

## **Estudio de dispositivos y materiales semiconductores bajo condiciones adversas de funcionamiento a través de herramientas TCAD**

Marcelo A. Cappelletti<sup>1,2</sup>, Ramiro M. Irastorza<sup>1,3</sup>, Daniel M. Morales<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Ingeniería y Agronomía -  
Universidad Nacional Arturo Jauretche (UNAJ)

<sup>2</sup>Grupo de Estudio de Materiales y Dispositivos Electrónicos (GEMyDE) -  
Facultad de Ingeniería - Universidad Nacional de La Plata (UNLP)

<sup>3</sup>Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (IFLYSIB) -  
CONICET – UNLP

mcappelletti@unaj.edu.ar, rirastorza@iflysib.unlp.edu.ar, martin.morales@unaj.edu.ar

### **Resumen**

La línea de investigación que se presenta está orientada al diseño y optimización de dispositivos y materiales semiconductores, cuando se encuentran operando bajo condiciones desfavorables de funcionamiento. Ejemplo de estas situaciones ocurren cuando están expuestos a radiación ionizante, ya sea a nivel de la superficie terrestre como en sistemas que están en órbita.

Uno de los dispositivos que particularmente se propone estudiar son las celdas solares de tercera generación, específicamente celdas multijunturas basadas en heterojunturas de semiconductores compuestos III-V.

Estos dispositivos constituyen hoy en día las celdas de mayor eficiencia y presentan un marcado interés tecnológico en sistemas fotovoltaicos de alta concentración solar para aplicaciones tanto terrestres como espaciales.

El estudio se lleva a cabo a partir de la utilización de herramientas TCAD, las cuales constituyen un poderoso

instrumento para reproducir resultados experimentales, estudiar propiedades específicas, predecir comportamientos de dispositivos y materiales bajo diferentes condiciones de operación, brindando importantes conocimientos previos a la experimentación.

**Palabras clave:** *Dispositivos y materiales semiconductores. Celdas solares multijunturas. Radiación ionizante. Modelización. Simulación. Diseño y optimización.*

### **Contexto**

Se presenta una línea de Investigación que es parte del Proyecto de Investigación Científico-Tecnológico “Utilización de herramientas TCAD para el diseño y optimización de celdas solares multijunturas” de la Universidad Nacional Arturo Jauretche (UNAJ). Se trata de un proyecto que se encuentra en

su etapa inicial, como la propia universidad que está transitando por su cuarto año de vida.

En el tema existe un convenio de colaboración en actividades de Investigación y Postgrado con el Grupo de Estudio de Materiales y Dispositivos Electrónicos (GEMyDE) de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata.

## Introducción

### Herramientas de simulación numérica

El sector de las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC) incluye las herramientas de Tecnologías de Diseño Asistido por Computadora (TCAD, Technology Computer Aided Design), que constituyen un poderoso instrumento para el estudio de dispositivos y materiales semiconductores como los que se proponen en esta línea de investigación.

El desarrollo de eficientes técnicas de cálculo, sumado al vertiginoso incremento en la velocidad y capacidad de procesamiento de datos que han tenido las computadoras en el último tiempo, ha contribuido a mejorar notablemente las herramientas TCAD, convirtiendo a la simulación numérica en una etapa indispensable a la hora de estudiar cualquier tipo de sistema. Los códigos computacionales permiten reproducir resultados experimentales, estudiar propiedades específicas, predecir comportamientos de dispositivos y materiales bajo diferentes condiciones de operación, brindando importantes conocimientos previos a la experimentación. Esto implica un ahorro considerable de tiempo y costos con el propósito de optimizar el diseño de los dispositivos bajo estudio.

Las herramientas TCAD para el análisis de dispositivos resuelven las ecuaciones básicas de los semiconductores: Poisson y Continuidad, por medio del método de los elementos finitos (FEM, Finite Element Method) [1] [2]. Por otro lado, las técnicas de simulación para el estudio de materiales y su interacción con campos electromagnéticos, resuelven las ecuaciones de Maxwell a través del método de diferencias finitas en el dominio de tiempo (FDTD, Finite-Difference Time-Domain) [3].

### Celdas solares

Tomando en cuenta el aumento continuo de la demanda de energía, el estudio de nuevas tecnologías basadas en energías renovables para producir calor y electricidad, en particular sistemas fotovoltaicos, se vuelve cada vez más imprescindible. Por esta razón, el estudio de celdas solares, dispositivos capaces de convertir la energía proveniente del sol directamente en potencia eléctrica a un bajo costo operativo, es extremadamente importante hoy en día.

Hasta hace pocos años, la generación de electricidad mediante energía solar se venía realizando a partir de módulos fotovoltaicos desarrollados en base a dos tecnologías diferentes, de acuerdo a sus procesos de fabricación y materiales utilizados:

a) la denominada tecnología de silicio mono- y poli-cristalino (también conocida como de primera generación), la cual consiste en dispositivos de simples junturas p-n, que han logrado eficiencias cercanas al 25%, valor muy próximo a su límite teórico calculado por Shockley-Queisser de 31% bajo 1 sol de iluminación y 40.8% bajo la máxima concentración de soles [4].

b) la tecnología de películas delgadas (llamada también de segunda generación),

la cual incluye dispositivos basados en materiales tales como telurio de cadmio (CdTe), cobre-indio-galio-selenio (CIGS) o silicio con estructura amorfa (a-Si). Estas celdas solares se caracterizan por su bajo costo de fabricación y recientemente han alcanzado una eficiencia máxima del 20.8% [5].

Actualmente, se vienen desarrollando celdas solares enfocadas sobre nuevos materiales semiconductores y modernas tecnologías, tales como, bandas intermedias, puntos cuánticos, portadores excitados, celdas termoeléctricas, entre otras, denominadas celdas solares de tercera generación [6]. Entre ellas podemos mencionar también a otro tipo de celdas solares que vienen ganando terreno a pasos acelerados por su alta eficiencia y resistencia al daño por radiación, las denominadas celdas solares tipo tandem o multijunturas (MJSC, Multi-Junction Solar Cells). En particular, las MJSC basadas en semiconductores compuestos III-V representan hoy en día el estado del arte de la tecnología solar fotovoltaica (por ejemplo: GaInP/GaInAs/Ge o GaInP/GaAs/Ge). Recientemente han sido obtenidas eficiencias de conversión record por encima del 41 % para 454 soles de iluminación [7].

Como fue comentado, el desarrollo de celdas solares ha mejorado su eficiencia aunque los costos de fabricación continúan siendo altos. Un enfoque interesante para drástica reducción de costos son los diseños que combinan las celdas solares con el uso de concentradores solares luminiscentes [8].

### **Celdas solares multijunturas (MJSC)**

En las celdas solares de una sola juntura, solamente aquellos fotones incidentes cuya energía sea superior a la de la banda prohibida del semiconductor

(bandgap), pueden liberar un electrón que contribuirá a la fotocorriente. Por lo cual, la reacción fotovoltaica está limitada a la porción del espectro solar cuya energía esté por encima del bandgap, y por lo tanto aquellos fotones con energías más bajas no son utilizados.

Por su parte, las MJSC, están formadas por dos o más sub-celdas de materiales con diferente bandgap, separadas entre sí por junturas tipo túnel, para facilitar el flujo de electrones entre ellas. Las sub-celdas son colocadas en orden descendente de acuerdo a su bandgap. La sub-celda ubicada en la parte frontal del dispositivo captura los fotones de más alta energía y deja pasar el resto de los fotones hacia abajo para ser absorbidos por las sub-celdas con menores bandgap. De esta manera, cada sub-celda absorbe una porción diferente del espectro solar, mejorando el rendimiento en comparación con las celdas individuales separadas.

En resumen, las MJSC tienen entre sus ventajas una alta sensibilidad en un amplio rango de longitudes de onda y un excelente rendimiento. La desventaja de este tipo de dispositivos es el alto costo de fabricación debido a la superposición de dos o más celdas.

### **Radiación electromagnética**

Es posible definir la radiación electromagnética como la energía que se transporta de un lugar a otro en la forma de partículas de alta velocidad y ondas electromagnéticas (combinación de campos eléctricos y magnéticos oscilantes). Esta radiación está presente en nuestra vida cotidiana en la forma de luz visible, ondas de radio y televisión, y microondas. Se puede dividir en dos categorías: la radiación ionizante (RI) y la radiación no ionizante (RNI) [9].

La RI, se refiere a las ondas electromagnéticas de frecuencia extremadamente elevada que poseen energía suficiente para remover electrones de las órbitas de los átomos convirtiéndolos en iones con carga eléctrica positiva y con un comportamiento sumamente inestable. Incluye rayos X, rayos gama, protones, neutrones y electrones.

Por el contrario, la RNI son las ondas electromagnéticas sin la suficiente energía como para provocar la ruptura de los enlaces atómicos, como por ejemplo, las microondas, ondas de radio y luz visible.

Por lo tanto, la RI es el tipo de radiación que necesita ser evaluada con propósitos de minimizar los daños que sufren los materiales y los dispositivos semiconductores y poder mejorar su protección contra la radiación.

### **Ambiente espacial**

La radiación existente en el ambiente espacial consiste principalmente de RI, a través de partículas cargadas de alta energía. Estas partículas provienen de tres fuentes de radiación diferentes: eventos solares, rayos cósmicos y cinturones de radiación [10].

El conocimiento del ambiente cósmico es esencial para predecir si un dispositivo podrá resistir la radiación total que actuará sobre él en el espacio. Investigaciones teóricas y experimentales acerca de los efectos que produce sobre los semiconductores la irradiación de partículas de alta energía (protones, electrones, neutrones e iones pesados), han permitido caracterizar los daños que sufren los dispositivos electrónicos destinados a operar en sistemas que están en órbita. Entre los principales podemos encontrar la ionización y el desplazamiento de átomos, los cuales provocan la degradación de la estructura

de los componentes y sistemas electrónicos allí presentes, acelerando su envejecimiento como consecuencia de la prolongada exposición a la radiación espacial. Estos daños pueden provocar, en el peor de los casos, fallas permanentes del sistema electrónico en su conjunto.

Por esta razón, el estudio de métodos de protección y de tolerancia a la radiación, que persigue el objetivo de asegurar el correcto funcionamiento de un dispositivo durante el ciclo de vida del sistema, continúa siendo hoy en día un tema trascendental en la ciencia relacionada con las aplicaciones espaciales. En este sentido, el análisis de los efectos de la radiación en dispositivos electrónicos mediante simulaciones juega un papel primordial.

### **Líneas de Investigación, Desarrollo e Innovación**

- Utilización de códigos de simulación para el análisis de MJSC basadas en heterojunturas de semiconductores compuestos III-V. Las simulaciones numéricas son llevadas a cabo variando los principales parámetros a ser considerados durante la fase de diseño de los dispositivos: densidades de portadores, espesores de las regiones que lo conforman, materiales, tipo y número de juntas, y condiciones de operación, tanto para aplicaciones terrestres como espaciales, con la finalidad de diseñar y optimizar dispositivos con mayores eficiencias y tolerancia a la radiación.
- Análisis de las variaciones de las características eléctricas (corriente oscura, fotocorriente, corriente de cortocircuito, tensión de circuito abierto, potencia máxima y eficiencia) y ópticas (respuesta espectral, responsividad y eficiencia cuántica)

externa) de las MJSC. Estas características son generalmente utilizadas para cuantificar los daños sufridos por los dispositivos destinados a operar en condiciones adversas de funcionamiento.

- Caracterización de materiales semiconductores compuestos III-V altamente dopados en presencia de elevados campos electromagnéticos, de tal manera de optimizar el rendimiento de los concentradores solares luminiscentes.

### Resultados y Objetivos

- Comprender el funcionamiento de las MJSC desde el punto de vista físico, e implementar los mecanismos necesarios para proponer nuevos diseños, que mejoren su respuesta frente a la radiación ionizante.
- Obtener modelos analíticos que permitan predecir el comportamiento de los dispositivos y materiales bajo diferentes condiciones de operación.
- Evaluar los efectos que la radiación ionizante ocasiona sobre los materiales semiconductores de interés.
- Convalidar los resultados teóricos obtenidos, mediante comparaciones con datos experimentales existentes en la literatura científica.
- Fomentar la generación de recursos humanos en esta línea de investigación, donde se conjuga la física de los dispositivos y materiales, y la informática a través del desarrollo de herramientas computacionales.

### Formación de Recursos Humanos

Se trata de una línea de Investigación con características multidisciplinarias que es parte de un reciente Proyecto de Investigación Científico-Tecnológico de

la UNAJ. Esto abre una puerta para la inclusión de investigadores y estudiantes relacionados con las carreras de Ingeniería, Física o Informática.

Dentro de la temática de la línea de I/D/I los autores de este trabajo participan como docentes en la carrera Ingeniería Informática de la Universidad Nacional Arturo Jauretche (UNAJ) y en la carrera Ingeniería Electrónica de la Universidad Nacional de La Plata (UNLP).

### Referencias

- [1] <http://www.pv.unsw.edu.au/links/products/pc1d.asp>.
- [2] <http://www.synopsys.com/Tools/TCAD/ProcessSimulation/Pages/SentaurusProcess.aspx>
- [3] Ardavan F., et al., "MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method," *Computer Physics Communications* 181, 687–702, 2010.
- [4] Shockley, W., Queisser, H.J., *Journal of Applied Physics*, 32, pp. 510-519 (1961).
- [5] [http://www.pv-tech.org/news/zsw\\_achieves\\_record\\_lab\\_cigs\\_cell\\_efficiency\\_of\\_20.8](http://www.pv-tech.org/news/zsw_achieves_record_lab_cigs_cell_efficiency_of_20.8)
- [6] López, A.C., Martí, A. y Luque, A., *Next Generation of Photovoltaics: New Concepts*. Springer. 2012.
- [7] Guter, W. et al., "Current-matched triple-junction solar cell reaching 41.1% conversion efficiency under concentrated sunlight", *Applied Physics Letters* 94, pp. 223504. 2009.
- [8] Rousseau, I and Wood, V, "Nanophotonic luminescent solar concentrators", *Applied Physics Letters*, 103, 13, 2013.
- [9] <http://srag-nt.jsc.nasa.gov/SpaceRadiation/What/What.cfm>
- [10] Claeys, C. y Simeón, E., "Radiation Effects in Advanced Semiconductor Materials and Devices", Springer (2002).