



ID de la contribución : 460

Tipo : Oral parallel contribution

## Impacto de la Implantación de Vanadio y vacantes de Silicio en la Estructura Cristalina y Propiedades de Absorción Ópticas del Silicio

*miércoles, 19 de julio de 2017 18:15 (30)*

Este trabajo presenta un estudio de la estructura cristalina y las características de absorción óptica de materiales basados en silicio implantados con vanadio mediante cálculos de la teoría funcional de la densidad (DFT) y de quasi-partícula. Nuestros resultados señalan que la estructura electrónica del silicio puede modificarse adecuadamente a través de la implantación en V para mejorar la absorción por debajo del bandgap (sub-bandgap). La Teoría Funcional de Densidad (DFT) se ha utilizado para estudiar las estructuras cristalinas, las estabilidades y las propiedades electrónicas de los compuestos de silicio implantados en V. Debido a que los defectos son comunes en los materiales naturales y pueden modificar las propiedades eléctricas y ópticas, también se estudian diferentes modelos de silicio implantado con V en presencia de Vacantes de Si. Por último, para hacer frente a la sub-estimación en el bandgap de los métodos DFT, se realizaron cálculos más precisos a través de la aproximación G0W0, lo que da una clara mejoría en los bandgaps calculados. En resumen, nuestros resultados muestran que las características de absorción de silicio se puede extender hasta la región infrarroja a través de la adición de sub-gap transiciones a través de bandas de vanadio situado en el bandgap del Si.

**Primary author(s) :** Dr. GARCÍA, Gregorio (ETSI Telecomunicación. Universidad Politécnica de Madrid)

**Co-author(s) :** Prof. MENÉNDEZ-PROUPIN, Eduardo (3Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile.); Sr. CASANOVA-PÁEZ, Marcos (3Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile.); Dr. PALACIOS, Pablo (Universidad Politécnica de Madrid); Prof. WAH-NON, Perla (Universidad Politécnica de Madrid)

**Presenter(s) :** Dr. GARCÍA, Gregorio (ETSI Telecomunicación. Universidad Politécnica de Madrid)

**Clasificación de la sesión :** Energy and Sustainability III

**Clasificación de temáticas :** Energy and Sustainability