rd IEEE Photovoltaic Specialists Conference. doi:10.1109/pvsc.2008.4922870*

13. Yamamoto, A., Sugita, K., Horie, M., Ohmura, Y., Islam, M. R., & Hashimoto, A. (2008). Mg-doping and n+-p junction formation in MOVPE-grown $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x \sim 0.4$). 2008 33rd IEEE Photovoltaic Specialists Conference. doi:10.1109/pvsc.2008.4922870
14. Dahal, R., Pantha, B., Li, J., Lin, J. Y., & Jiang, H. X. (2009). InGaN/GaN multiple quantum well solar cells with long operating wavelengths. *Applied Physics Letters*, 94(6), 063505. doi:10.1063/1.3081123
15. Clinton, E. A., McFavilen, H., Engel, Z., Matthews, C., Arena, C., Honsberg, C. B., Goodnick, S. M., Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA 30332, USA, Arizona State University, Tempe, AZ 85280, USA, & Photonitride Devices Inc., Tempe, Arizona, 85284, USA. (2018). InGaN based solar cells with GaN tunnel junction contacts. Ehsan Vadiee. <https://scihub.se/10.1109/pvsc.2018.8547327>
16. Chen, X., Zhao, B., & Li, S. (2019). Influence of Si-Doping on the Performance of InGaN/GaN Multiple Quantum Well Solar Cells. *Semiconductors*, 53(13), 1792–1796. doi:10.1134/s1063782619130049
17. Shih H Y, Lin M C, Chen L Y and Chen M J 2015 *Nanotechnology* 26014002 A
18. George S M 2010 *Chem. Rev.* 110 111 A
19. Tekcan B, Biyikli N and Okyay a K 2014 *Opt. Eng.* 53 107106 A
20. Alevli M, Gungor N, Haider A, Kizir S, Leghari S A and Biyikli N 2016 *J. Vac. Sci. Technol. A* 34 01A125 A

21. Liu, S.-J., He, Y.-F., Wei, H.-Y., Qiu, P., Song, Y.-M., An, Y.-L., ... Zheng, X.-H. (2019). PEALD-deposited crystalline GaN films on Si (100) substrates with sharp interfaces. *Chinese Physics B*, 28(2), 026801. doi:10.1088/1674-1056/28/2/026801
22. Partain, L. (2010). *Solar Cell Device Physics. Solar Cells and Their Applications*, 67–109. doi: 10.1002/9780470636886.ch4
23. S.M. Sze *physics of semiconductors devices -John Wiley and Sons. L*
24. El-Huni, W., Migan, A., Djebbour, Z., Salvestrini, J.-P., & Ougazzaden, A. (2016). High-efficiency indium gallium nitride/Si tandem photovoltaic solar cells modeling using indium gallium nitride semibulk material: monolithic integration versus 4-terminal tandem cells. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 24(11), 1436–1447. doi:10.1002/pip.2807
25. Greco, G., Iucolano, F., & Roccaforte, F. (2016). Ohmic contacts to Gallium Nitride materials. *Applied Surface Science*, 383, 324–345. doi: 10.1016/j.apsusc.2016.04.016
26. Silvaco Inc, *Atlas user's manual, Device simulation software, 4701 Patrick Henry Drive, Bldg. 2, August 26, 2016. www.silvaco.com*
27. Piprek, J., *Semiconductor Optoelectronic Devices: Introduction to Physics and Simulation. UCSB: Academic Press (2003): 22.*

28. Hack, B.M. and J.G. Shaw. "Numerical Simulations of Amorphous and Polycrystalline Silicon Thin-Film Transistors." Extended Abstracts 22nd International Conference on Solid-State Devices and Materials, Sendai, Japan (1990): 999-1002.
29. Qiu, C. H., Hoggatt, C., Melton, W., Leksono, M. W., & Pankove, J. I. (1995). *Study of defect states in GaN films by photoconductivity measurement. Applied Physics Letters*, 66(20), 2712–2714. doi:10.1063/1.113497.
30. Qiu, C. H., Hoggatt, C., Melton, W., Leksono, M. W., & Pankove, J. I. (1995). *Study of defect states in GaN films by photoconductivity measurement. Applied Physics Letters*, 66(20), 2712–2714. doi:10.1063/1.113497
31. Ying Xue, Yu Han, Yeyu Tong, Zhao Yan, Yi Wang, Zunyue Zhang, Hon Ki Tsang, and Kei May Lau, "High-performance III-V photodetectors on a monolithic InP/SOI platform," *Optica* **8**, 1204-1209 (2021).
32. D.M Chapin, C.S. Fuller and G. L Pearson, "A new silicon junction Photocell for converting solar radiation into Electrical Power" *J.appl.Phys.*,25,676 (1954). A
33. Fiji G2 Plasma Enhanced Atomic Layer Deposition System, User's Manual Final Draft -ultratech cambridge nanotech, September 2015 A.

34. McKelvey, J. P., & McKelvey, J. P. (1976). *Física del estado sólido y de semiconductores* (1. edición.). México: Limusa.
35. Quick start Guide, Keysight Technologies B1500A Semiconductor Device Analyzer (2014)
36. Diantoro, M., Suprayogi, T., Hidayat, A., Taufiq, A., Fuad, A., & Suryana, R. (2018). *Shockley's Equation Fit Analyses for Solar Cell Parameters from I-V Curves. International Journal of Photoenergy, 2018, 1–7.* doi:10.1155/2018/9214820.
37. Chan, D. S. H., & Phang, J. C. H. (1987). Analytical methods for the extraction of solar-cell single- and double-diode model parameters from I-V characteristics. *IEEE Transactions on Electron Devices, 34*(2), 286–293. doi:10.1109/t-ed.1987.22920.
38. Neamen, D. A. (2012). *Semiconductor physics and devices: Basic principles* (4th ed.). McGraw-Hill.
39. Tataroglu, Adem & Uyar, R. (2016). Analysis of density and time constant of interface states of MIS device by conductance method. *Indian Journal of Pure and Applied Physics. 54.* 374-378.
40. Peng, H., Feng, X., Gong, J., Wang, W., Liu, H., Quan, Z., ... Wang, L. (2018). Low temperature growth of polycrystalline InN films on non-crystalline substrates by plasma-enhanced atomic layer deposition. *Applied Surface Science, 459,* 830–834. doi: 10.1016/j.apsusc.2018.08.093

41. Adriaan J. M. Mackus, Joel R. Schneider, Callisto Maclsaac, Jon G. Baker, and Stacey F. Bent. Synthesis of Doped, Ternary, and Quaternary Materials by Atomic Layer Deposition: A Review. *Chem. Mater.* 2019, 31, 4, 1142–1183. Publication Date: December 10, 2018 A
42. Cai, H., Liang, P., Hübner, R., Zhou, S., Li, Y., Sun, J., ... Wu, J. (2015). Composition and bandgap control of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ films synthesized by plasma-assisted pulsed laser deposition. *Journal of Materials Chemistry C*, 3(20), 5307–5315. doi:10.1039/c5tc00475f
43. Ali Haidera, b, Seda Kizira, b, Cagla Ozgit-Akguna, Eda Goldenberga, Shahid Ali Legharia, b, Ali Kemal Okyaya, b, c, Necmi Biyikli, b† “Low-temperature grown wurtzite $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ thin films via hollow cathode plasma-assisted atomic layer deposition” *Journal of Materials Chemistry A*
44. Ganesh, V., Alizadeh, M., Shuhaimi, A., Pandikumar, A., Goh, B. T., Huang, N. M., & Rahman, S. A. (2015). Investigation of the electrochemical behavior of indium nitride thin films by plasma-assisted reactive evaporation. *RSC Advances*, 5 (22), 17325–17335. doi:10.1039/c4ra16258g.
45. Ortiz-Conde, Adelmo & García-Sánchez, Francisco & Muci, Juan & Sucre-González, Andrea. (2014). A review of diode and solar cell equivalent circuit model lumped parameter extraction procedures. *Facta Universitatis, Series: Electronics and Energetics*. 27. 57-102. 10.2298/FUEE1401057O.
46. Hassun, Hanan. (2018). Study of Photodetector Properties ZnTe:Al/Si prepared by Thermal Evaporation.

