1- "Defectos complejos en semiconductores y aislantes: defectos indeseables, y defectos útiles."

Dra. Ventura Cecilia Ileana

Tel: Email: ventura@cab.cnea.gov.ar Cargo:

Codirector:

Lugar: Centro Atómico Bariloche - División Teoría de la Materia Condensada

Orientación: Materia Condensada

Método 1: Teórico Método 2: Computacional

Información Adicional: Se prevee la colaboración con colegas de México, Irlanda y el CAB en esta tesis.

Descripción:

Los defectos, intencionalmente introducidos o no, tienen un impacto importante en las propiedades electrónicas y ópticas de las aleaciones semiconductoras.

Existen numerosas técnicas para el tratamiento de defectos sustitucionales en materiales y aleaciones. Y actualmente los métodos ab-initio posibilitan el cálculo de la estructura electrónica de sólidos que incluyan defectos no-sustitucionales simples, como por ej. intersticiales en los que un defecto puntual se ubica entre sitios de la red cristalina.

Pero no existen a la fecha técnicas standard para el tratamiento de defectos no-sustitucionales complejos, es decir formados por varias componentes.

Un ejemplo de defecto no-sustitucional complejo es el defecto denominado "β-Sn" que aparece al dopar el Germanio con suficiente Estaño, caso en el que un átomo de Sn puede ubicarse en el centro entre un par de sitios vecinos desocupados en la red de Ge (o divacancia de Ge).

Este defecto complejo puede pensarse entonces también como una impureza de Sn intersticial ligada a la divacancia de Ge.

Las aleaciones binarias homogéneas formadas por Ge y Sn, y las aleaciones ternarias formadas por Ge, Si y Sn son de alto interés para aplicaciones tecnológicas por ej. en optoelectrónica, como componentes de celdas solares de alto rendimiento en particular para aplicaciones satelitales.

Pero la presencia de defectos "β-Sn" en estas aleaciones limita su utilidad.

En trabajos previos hemos estudiado la formación de estos defectos, para identificar cómo puede limitarse o evitarse su aparición. Y desarrollamos un método analítico para poder incluir su efecto en el cálculo de la estructura electrónica de las aleaciones, a través de la determinación de un defecto equivalente sustitucional para los defectos "β-Sn" empleando funciones de Green y datos del defecto obtenidos mediante cálculos ab-initio previos.

En este trabajo se propone adaptar el tratamiento realizado para incluir los defectos "β-Sn" en el cálculo de estructura electrónica de las aleaciones Ge-Sn, a otro tipo de defectos no-sustitucionales complejos que recientemente caracterizamos con cálculos ab-initio: los defectos no-sustitucionales que se forman en aleaciones diluidas de N en AsGa, de los cuales algunos impactan favorablemente en las aplicaciones tecnológicas fotovoltaicas y de fotoluminiscencia para uso en dispositivos electrónicos con estas aleaciones.