

Université Mohamed Khider – Biskra  
Faculté des Sciences et de la technologie  
Département : Génie Electrique.  
Ref : .....



جامعة محمد خيضر بسكرة  
كلية العلوم و التكنولوجيا  
قسم: الهندسة الكهربائية  
المرجع: .....

Mémoire présenté en vue de l'obtention  
du diplôme de  
**Magister en : Electronique**  
Option : signaux et communication

**Modélisation numérique de la photoconductivité  
modulée avec inclusion du processus de  
phototransport par saut " hopping" dans le silicium  
amorphe hydrogéné (a-Si : H)**

Présenté par :

**Guedidi Nadia**

Soutenu publiquement le 06/12/ 2012

**Devant le jury composé de :**

<b>Dr. Sengouga Nourddine</b>	<b>Professeur</b>	<b>Président</b>	<b>Université de Biskra</b>
<b>Dr. Tobbeche Souad</b>	<b>Maitre de Conférences</b>	<b>Rapporteur</b>	<b>Université de Biskra</b>
<b>Dr. Dhimi Lakhdar</b>	<b>Professeur</b>	<b>Examineur</b>	<b>Université de Batna</b>
<b>Dr. Ben Akcha Abdelhamid</b>	<b>Maitre de Conférences</b>	<b>Examineur</b>	<b>Université de Biskra</b>

## *Dédicace*

*Je dédie ce travail à :*

*Mon père et à ma mère,*

*Mon mari et mon enfant Mohamed Khalil*

*Mes frères, mes sœurs et mes proches.*

## **Remerciements**

Je remercie vivement Dieu le tout puissant pour m'avoir donné la volonté de réussir et de terminer mon travail.

Je tien à remercier ma directrice de mémoire de magister Mademoiselle Tobbeche Souad pour m'avoir constamment aidée, orientée et conseillée tout au long de ce travail.

Je remercie vivement Monsieur Sengouga Nouredine pour m'avoir fait l'honneur d'assurer la présidence du jury.

Je tiens à remercier Messieurs Dehimi Lakhdar et Ben Akcha Abdelhamid d'avoir accepté de juger ce travail.

Mes remerciements s'adressent à tous les membres du laboratoire des Matériaux Semiconducteurs et Métalliques.

J'adresse toute ma reconnaissance aux personnes qui, de près ou de loin m'ont aidé à l'accomplissement de ce travail.

## Résumé

Ce travail a pour but de simuler numériquement la photoconductivité modulée dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) et par conséquent son utilité dans la détermination de la densité des états localisés dans le gap de ce matériau. Ce travail est basé sur les deux mécanismes de transport de "multitrapping" et de saut dans une simulation numérique de la photoconductivité modulée qui tient compte, des conditions de température, de la densité des états introduites et de l'excitation de la lumière. La simulation numérique de la photoconductivité modulée (PCM) nécessite en premier lieu la simulation du régime stationnaire. Pour cela, nous avons commencé notre travail par la simulation de la photoconductivité en régime stationnaire (PCS). Les courbes de la PCS en fonction de la température ainsi simulée dans le cas d'un échantillon intrinsèque se trouvent en bon accord avec les résultats expérimentaux correspondants. Les contributions des deux mécanismes de transport ("multitrapping", saut) dans la photoconductivité stationnaire en fonction de la température, de la densité des états et de l'excitation de la lumière sont aussi examinées. La simulation numérique de la photoconductivité modulée nous a permis de calculer la DOS reconstruite pour différentes températures. L'effet de la densité des états introduite et l'effet de l'excitation de la lumière sur les deux processus de conduction ("multitrapping", saut) sont aussi examinés dans la PCM. Les courbes de la PCM obtenues par simulation se trouvent en accord avec les résultats expérimentaux de la PCM dans l'a-Si:H.

**Mots clé :** Photoconductivité modulée, a-Si:H, " Multitrapping ", " Hopping "

# SOMMAIRE

<b>Introduction générale</b>	1
<b>Chapitre 1: Propriétés du silicium amorphe</b>	
1.1 Introduction	3
1.2 Semiconducteur amorphe	3
1.2.1 Structure cristalline parfaite	3
1.2.2 Structure Amorphe	4
1.3 Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H)	4
1.3.1 Structure du silicium amorphe	4
1.3.2 Propriétés électroniques du silicium amorphe	6
1.3.3 Structure de bande et densité des états	6
1.3.4 Etats de queues de bandes	7
1.3.5 Etats des liaisons pendantes	8
1.4 Méthode de dépôt du a-Si:H	10
1.5 Absorption optique du a-Si :H	11
Références	13
<b>Chapitre 2: Mécanisme de conduction dans les semiconducteurs amorphes</b>	
2.1 Introduction	14
2.2 Conduction dans les états étendus	14
2.3 Conduction dans les bandes d'états localisés	15
2.3.1 Conductivité dans les queues de bande	16
2.3.2 Conduction dans les états localisés profonds	17
2.3.3 Conductivité dans le cas du saut au plus proche voisin	18
2.3.4 Conductivité selon le modèle du saut à distance variable	19
Références	21
<b>Chapitre 3: Technique du photocourant modulé et calcul de la DOS dans le gap</b>	
3.1 Introduction	22
3.2 Notions élémentaires sur la photoconductivité	22
3.2.1 Absorption et recombinaison	22
3.2.2 Conductivité et photoconductivité	25
3.3 Analyse générale du photocourant modulé	25
3.3.1 Expressions du déphasage et du module du photocourant modulé	28

3.3.2 Détermination de la densité des états	30
3.4 Montage expérimental de la technique du photocourant modulé	35
Références	38
<b>Chapitre 4: Simulation numérique de la photoconductivité modulée</b>	
4.1 Introduction	39
4.2 Processus de piégeage multiple	39
4.3 Processus de saut	40
4.4 Modélisation numérique de la photoconductivité modulée	42
4.4.1 Equations du modèle	42
4.4.2 Méthode de résolution	44
4.5 Calcul de la photoconductivité et de la densité des états $g(E)$	46
Références	51
<b>Chapitre 5: Résultats et discussions</b>	
5.1 Introduction	52
5.2 Résultats et interprétations	52
5.2.1 Photoconductivité à l'état stationnaire (PCS)	52
5.2.1.1 Influence de la température sur les processus de conduction (MT, saut)	55
5.2.1.2 Influence de la densité des états sur les processus de conduction (MT, saut)	56
5.2.1.3 Influence de l'excitation de la lumière sur la photoconductivité	59
5.2.2 Photoconductivité modulée	62
5.2.2.1 Effet de la DOS sur la MPC en présence des deux processus de transport	64
5.2.2.2 Effet de l'excitation de la lumière sur la photoconductivité modulée	66
5.2.3 Densité des états mesurée par la technique du photocourant modulé	70
Références	72
Conclusion	73

## Introduction générale

La technique du photocourant modulé (PCM) est utilisée pour caractériser la densité des états dans la bande interdite des semiconducteurs en couches minces tel que le silicium amorphe hydrogéné a-Si :H. L'analyse du photocourant modulé permet de déterminer la distribution énergétique des états localisés du matériau. Oheda[1] est le premier qui a pu montrer qu'une partie de la densité des états pouvait être extraite des mesures de l'amplitude de la partie alternative du photocourant et de son déphasage par rapport à l'intensité de la lumière appliquée sur le matériau. Bruggemann et al [2] ont ensuite montré qu'à partir d'expressions analytiques simples pouvaient être obtenues lorsque les mesures sont faites à une fréquence suffisamment élevée. La densité des états à une énergie donnée est directement reliée au rapport entre le sinus du déphasage et le module de la partie alternative du photocourant. Longeaud et Kleider ont développé un calcul général du photocourant modulé, basé sur les équations de continuité des électrons et des trous en prenant en compte d'abord un seul type d'états monovalents [3] puis des états corrélés [4].

Vu la complexité de la structure énergétique du matériau a-Si :H, le modèle existant de la technique de la photoconductivité modulée manque de détail du processus de phototransport par saut des photoporteurs entre les états localisés du 'gap' et ne fait intervenir que le processus de phototransport par multi piégeage. Longeaud et al [5] ont récemment développé un modèle de la photoconductivité modulée par inclusion du processus de phototransport dans ce modèle.

Ce travail consistera à la simulation numérique de la photoconductivité modulée en incluant la photoconduction par saut des photoporteurs et la détermination de la densité des états dans le a-Si :H.

Ce travail est divisé en cinq chapitres :

Le premier chapitre est consacré à la description des propriétés électroniques et optiques du a-Si :H. Dans le deuxième chapitre seront établies les différentes lois que peut suivre la conductivité électrique des semiconducteurs amorphes qui dépendent notamment de la nature des états impliqués dans la conduction, et peuvent correspondre à des états étendus des bandes de valence et de conduction et des états localisés associés au désordre structural. Le troisième chapitre décrit les notions élémentaires et les modèles de l'analyse de la technique du photocourant modulé

dans l'a-Si:H. Le quatrième chapitre est consacré à décrire les modèles de transport par piégeage multiple ("Multitrapping") et par saut ("Hopping") ainsi que la modélisation de la technique de la photoconductivité modulée qui doit être précédée par la modélisation du phototransport en régime stationnaire. Dans le cinquième chapitre seront exposés les résultats de la simulation numérique concernant la photoconductivité en régime stationnaire et modulée dans le a-Si:H. Il inclut l'effet de la densité des états introduite et l'effet de l'excitation de la lumière sur les deux processus de conduction dans les deux régimes (stationnaire et modulée) et la comparaison des résultats obtenus par la simulation avec les mesures expérimentales existantes dans la littérature [6, 5].

Finalement, ce travail sera clôturé par une conclusion sur l'ensemble des résultats obtenus.

### Références

- [1] Oheda, H. (1981) *J. Appl. Phys.* **52** 6693.
- [2] Bruggemann, R., Main C., Berkin, J., and Reynolds, S. (1990) *Phil. Mag. B* **62** 29.
- [3] Longeaud ,C., and Kleider, J. P. 1992 *Phys. Rev. B* **45** 11672.
- [4] Longeaud ,C ., and Kleider, J. P. 1993 *Phys. Rev. B* **48** 8715.
- [5] Longeaud ,C., and Tobbeche, S. (2009) *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 045508.
- [6] Fuhs, W. (2008) *J. Non Cryst. Solids* 354, 2067–2078.



## 1.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons décrire les propriétés électroniques et optiques des semiconducteurs amorphe dépendantes essentiellement des états localisés dans la bande interdite qui agissent comme des pièges ou des centres recombinants pour les porteurs libres. La technique de dépôt d'une couche en silicium amorphe hydrogéné sera aussi décrite dans ce chapitre.

## 1.2 Semiconducteur amorphe

### 1.2.1 Structure cristalline parfaite

Un cristal parfait est constitué d'une répétition périodique des atomes dans un réseau cristallin, l'électron est soumis au potentiel de même périodicité que le réseau, l'électron est décrit par une fonction d'onde de Bloch de la forme  $\psi_k(r) = u_k(r).e^{i.k.r}$ . Les états électroniques sont les fonctions propres de l'équation de Schrodinger [1] qui sont fonction de la symétrie du réseau, les niveaux énergétiques des électrons sont de la forme  $E(k)$  qui donne des bandes dans l'espace de  $k$ ; la figure 1.1 représentant la relation de dispersion  $E(k)$  Limitée à la première zone de Brillouin [2] est composée par des bandes permises et une bande interdite.

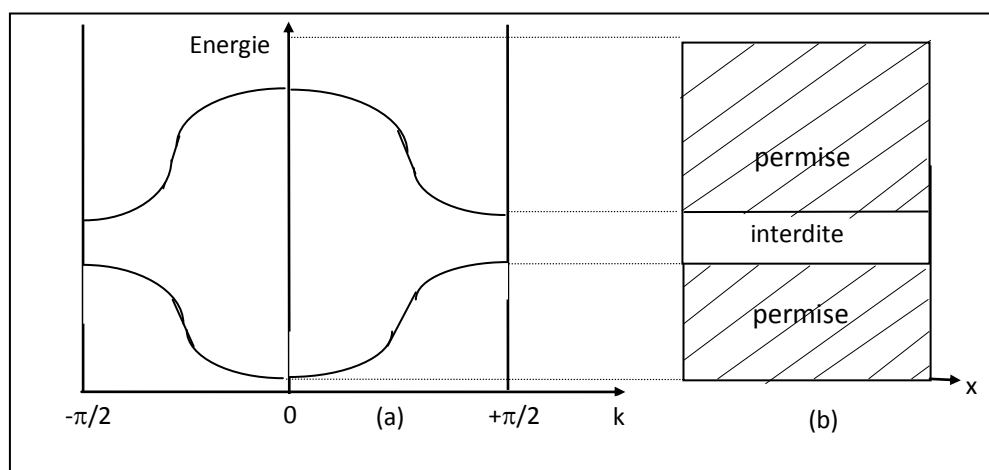


Figure 1.1: Représentation unidimensionnelle du spectre d'énergie électronique dans un cristal idéal.(a) dans l'espace des états  $k$ , limité à la première zone de Brillouin .(b) dans l'espace des  $x$  (dimension), montrant les bandes d'énergie permises et interdite.

La structure électronique d'un semiconducteur cristallin est représentée par la densité des états  $g(E)$  ( $\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ ) (Fig.1.2) : Une bande de valence avec un niveau supérieur  $E_v$ , et une bande de conduction avec un niveau inférieur  $E_c$ , séparées par une bande interdite "gap".  $g(E)$  varie comme  $E^{1/2}$  dans les bandes permises. Les fonctions d'onde de Bloch s'étendent partout dans les bandes permises du réseau infini décrivant les états étendus.

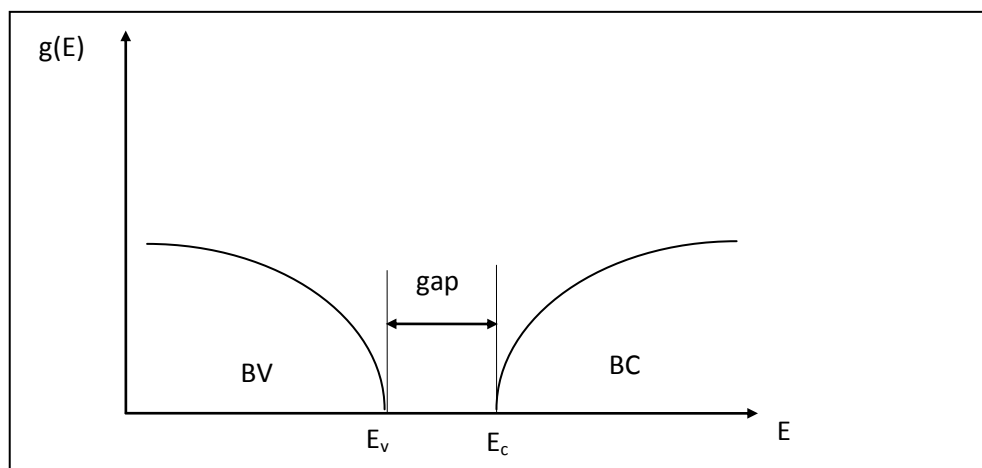


Figure 1.2: Densité des états dans les bandes de conduction et de valence d'un cristal parfait.

### 1.2.2 Structure Amorphe

Un matériau amorphe est un semiconducteur qui ne représente pas la même structure régulière et périodique d'un cristal, il a une structure désordonnée de ces atomes. Mais le désordre n'est pas total; il dépend en particulier de la façon par laquelle il a été obtenu, la structure atomique désordonnée conduit à ce que le théorème de Bloch ne peut pas être appliqué et les fonctions d'onde ne sont pas des fonctions de Bloch. Dans la structure amorphe, les fonctions d'onde ne sont pas étendues mais deviennent localisées.

## 1.3 Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H)

### 1.3.1 Structure du silicium amorphe

Dans le silicium cristallin, les atomes sont arrangés en cellules identiques de structure tétraédrique ordonnée se répétant d'une manière périodique dans le réseau cristallin (Fig.1.3(a)). Par contre le silicium amorphe ne possède pas de réseau régulier, les

liaisons covalentes entre les atomes du silicium amorphe sont distordues au niveau des longueurs et des angles de liaison à partir des seconds et troisièmes voisins (tétraèdre distordu (Fig.1.3(b))).

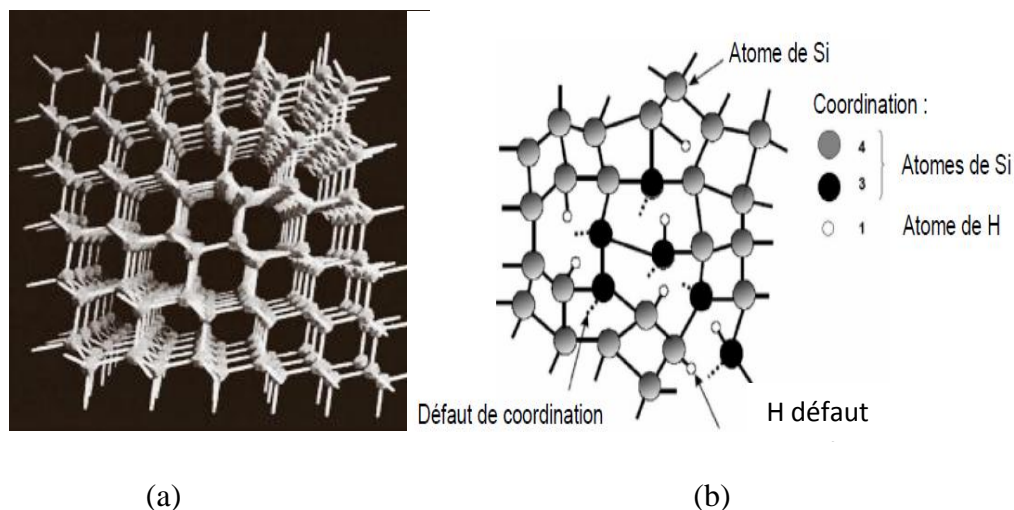


Figure 1.3 : Illustration schématique des structures cristalline (a) et amorphe (b) pour le silicium.

La valeur moyenne de la longueur du lien Si-Si dans le silicium amorphe est égale à celle du silicium cristallin (2.35 Å) et celle de l'angle entre les liaisons est égale à  $109^{\circ}28'$ . La distorsion au niveau des angles et des longueurs des liaisons fait que les atomes se disposent d'une manière ou certaines liaisons chimiques ne peuvent plus être satisfaites. Il y'aura donc des liaisons brisées ou des liaisons pendantes dans la structure. Les mesures par " Electron Spin Résonance " (ESR) montrent l'existence de  $10^{19}$  à  $10^{20}$  liaisons brisées par  $\text{cm}^3$  [3]. Ces liaisons pendantes représentent la source majoritaire des défauts profonds. Ces derniers peuvent être occupés partiellement par l'hydrogène et leur densité est réduite à  $10^{15}$ - $10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$  [4]. L'addition de l'hydrogène au silicium amorphe entraîne une meilleure efficacité de son dopage. L'ajout du dopant dans le a-Si:H a permis le déplacement du niveau de Fermi  $E_f$  vers le niveau  $E_c$  pour le dopage de type N et le niveau  $E_v$  dans le cas de dopage de type P.

### 1.3.2 Propriétés électroniques du silicium amorphe

Dans le silicium amorphe, la structure atomique désordonnée fait disparaître la périodicité du réseau. En l'absence d'ordre à longue distance, la structure de bande est globalement conservée [5]. Le modèle d'Anderson utilise l'approximation des liaisons fortes "tight binding" [6] qui convient aux fonctions d'ondes localisées et l'arrangement non périodique des puits de potentiel (Fig.1.4). Quand l'amplitude du potentiel devient importante, un électron d'énergie voisine du bord de bande se trouve piégé par les variations du potentiel; les états propres deviennent localisés. Dans ce modèle; il a été montré que les états de bande sont localisés si le rapport des fluctuations de potentiel  $V_0$  sur la largeur de bande  $B$  dépasse une certaine valeur critique. Dans les semiconducteurs amorphes cependant, ce rapport est faible. Les états d'énergie ne seraient pas localisés dans ces semiconducteurs. MOTT [7] a montré que même si le rapport  $V_0/B$  est inférieur à la valeur critique, les états situés en bord de bandes sont localisés.

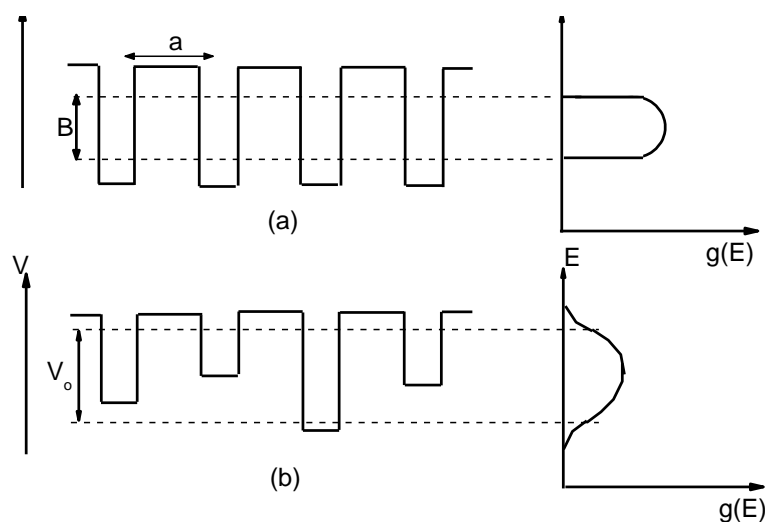


Figure 1.4: (a) puits de potentiel d'un cristal idéal, (b) puits de potentiel avec des fluctuations dues au désordre. La densité des états  $g(E)$  est montrée à droite [8].

### 1.3.3 Structure de bande et densité des états

Dans le silicium amorphe, les défauts de la structure atomique vont avoir une influence importante dans la bande interdite, cette dernière contient des états localisés

jouant le rôle de pièges pour les porteurs de charges, ces états proviennent soit du désordre dans la structure soit des défauts de liaisons pendantes.

Le gap et  $E_c$  ( $E_v$ ) dans ce cas sont appelés pseudo-gap et seuils de mobilité respectivement. La figure 1.5 illustre la densité des états dans le a-Si:H proposée par Mott et Davis [8]. Cette dernière comprend les bandes, les queues de bandes et les états des liaisons pendantes.  $E_v$  et  $E_c$  définissant les seuils de mobilité séparent les états énergétiques localisés dans le gap de ceux qui sont étendus à l'extérieur.

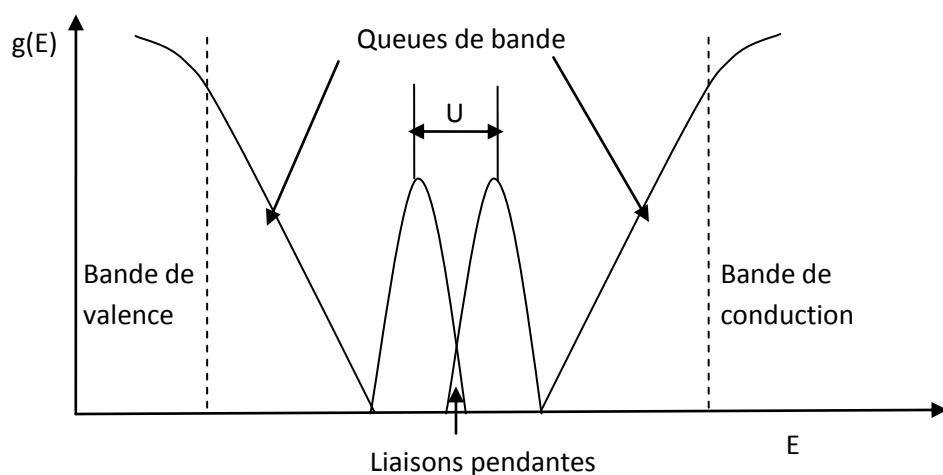


Figure 1.5 : Densité des états du silicium amorphe hydrogéné a-Si:H.

### 1.3.4 États de queues de bandes

A cause des variations aléatoires au niveau des angles et des longueurs de liaisons des atomes de Si, ces liaisons deviennent faibles. Les états de queues de bandes sont des états localisés dus aux liaisons faibles. Leurs densités des états sont souvent décrites par une loi exponentielle décroissante depuis les seuils de mobilité. La distribution des états de la queue de bande de valence (QBV) est décrite par :

$$g_v(E) = G_v \exp\left(-\frac{E - E_v}{E_{v0}}\right) \quad (1.1)$$

Où  $G_v$  est la densité des états au niveau  $E_v$  et  $E_{v0}$  l'énergie caractéristique de la QBV.

Par analogie la distribution des états dans la queue de bande de conduction (QBC) est de la forme :

$$g_c(E) = G_c \exp\left(-\frac{E - E_c}{E_{co}}\right) \quad (1.2)$$

Les énergies caractéristiques  $E_{vo}$  et  $E_{co}$  sont de l'ordre de 45–55 meV et 20–30 meV respectivement. Les états de la QBV sont plus sensibles aux variations au niveau des angles de liaisons que ceux de la QBC, de ce fait la QBV est plus large que la QBC [9]. Les densités des états aux bords de bandes  $G_v$  et  $G_c$  ont été mesurées par la spectroscopie de photoémission à rayon X [10];  $G_c$  est de l'ordre de  $4-8 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  et  $G_v$  est estimé du même ordre de grandeur que  $G_c$ . Le gap du silicium amorphe non dopé est environ 1.7 eV [11]. Wronski et al ont trouvé un gap de 1.9 eV [12].

### 1.3.5 Etats des liaisons pendantes

Autour du milieu de gap, se trouve une densité importante des états énergétiques liés aux défauts qui dépendent des conditions sous lesquelles le matériau a été fabriqué. Il est bien établi que les liaisons pendantes peuvent se trouver sous forme de trois états de charges: Le centre de liaisons pendantes est neutre lorsqu'il est occupé par un électron en donnant l'état  $D^0$ . Le centre de liaisons pendantes à l'état  $D^0$  peut capturer un autre électron et devenir doublement occupé en électrons et en donnant l'état  $D^-$ . Le centre de liaisons pendantes  $D^0$  peut perdre son électron et devenir chargé positivement, c'est l'état  $D^+$ . Les états  $D^0$ ,  $D^+$  et  $D^-$  sont généralement représenté par des gaussiennes et l'énergie de corrélation entre ces trois états de liaisons pendantes est  $U$  qui est de l'ordre de 0.2 à 0.3 eV [13] (Fig.1.5). La figure 1.6 montre le transfert entre les états  $D^0$ ,  $D^+$  et  $D^-$  et le changement d'état résultant.

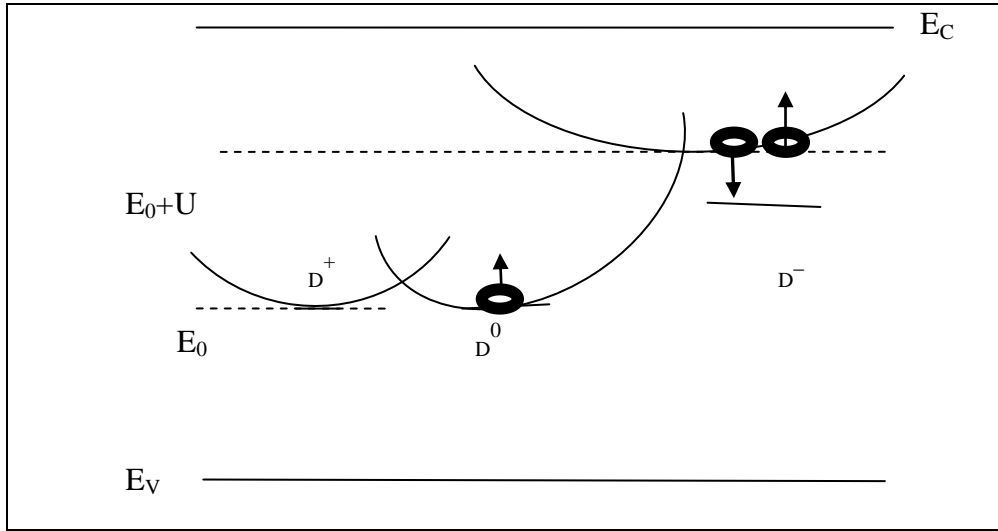


Figure 1.6: Illustration du transfert entre les états  $D^0$ ,  $D^+$  et  $D^-$ .

A l'équilibre thermodynamique, l'équation de conservation des liaisons pendantes est :

$$f_o^0 + f_o^+ + f_o^- = 0 \quad (1.3)$$

Où  $f_o^0$ ,  $f_o^+$ , et  $f_o^-$  sont les fonctions d'occupations respectivement à l'état  $D^0$ ,  $D^+$  et  $D^-$  des liaisons pendantes .

Les fonctions d'occupations sont calculées à partir des équations d'équilibre en  $E_0$  et  $E_0 + U$ . Elles sont données par [14] :

$$f_o^+ = \frac{1}{1 + 2 \exp([E_F - E_0]/kT) + \exp([2E_F - 2E_0 - U]/kT)} \quad (1.4)$$

$$f_o^0 = \frac{2 \exp([E_F - E_0]/kT)}{1 + 2 \exp([E_F - E_0]/kT) + \exp([2E_F - 2E_0 - U]/kT)} \quad (1.5)$$

$$f_o^- = \frac{\exp([2E_F - 2E_0 - U]/kT)}{1 + 2 \exp([E_F - E_0]/kT) + \exp([2E_F - 2E_0 - U]/kT)} \quad (1.6)$$

#### 1.4 Méthode de dépôt du a-Si:H

La méthode la plus courante de dépôt du silicium amorphe est la décomposition du silane en phase vapeur par une décharge électrique (un champ radiofréquence), encore appelée PECVD (pour *plasma enhanced chemical vapour deposition*) [15] (figure 1.7). Le gaz est envoyé à faible pression (13 à 1 300 Pa) dans une enceinte à vide propre, contenant deux électrodes. Pour une tension suffisante, une décharge électrique s'établit entre les électrodes conduisant à la décomposition du silane en éléments chimiques très actifs : radicaux Si, Si-H, Si-H<sub>2</sub>, Si-H<sub>3</sub> accompagnés des espèces ioniques correspondantes. Le plasma contient des électrons et des ions négatifs qui assurent la neutralité électrique globale. Ces éléments chimiques actifs ne demandent qu'à réagir par collisions avec les molécules de silane ou tout autre élément, donnant lieu à des réactions de condensation contenant deux ou plusieurs atomes de silicium. Ces atomes de silicium réagissent avec le substrat présent en formant un film mince de silicium amorphe hydrogéné qui croît à la vitesse de quelques dixièmes de nanomètre par seconde. Les qualités mécaniques et électroniques dépendent de très nombreux paramètres qui dépendent de la géométrie et du type de machine de dépôt. On contrôle en général le niveau de vide, la pression et le débit des gaz réactifs, la puissance électrique et la tension de la décharge, la fréquence de l'excitation électrique, la nature et la température du substrat, et la durée de chaque phase du dépôt. Les fréquences électriques les plus courantes sont, la radiofréquence à 13,5 MHz, ou les micro-ondes (915 MHz et 2,45 GHz). La température optimale de substrat se situe entre 180 et 300 °C. Aux températures trop basses, les réarrangements chimiques de surface ne sont pas assez rapides et aux trop hautes températures, l'hydrogène ne reste pas dans la couche.



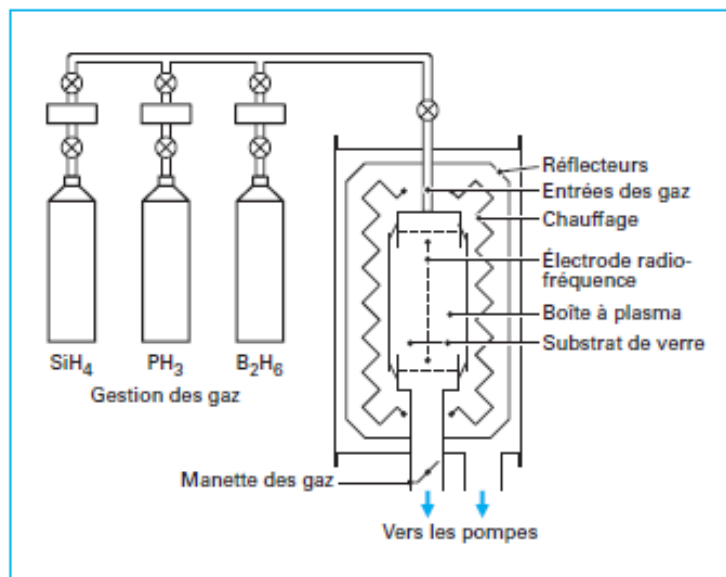


Figure 1.7: Schéma de dépôt PECVD dans une boîte à plasma d'un module au a-Si:H.

### 1.5 Absorption optique du a-Si :H

Dans les semiconducteurs amorphes, l'absorption optique fait intervenir en plus des états étendus dans les bandes de valence et de conduction les états localisés dans le gap. La figure 1.8 représente le coefficient d'absorption  $\alpha$  du silicium amorphe hydrogéné a-Si:H en fonction de l'énergie de photon.

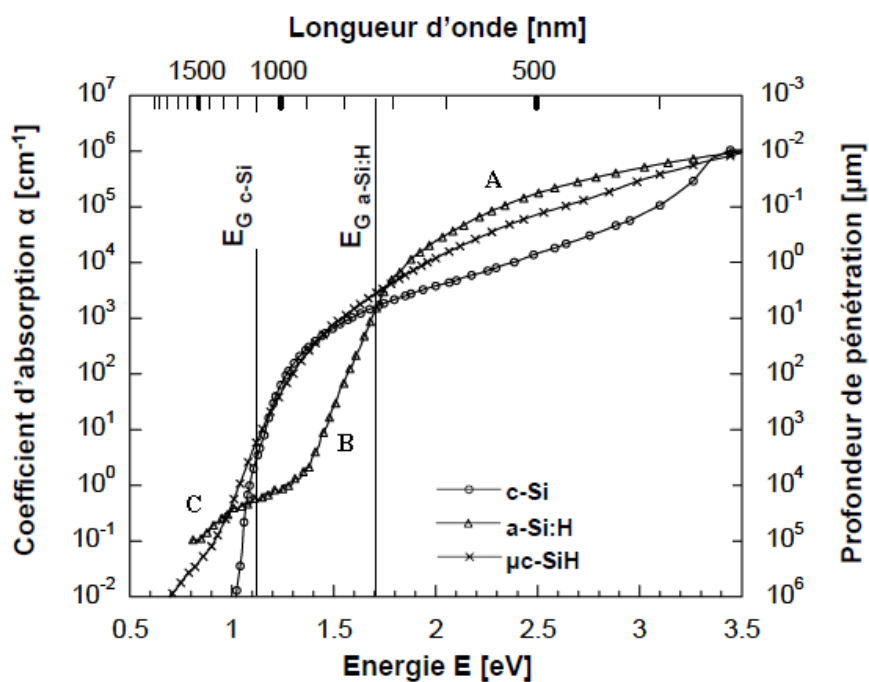


Figure 1.8 : Coefficient d'absorption en  $\text{cm}^{-1}$  en fonction de l'énergie pour le a-Si:H, le c-Si et le  $\mu\text{-Si:H}$ .

La figure montre trois régions bien distinctes :

**Région A :**

Cette région est caractérisée par une forte absorption ( $\alpha > 10^3$ - $10^4$  cm<sup>-1</sup>). L'absorption optique est contrôlée par les transitions optiques entre les états étendus. Pour décrire les variations de  $\alpha$  du a-Si:H dans cette région, Tauc propose l'équation suivante [16]:

$$\alpha \propto \frac{(E - E_g)^m}{E}$$

Où  $E$  étant l'énergie du photon,  $E_g$  le gap optique ou le gap de Tauc et  $m = 2$ . L'extrapolation donne 1.7 eV comme valeur de  $E_g$ . Ceci correspond à la frontière entre les états étendus et les états localisés.

**Région B :**

Dans cette région,  $10^{-1}$  cm<sup>-1</sup> <  $\alpha$  <  $10^3$  cm<sup>-1</sup>. L'absorption optique est en relation avec les transitions optiques impliquant les états localisés des queues de bandes, le coefficient d'absorption  $\alpha$  suit une loi exponentielle avec l'énergie du photon  $E$

$$\alpha = \alpha_o \exp\left(\frac{E}{E_u}\right)$$

Où  $\alpha_o$  est une constante et  $E_u$  est l'énergie d'Urbach [17]. Cette énergie est liée à la largeur de queue de bande de valence et à celle de la queue de bande de conduction.

**Région C :**

Elle est caractérisée par une faible absorption. L'absorption optique est contrôlée par les transitions optiques entre les états localisés profonds du gap et les états étendus.

**Références**

- [1] Mckelvey J.P. (1966) " Solid State and Semiconductor Physics", (New York).
- [2] Kittel C. (1983), "Introduction à la physique de l'état solide", Dunod.
- [3] Sapoval, B. et Hermann, C. (1990) "*Physique des Semiconducteurs*", Edition Ellipses, Paris 1990.
- [4] Street, R. A. (1991) "*Hydrogenated Amorphous Silicon*" Street, R. A. ed. Cambridge University Press.1991.
- [5] Weaire, D. and Thorpe, M. F. (1971) *Phys. Rev. B* **4**. 2508.
- [6] Mckelvey, J. M. (1966) "*Solid state and Semiconductor Physics*", Harper, New York. 208.
- [7] Mott, N. F. (1970) *Phil. Mag.* **22**. 7.
- [8] Mott, N. F., and Davis, E. A. (1979) "*Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*" Second edition. Clarendon Press. Oxford 1979.
- [9] Overhof, H., and Thomas, P. (1989), Springer, pp. 13.
- [10] Jackson, W. B., Kelso, S. M., Tsai, C. C., Allen, J. W. and Oh, S. J. (1985) *Phys. Rev. B* **31**. 5187.
- [11] Stuke, J. (1987) *J. Non-Cryst Solids.* **1**. 97.
- [12] Wronski, C. R., lee, S., Hicks, M. and Satayendre, K. (1989) *Phys. Rev. Lett.* **63**. 1420.
- [13] Lee, J. K., and Schiff, E. A. (1992) *Phys. Rev. Lett.* **68**. 2972.
- [14] Okamoto, H., Kida, H. and Hamakawa, Y. (1984) *Phil. Mag. B* **49**. 231.
- [15] Abhijit D., Sukriti G., Swati R., "*Solar Energy Materials and Solar Cells*", Volume 26, Issues 1-2, March 1992, Pages 137-147
- [16] Tauc T. (1974) "Amorphous and Liquid Semiconductors, Plenum Press", New York.
- [17] Urbach F. (1953) *Phys. Rev.* **92** (1953) 1324.

## 2.1 Introduction

Dans ce chapitre, on va établir les différentes lois que peut suivre la conductivité électrique des semiconducteurs amorphes. Ces lois dépendent notamment de la nature des états impliqués dans la conduction, et peuvent correspondre à :

- des états étendus des bandes de valence et de conduction.
- des états localisés associés au désordre structural.
- des états localisés au voisinage du niveau de Fermi : le mécanisme de transport par saut ou par effet tunnel apparaissent : saut au plus proche voisin (" Hopping to the Nearest Neighbour "), ou saut à distance variable (" Variable Range Hopping ").

## 2.2 Conduction dans les états étendus

On suppose que le semiconducteur est non dégénéré; le niveau de Fermi est situé dans le gap entre la bande de valence et la bande de conduction et que les états de queue de bande ont une faible densité, si bien que seule la conduction dans les états étendus peut avoir lieu.

La conductivité est obtenue à partir de l'expression générale dans tous les semiconducteurs:

$$\sigma = q \int N(E) \mu(E) f(E, T) dE \quad (2.1)$$

Où  $q$  est la charge électronique,  $N(E)$  est la densité des états et  $F(E, T)$ , la fonction de Fermi-Dirac.

Avec les hypothèses simplificatrices suivantes :

- $N(E)$  est constante dans les états étendus, soit  $N(E) \approx N(E_c)$  ;
- la mobilité  $\mu$  est nulle dans le gap est égale à une valeur moyenne  $\mu_e$  dans les états étendus.

Il en résulte que :  $\sigma = qN(E_c)\mu_e kT \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right)$  , d'où la loi pour les

semiconducteurs :

$$\sigma = \sigma_o \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \quad (2.2)$$

Où  $\sigma_o = qN(E_c)\mu_e kT$

Dans les semiconducteurs amorphes et pour des températures élevées, les électrons peuvent être excités thermiquement au dessus du seuil de mobilité. Juste au dessus

de  $E_c$ , le désordre réduit leur libre parcours moyen  $L$  et qui est comparable à la distance interatomique  $a$  ( $L \sim a$ ). L'électron n'est pas totalement libre et son mouvement est décrit par un mouvement brownien sans activation thermique. Cohen [1] a proposé la mobilité en  $E_c$  ( $\mu_c$ ) en considérant le mouvement brownien sans activation thermique par la relation suivante :

$$\mu_c = \frac{qa^2}{6kT} \nu \quad (2.3)$$

où  $\nu$  la fréquence de l'électron près de  $E_c$  est de l'ordre de  $10^{14}$ - $10^{15}$  Hz.  $a$  est le paramètre du réseau. Pour  $T = 300$  K,  $a = 4 \text{ \AA}$  et  $\nu = 10^{15}$  Hz, la mobilité  $\mu_c$  a pour valeur  $10 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ .

La conductivité  $\sigma_c$  en  $E_c$  dans le cas d'un semiconducteur amorphe est donné par

$$\sigma_c = q \cdot \mu_c \cdot N(E_c) \cdot k.T \cdot \exp\left(\frac{\delta}{k}\right) \cdot \exp\left(\frac{-E_o}{k.T}\right) \quad (2.4)$$

Où  $\exp\left(\frac{\delta}{k}\right)$  est une constante associée à la réduction du gap avec l'augmentation de la température selon l'équation [2] :

$$E_c - E_F = E_o - \delta T \quad (2.5)$$

$E_o$  est la valeur de  $E_c - E_F$  à  $T=0^\circ\text{K}$  et c'est l'énergie d'activation de  $\sigma_c$ .

### 2.3 Conduction dans les bandes d'états localisés

On va considérer maintenant les semiconducteurs avec de nombreux états localisés, et correspondants essentiellement à deux cas :

- Celui associé à un semiconducteur amorphe, avec des états localisés induits essentiellement par le désordre et donc très faiblement peuplés, de telle sorte que le niveau de Fermi se trouve au-dessous des queues de bande.

- Celui qui correspond à un semiconducteur présentant de nombreux défauts (impuretés, liaisons pendantes...) qui introduisent des niveaux localisés profonds dans le gap et suffisamment occupés par les porteurs.

### 2.3.1 Conductivité dans les queues de bande

La conduction ne peut avoir lieu que par des sauts thermiquement activés : lors du passage d'un site localisé de niveau  $E_a$  à un autre, le porteur de charge reçoit de l'énergie de la part d'un phonon.

La conductivité est encore donnée par l'équation (2.2), mais avec cette fois-ci

$$\mu_H = \left( \frac{qR^2}{6kT} \right) \exp(-2\alpha R) v_{ph} \exp\left( \frac{-W}{kT} \right),$$

$W$  représente la barrière d'énergie qui sépare les états localisés;  $v_{ph}$  représente la probabilité de transition entre deux états localisés, elle représente aussi la fréquence de phonons, qui sont les quasi-particules qui stimulent en fait les transitions entre ces états localisés. La longueur  $R$  correspond au libre parcours moyen entre deux sauts,  $\exp(-2\alpha R)$  est le terme de chevauchement entre deux fonctions d'onde centrées à une distance de séparation  $R$  et une longueur de localisation  $\alpha^{-1}$  (Figure 2.1).

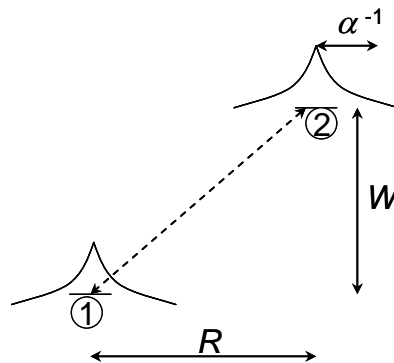


Figure 2.1 : Illustration du modèle de saut entre deux états localisés (1) et (2) séparés par la distance  $R$  et l'énergie  $W$ ;  $\alpha^{-1}$  est la longueur de localisation.

Une valeur typique de la fréquence de phonons  $v_{ph}$  est de l'ordre de  $10^{13} \text{ s}^{-1}$ . Avec  $W = kT$ , on obtient à la température ambiante une mobilité typiquement de l'ordre de

$10^{-2} \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ; c'est une valeur plus faible de deux ordres de grandeur par rapport à la mobilité dans les états étendus.

La conductivité correspondante est comme suit :

$$\sigma_H = q \cdot \mu_h \cdot k.T \cdot N(E_a) \cdot \exp\left(\frac{E_F - E_a - W}{k.T}\right) \quad (2.6)$$

### 2.3.2 Conduction dans les états localisés profonds

Ce cas se présente lorsque les semiconducteurs contiennent une très forte concentration de défauts, et présentent par conséquent une forte densité d'états localisés dans le gap : le transport électronique s'effectue directement dans cette bande, par saut d'un état occupé vers un état vide avec la contribution d'un phonon. L'effet d'un fort désordre peut être produit par la présence de nombreux défauts (liaison pendante saturée ou non). Une bande d'états localisés est générée dans laquelle se trouve le niveau de Fermi (figure 2.2).

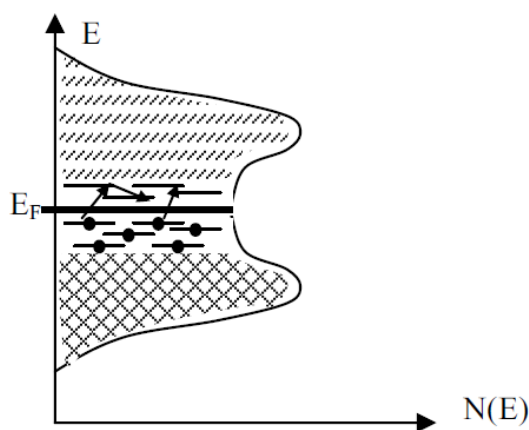


Figure 2.2 : Conduction dans une bande d'états localisés près du niveau de Fermi. Les zones hachurées en traits obliques et en quadrilles correspondent respectivement aux états inoccupés et occupés.

Le mécanisme de conduction dans un tel type de bande a été étudié dans les semiconducteurs amorphes pour lesquels Mott [3] a proposé un mécanisme de transport appelé saut à distance variable. Dans ce cas, le transport est supposé s'effectuer entre deux niveaux localisés A et B séparés énergétiquement l'un de l'autre de  $\Delta E$  (figure

2.3) : la conduction correspond alors à un mécanisme de « saut » par effet tunnel (2) thermiquement assisté (1); sauf aux températures élevées, ce transport est favorisé (en ne nécessitant que l'énergie  $\Delta E$ ) par rapport au saut (S) uniquement thermiquement assisté et qui nécessite une énergie  $U \gg \Delta E$ .

Le transfert du porteur du site A au site B nécessite alors trois étapes (figure 2.3) :

- transition 1 qui correspond à une mise au même niveau énergétique du porteur dans les deux sites par activation thermique dans le site A à l'aide de phonons d'énergie  $W = \Delta E$ .
- transition 2 qui correspond à un effet tunnel permettant la mise à niveau des deux sites.
- un couplage électron-phonon efficace pour permettre la réalisation de la première étape: le couplage ne peut s'effectuer au mieux qu'à une fréquence  $\nu_{ph} \approx 10^{12}$  à  $10^{13} \text{ s}^{-1}$ .

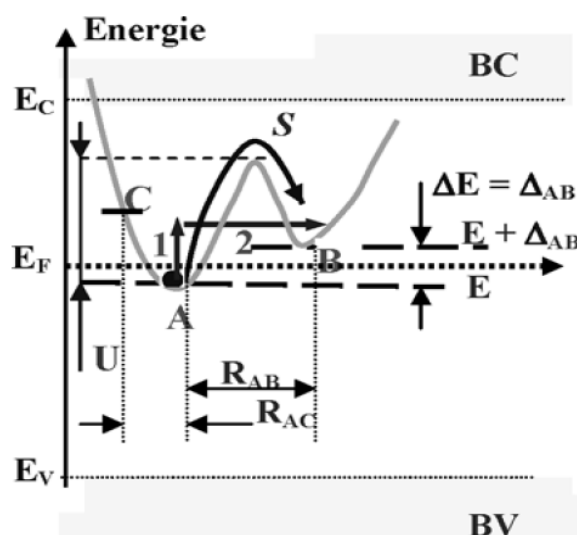


Figure 2.3 : Schématisation des transitions lors de la conduction par sauts entre niveaux localisés au voisinage de  $E_F$ .

### 2.3.3 Conductivité dans le cas du saut au plus proche voisin

La probabilité  $p$  par unité de temps que ce saut s'effectue entre les 2 sites voisins A et B (figure 2.3) est le produit de trois termes correspondants aux trois étapes précédentes :



- le facteur de Boltzmann  $\exp(-\Delta E/kT)$  qui traduit la probabilité de produire la transition 1, c'est-à-dire de générer un phonon d'énergie  $\Delta E$  ;
- un facteur correspondant à la probabilité de transfert d'un électron d'un site à un autre, et qui s'exprime à l'aide du terme de chevauchement de la forme  $\exp(-2\alpha R)$ , des fonctions d'onde localisées,  $R$  représente la distance spatiale des sites et  $\alpha^{-1}$  traduit la longueur de localisation.
- le facteur  $v_{ph}$ .

La probabilité  $p$  est donc :

$$p = v_{ph} \exp\left(-2\alpha R - \frac{\Delta E}{kT}\right) \quad (2.6)$$

Si  $N(E_F)$  représente la densité d'états au niveau de Fermi, et si celle-ci ne varie pratiquement pas sur une largeur  $kT$  autour du niveau  $E_F$ ,  $kT N(E_F)$  représente donc la concentration des porteurs au voisinage de  $E_F$ .

L'évaluation de la mobilité  $\mu$  est effectuée à l'aide de la relation d'Einstein telle que

$$\mu = \frac{qD}{kT}, \text{ avec le coefficient de diffusion } D \approx \frac{pR^2}{6}.$$

La conductivité correspondante est donnée par l'équation suivante [4]:

$$\sigma_H(E_F) = \frac{q^2 R^2}{6} v_{ph} N(E_F) \exp\left(-2\alpha R - \frac{\Delta E}{kT}\right) \quad (2.7)$$

### 2.3.4 Conductivité selon le modèle du saut à distance variable

D'après Mott [3], si la quantité  $kT$  est petite devant  $\Delta E$  (vers les basses températures), la contribution prédominante à la conduction prend chemin autour de  $E_F$ , le porteur de charge ne peut sauter que sur des niveaux énergétiquement proches, même s'ils sont spatialement éloignés : le porteur a ainsi tendance à rechercher systématiquement le niveau vide énergétiquement le plus proche, même si cela se fait a priori au détriment de la distance; cependant, la probabilité de transition liée à l'effet tunnel diminue, si bien que l'on doit en réalité chercher le meilleur compromis qui passe par une optimisation de la distance de saut donnée par la condition :

$$\left[ \frac{dp}{dR} \right] = 0 \quad (2.8)$$

Dans une bande d'énergie de largeur  $\Delta E$  autour du niveau de Fermi, la densité des états est  $N(E_F)$  et la distance de séparation moyenne  $R$  est  $(N(E_F)\Delta E)^{-1/3}$ . La contribution à la conductivité est maximale pour une distance de séparation de la forme :

$$R = \left[ \frac{3}{2\pi\alpha N(E_F)kT} \right]^{1/4} \quad (2.9)$$

La conductivité correspondante au niveau de Fermi  $E_F$  est donnée par la formule suivante :

$$\sigma_H(E_F) = \frac{1}{6} q^2 R^2 v_{ph} N(E_F) \exp\left(-\frac{A}{T^{1/4}}\right) \quad (2.10)$$

Où

$$A = 1.66 \left( \frac{\alpha^3}{kN(E_F)} \right)^{1/4} \quad (2.11)$$

**Références**

- [1]Cohen, M. H., Fritzsche, H., and Ovshinsky, S. R. (1969) *Phys. Rev. Lett.* **22**. 1065.
- [2]Hindley, N. K. (1970) *Non-Cryst. Solids* 5, 17.
- [3]Mott, N. F., and Davis, E. A. (1979) " *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*" Second edition. Clarendon Press. Oxford 1979.
- [4]Street, R. A. (1991) "*Hydrogenated Amorphous Silicon*" Street, R. A. ed. Cambridge University Press.1991.

### 3.1 Introduction

Ce chapitre décrit les notions élémentaires sur la photoconductivité et les modèles les plus référés lorsqu'il s'agit de l'analyse de la technique du photocourant modulé (PCM) dans l'a-Si:H. Cette technique est basée sur des mesures et de l'analyse du photocourant modulé traversant un échantillon polarisé et exposé à une excitation de lumière monochromatique et modulée. Elle s'effectue dans le domaine fréquentiel. Elle permet de déterminer la densité d'états dans le "gap" des semiconducteurs, en faisant varier la fréquence du signal d'excitation et la température de l'échantillon. Cette technique a été réalisée la première fois par Oheda [1]. Toutefois le traitement proposé par Oheda était compliqué. Par la suite, Bruggemann et al.[2] ont proposé une analyse plus simple en incluant la différence de phase et le module du photocourant. L'étude la plus complète du photocourant modulé a été réalisée par C. Longeaud et J.P. Kleider [3]. Dans ce chapitre, nous allons présenter l'étude théorique de PCM effectuée par Longeaud et al [3] et le banc de mesure expérimentale de cette technique ainsi l'illustration de quelques résultats de simulation et expérimentaux pour la détermination de la densité des états dans les semiconducteurs amorphes.

### 3.2 Notions élémentaires sur la photoconductivité

#### 3.2.1 Absorption et recombinaison

L'absorption est un processus du à l'interaction du rayonnement lumineux avec la matière. Lorsque le semiconducteur est éclairé par un flux continu de photons  $F$  d'énergie supérieure au gap du semiconducteur, le taux de génération  $G(x)$  de paires électrons-trous à une profondeur  $x$  de la surface éclairée a pour expression :

$$G(x) = \eta \alpha F(1 - R) \exp(-\alpha x) \quad (3.1)$$

où  $\eta$  représente le rendement quantique pour la génération de paires électron-trou, il est souvent pris égal à l'unité.  $F$  est le flux de photons incidents,  $R$  est le coefficient de réflexion à la surface de l'échantillon et  $\alpha$  est le coefficient d'absorption optique du semiconducteur.

Il ya deux mécanismes de recombinaison : la recombinaison directe et la recombinaison indirecte. Dans la recombinaison directe ou bande à bande, l'électron de la BC tombe directement dans le trou de la bande de valence. La recombinaison indirecte se fait en deux étapes bien séparées dans le temps. Par exemple, un électron

de conduction peut être dans un premier temps capturé par un état dont le niveau est profond dans la bande interdite. Dans un deuxième temps le centre ainsi occupé peut capturer un trou de la BV (ou ce qui revient au même émettre l'électron vers la BV), ce qui finalement assure la recombinaison d'une paire électron-trou.

Schockley et Read [4] ont établi la statistique régissant la recombinaison indirecte par l'intermédiaire d'un piège monovalent à deux états de charges : 0 (vide) et – (occupé) et caractérisé par un niveau énergétique dans le gap. Les quatre transitions possibles mises en jeu dans une recombinaison sur un niveau  $E_t$  et de densité  $N_t$  sont représentées sur la figure 3.1.

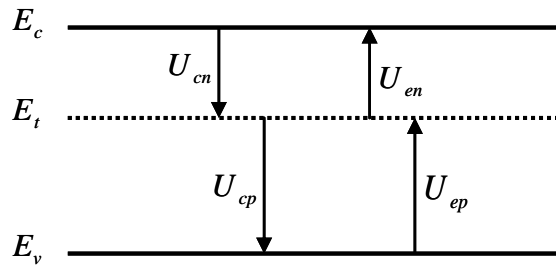


Figure 3.1: Les différentes transitions possibles sur un niveau  $E_t$ .

$U_{cn} = C_n N_t (1 - f_{nt}) n$ : Capture d'électrons

$U_{en} = e_n N_t f_{nt}$ : Emission d'électrons

$U_{cp} = C_p N_t f_{pt} p$ : Capture de trous

$U_{ep} = e_p N_t (1 - f_{pt})$ : Emission de trous

Où  $n$  et  $p$  sont les densités des électrons et des trous libres,  $f_{nt}$  et  $f_{pt}$  sont les probabilités d'occupation du niveau  $E_t$  en électrons et trous respectivement,  $N_t$  est la densité totale des états de  $E_t$ ,  $C_n$  ( $C_p$ ) est le coefficients de capture des électrons (trous) et défini comme le produit de la vitesse thermique  $v$  par la section efficace de capture du centre  $S_n$  ( $S_p$ ), et  $e_n$  ( $e_p$ ), la probabilité d'émission d'un électron (trou) à partir d'un niveau d'énergie  $E_t$ .

Les taux nets de recombinaison pour les électrons et les trous,  $U_n$  et  $U_p$  s'écrivent respectivement

$$U_n = U_{cn} - U_{en} = C_n N_t (1 - f_{nt}) n - e_n N_t f_{nt} \quad (3.2.a)$$

$$U_p = U_{cp} - U_{ep} = C_p N_t f_{nt} p - e_p N_t (1 - f_{nt}) \quad (3.2.b)$$

A l'équilibre thermique  $U_n = U_p = 0$ , ce qui permet la détermination des fréquences d'émission  $e_n$  et  $e_p$  :

$$e_n = C_n n_o \frac{1 - f_{no}}{f_{no}} \quad \text{et} \quad e_p = C_p p_o \frac{f_{no}}{1 - f_{no}} \quad (3.3)$$

avec  $f_{no}$ , la fonction de Fermi-Dirac ( $E_{fo}$  : niveau de Fermi),

$$f_{no} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_t - E_{fo}}{kT}\right)} \quad (3.4)$$

(l'indice o signifie l'équilibre thermique). Si  $f_{no}$  est remplacée par son expression dans  $e_n$  et  $e_p$ , nous obtenons:

$$e_n = C_n n_1 \quad \text{avec} \quad n_1 = N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{kT}\right) \quad (3.5.a)$$

$$e_p = C_p p_1 \quad \text{avec} \quad p_1 = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_t}{kT}\right) \quad (3.5.b)$$

A l'état stationnaire, l'équation de continuité du quasi-équilibre pour le niveau  $E_t$  est:

$$\frac{dn_t}{dt} = N_t \frac{df_{nt}}{dt} = U_{cn} + U_{ep} - U_{cp} - U_{en} = 0$$

Par conséquent, les fonctions d'occupation du niveau  $E_t$  sont:

$$f_{nt} = \frac{C_n n + e_p}{C_n n + e_n + C_p p + e_p} \quad (3.6.a)$$

$$f_{pt} = 1 - f_{nt} = \frac{C_p p + e_n}{C_n n + e_n + C_p p + e_p} \quad (3.6.b)$$

Simmons et Taylor [5] ont défini des quasi-niveaux de Fermi  $E_{fnt}$  et  $E_{fpt}$  associés aux états localisés, en négligeant la probabilité d'émission des trous à partir des niveaux  $E_t > E_{fo}$  et celles des électrons à partir des niveaux  $E_t < E_{fo}$  :

$$E_{fnt} = E_c + kT \ln\left(\frac{C_n n + C_p p}{C_n N_c}\right) \quad (3.7.a)$$

$$E_{fpt} = E_v - kT \ln \left( \frac{C_n n + C_p p}{C_p N_v} \right) \quad (3.7.b)$$

Les densités des porteurs libres  $n$  et  $p$  sont données par les équations suivantes :

$$n = N_c \exp \left( -\frac{E_c - E_{fnt}}{kT} \right) \quad (3.8)$$

$$p = N_v \exp \left( -\frac{E_{fpt} - E_v}{kT} \right) \quad (3.9)$$

### 3.2.2 Conductivité et photoconductivité

La conductivité à l'obscurité d'un semiconducteur est donnée par :

$$\sigma_o = q(\mu_n n_o + \mu_p p_o) \quad (3.10)$$

Où  $q$  est la charge électronique,  $n_o$  et  $p_o$  sont les concentrations des électrons et des trous libres et  $\mu_n$  et  $\mu_p$  sont leurs mobilités respectivement.

La photoconductivité est l'accroissement de la conductivité électrique d'un matériau lorsqu'il est exposé à une excitation optique, la photoconductivité  $\sigma_{ph}$  a pour expression :

$$\sigma_{ph} = q \cdot [\mu_n \cdot (n - n_o) + \mu_p \cdot (p - p_o)] \quad (3.11)$$

### 3.3 Analyse générale du photocourant modulé

Considérons une couche de semiconducteur de configuration coplanaire et uniformément éclairée de telle façon que la concentration des électrons libres  $n$  et la concentration des trous libres  $p$  soient uniformes dans une section  $S$ . L'expression générale du courant  $I$  est donné par [3]:

$$I = Sq\xi (\mu_n n + \mu_p p) \quad (3.12)$$

Avec  $\xi$  le champ électrique appliqué.

Les concentrations  $n$  et  $p$  peuvent être déterminés à partir des équations de base provenant des statistiques de Shockley et Read [4]. Ils ont suppose que les pièges peuvent échanger des électrons et des trous à travers la bande de conduction et la bande de valence respectivement. Simmons et Taylor [5] ont étendu ces statistiques à une distribution des pièges arbitraires.

Les équations de continuité des électrons et des trous sont:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G - \int_{E_v}^{E_c} \bar{n} N(E) [1 - f(E)] dE + \int_{E_v}^{E_c} e_n(E) N(E) f(E) dE \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G - \int_{E_v}^{E_c} \bar{p} N(E) f(E) dE + \int_{E_v}^{E_c} e_p(E) N(E) [1 - f(E)] dE \quad (3.14)$$

$N(E)$  est la densité des états du niveau  $E$ ,  $f(E)$  est la fonction d'occupation en électron du niveau  $E$ ,  $G$  est le taux de génération de porteurs,  $e_n(E)$  ( $e_p(E)$ ) est le taux d'émission des électrons (trous) à partir d'un état de niveau  $E$  vers la bande de conduction (valence);  $\bar{n}$  ( $\bar{p}$ ) est le taux de capture des électrons (trous) qui s'écrivent  $\bar{n} = v_n \sigma_n n = c_n n$  et  $\bar{p} = v_p \sigma_p p = c_p p$ ,  $v_n$  ( $v_p$ ) est la vitesse thermique des électrons (trous),  $\sigma_n$  ( $\sigma_p$ ) est la section de capture des électrons (trous), et  $c_n$  ( $c_p$ ) est le coefficient de capture des électrons (trous).

Dans la suite, on supposera seulement un seul type de pièges (densité des états monovalents) caractérisé par des coefficients de capture  $c_n$  et  $c_p$  indépendants de l'énergie. D'après les statistiques de Shockley-Read, la fonction d'occupation  $f(E)$  est donnée par:

$$\frac{\partial f(E)}{\partial t} = \bar{n} + e_p(E) - f(E) [\bar{n} + \bar{p} + e_n(E) + e_p(E)] \quad (3.15)$$

Dans la technique du photocourant modulé, la lumière d'excitation est une fonction périodique du temps, deux types de contributions doivent donc être pris en compte: la première donnant lieu à un courant continu (dc) qui correspond à la contribution moyenne de l'excitation à la création des porteurs et la deuxième provenant de la partie alternative (ac). Les paramètres  $n$ ,  $p$ ,  $\bar{n}$ ,  $\bar{p}$ ,  $G$  et  $f$  peuvent alors s'exprimer selon



deux composantes: une composante continue qui sera indexée dc, et une composante alternative indexée ac. Par exemple,  $n$  pourra s'écrire sous la forme  $n = n_{dc} + n_{ac} \exp(j\omega t)$  où  $\omega$  est la pulsation de l'excitation,  $j$  est le nombre complexe tel que  $j^2 = -1$ . Quand on prévoit un déphasage entre l'excitation de la lumière et le courant résultant,  $n_{ac}$  est une grandeur complexe que l'on peut écrire  $n_{ac} = |n_{ac}| \exp(j\phi_n)$ ,  $\phi_n$  étant le déphasage par rapport à la partie alternative de l'excitation. En prenant en compte de deux composantes dc et ac, les équations (3.13) et (3.14) ont alors les expressions suivantes:

$$0 = G_{dc} - \int_{E_v}^{E_c} \bar{n}_{dc} N(E) [1 - f_{dc}(E)] dE + \int_{E_v}^{E_c} e_n(E) N(E) f_{dc}(E) dE \quad (3.16)$$

$$0 = G_{dc} - \int_{E_v}^{E_c} \bar{p}_{dc} N(E) f_{dc}(E) dE + \int_{E_v}^{E_c} e_p(E) N(E) [1 - f_{dc}(E)] dE \quad (3.17)$$

Pour la partie continue, et

$$j\omega n_{ac} = G_{ac} + \int_{E_v}^{E_c} [\bar{n}_{dc} + e_n(E)] f_{ac}(E) - \bar{n}_{ac} [1 - f_{dc}(E)] N(E) dE \quad (3.18)$$

$$j\omega p_{ac} = G_{ac} - \int_{E_v}^{E_c} [\bar{p}_{dc} + e_p(E)] f_{ac}(E) + \bar{p}_{ac} f_{dc}(E) N(E) dE \quad (3.19)$$

Pour la partie alternative.

De même pour la fonction d'occupation:

$$f_{dc}(E) = \frac{\bar{n}_{dc} + e_p(E)}{\bar{n}_{dc} + \bar{p}_{dc} + e_n(E) + e_p(E)} \quad (3.20)$$

$$f_{ac}(E) = \frac{\bar{n}_{ac} [1 - f_{dc}(E)] - \bar{p}_{ac} f_{dc}(E)}{j\omega + 1/\tau} \quad (3.21)$$

Avec

$$\frac{1}{\tau} = \bar{n}_{dc} + \bar{p}_{dc} + e_n(E) + e_p(E) \quad (3.22)$$

Dans ces équations,  $\bar{n}_{dc} = c_n n_{dc}$ ,  $\bar{p}_{dc} = c_p p_{dc}$ ,  $\bar{n}_{ac} = c_n n_{ac}$ ,  $\bar{p}_{ac} = c_p p_{ac}$ . Pour une densité d'états donnée; des sections efficaces de capture données et des mobilités des porteurs libres données, on peut calculer la composante alternative du photocourant si l'on connaît  $n_{ac}$  et  $p_{ac}$ . Ces quantités sont obtenues à partir des équations (3.18) et (3.19). La résolution de ces deux équations n'est possible que si les grandeurs  $n_{dc}$  et  $p_{dc}$  sont connues, de même que pour la fonction  $f_{dc}$  à partir des équations (3.16), (3.17) et (3.20) permettent de remonter à ces résultats en tenant compte de la neutralité de charges. Dans le cas des semiconducteurs amorphes pour lesquels les porteurs libres en excès sont nettement moins nombreux que les porteurs piégés (de plusieurs ordres de grandeur), et en supposant que les sections efficaces de capture sont indépendantes de l'énergie, l'équation de la neutralité de charges s'écrit:

$$\bar{n}_{dc} \int_{E_f}^{E_m} N(E) dE = \bar{p}_{dc} \int_{E_{tp}}^{E_f} N(E) dE \quad (3.23)$$

Où  $E_f$  est le niveau de Fermi à l'équilibre thermique, et  $E_m$  et  $E_{tp}$  sont les quasi-niveaux de Fermi pour les électrons et les trous piégés à l'état stationnaire. Le calcul de  $n_{dc}$ ,  $p_{dc}$  et  $f_{dc}$  permet de déterminer la photoconductivité à l'état stationnaire d'après l'équation suivante :

$$\sigma_{ph} = q(\mu_n n_{dc} + \mu_p p_{dc}) \quad (3.24)$$

Dans la suite nous allons déterminer l'expression du photocourant modulé à partir de la résolution des équations (3.18) et (3.19).

### 3.3.1 Expressions du déphasage et du module du photocourant modulé

En remplaçant l'expression de  $f_{ac}(E)$  (Eq(3.21)) dans les expressions (3.18) et (3.19) et en écrivant  $n_{ac} = n_r + jn_i$  et  $p_{ac} = p_r + jp_i$ , les indices  $r$  et  $i$  désignant respectivement les parties réelles et imaginaires, on obtient alors un système linéaire de quatre équations:

$$\begin{aligned}
A_n n_i + A_p p_i + B_n n_r - B_p p_r &= 0 \\
B_n n_i - B_p p_i - A_n n_r - A_p p_r &= -G_{ac} \\
A_n^* n_i + A_p^* p_i - B_n^* n_r + B_p^* p_r &= 0 \\
-B_n^* n_i + B_p^* p_i - A_n^* n_r - A_p^* p_r &= -G_{ac}
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Avec les coefficients:

$$A_n = c_n \int_{E_v}^{E_c} \left[ 1 - \frac{\bar{n}_{dc} + e_n(E)}{1/\tau(E) + \tau(E)\omega^2} \right] [1 - f_{dc}(E)] N(E) dE \tag{3.26}$$

$$A_p = c_p \int_{E_v}^{E_c} \left[ \frac{\bar{n}_{dc} + e_n(E)}{1/\tau(E) + \tau(E)\omega^2} \right] f_{dc}(E) N(E) dE \tag{3.27}$$

$$B_n = c_n \omega \int_{E_v}^{E_c} \left[ \frac{\bar{n}_{dc} + e_n(E)}{1/\tau^2(E) + \omega^2} \right] [1 - f_{dc}(E)] N(E) dE + \omega \tag{3.28}$$

$$B_p = c_p \omega \int_{E_v}^{E_c} \left[ \frac{\bar{n}_{dc} + e_n(E)}{1/\tau^2(E) + \omega^2} \right] f_{dc}(E) N(E) dE \tag{3.29}$$

$$A_n^* = c_n \int_{E_v}^{E_c} \left[ \frac{\bar{p}_{dc} + e_p(E)}{1/\tau(E) + \tau(E)\omega^2} \right] [1 - f_{dc}(E)] N(E) dE \tag{3.30}$$

$$A_p^* = c_p \int_{E_v}^{E_c} \left[ 1 - \frac{\bar{p}_{dc} + e_p(E)}{1/\tau(E) + \tau(E)\omega^2} \right] f_{dc}(E) N(E) dE \tag{3.31}$$

$$B_n^* = c_n \omega \int_{E_v}^{E_c} \left[ \frac{\bar{p}_{dc} + e_p(E)}{1/\tau^2(E) + \omega^2} \right] [1 - f_{dc}(E)] N(E) dE \tag{3.32}$$

$$B_p^* = c_p \omega \int_{E_v}^{E_c} \left[ \frac{\bar{p}_{dc} + e_p(E)}{1/\tau^2(E) + \omega^2} \right] f_{dc}(E) N(E) dE + \omega \tag{3.33}$$

Lorsque le système donné par l'équation (3.25) est résolu pour  $n_r, n_i, p_r$  et  $p_i$ , la partie alternative du photocourant est alors déterminée et ayant pour expression:

$$I_{ac} = Sq\xi \left[ \mu_n n_r + \mu_p p_r + j(\mu_n n_i + \mu_p p_i) \right] \tag{3.34}$$

Que l'on peut aussi écrire sous la forme

$$I_{ac} = |I_{ac}| \exp(-j\phi) \tag{3.35}$$

avec le module  $|I_{ac}|$ :

$$|I_{ac}| = Sq\xi \left[ (\mu_n n_r + \mu_p p_r)^2 + (\mu_n n_i + \mu_p p_i)^2 \right]^{1/2} \quad (3.36)$$

Le déphasage  $\phi$  entre le photocourant modulé et l'excitation de la lumière est donné par :

$$\tan(\phi) = -\frac{\mu_n n_i + \mu_p p_i}{\mu_n n_r + \mu_p p_r} \quad (3.37)$$

Les coefficients  $A_n, A_p, A_n^*, A_p^*, B_n, B_p, B_n^*$  et  $B_p^*$ , puis  $\phi$  et  $|I_{ac}|$  peuvent être calculés numériquement pour une densité d'états donnée, des sections efficaces de capture et des mobilités dans les états étendus données aussi.

Notons que les deux niveaux d'énergie  $E_{on}$  et  $E_{op}$  pour lesquels

$$e_n(E_{on}) = e_p(E_{op}) = \omega \quad (3.38)$$

Jouent un rôle important dans la technique du photocourant modulé. En effet, selon la position de ces deux niveaux d'énergie par rapport aux quasi-niveaux de Fermi des porteurs piégés  $E_{tp}$  et  $E_{tm}$  qui correspondent aux limites des énergies pour les centres de recombinaison définis par  $e_n(E_m) = e_p(E_{tp}) = \bar{n}_{dc} + \bar{p}_{dc}$ , deux cas peuvent être considérés : (i)  $\omega \gg \bar{n}_{dc} + \bar{p}_{dc}$ , où le photocourant modulé est contrôlé par les processus de capture et émission (régime de hautes fréquences (HF)), (ii)  $\omega \ll \bar{n}_{dc} + \bar{p}_{dc}$ , pour lequel le photocourant modulé est contrôlé par le processus de recombinaison (régime de basses fréquences (BF)).

### 3.3.2 Détermination de la densité des états $N(E)$

**Cas (i) ( $\omega \gg \bar{n}_{dc} + \bar{p}_{dc}$ )**

Compte tenu de la forme de  $f_{dc}(E)$ , quelques coefficients de l'eq(13) sont négligeables par rapport à d'autres. Les coefficients dominant sont  $A_n, A_p^*, B_n, B_n^*$  et le système donné par les quatre équations (3.25) se décompose en deux autres systèmes de deux équations :

$$\begin{aligned} A_n n_i + B_n n_r &= 0, \\ B_n n_i - A_n n_r &= -G_{ac}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

et

$$\begin{aligned} A_p^* p_i + B_p^* p_r &= 0, \\ B_p^* p_i - A_p^* p_r &= -G_{ac} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Si on définit deux quantités  $N_n$  and  $D_n$  par:

$$N_n = \frac{B_n \mu_n}{A_n^2 + B_n^2}, \quad (3.41)$$

$$D_n = \frac{A_n \mu_n}{A_n^2 + B_n^2}, \quad (3.42)$$

Et  $N_p$  et  $D_p$  par les mêmes relations utilisant  $A_p^*, B_p^*$ , et  $\mu_p$  à la place de  $A_n, B_n$ , et  $\mu_n$  respectivement, le déphasage et le module du photocourant sont obtenus à partir de:

$$\tan(\phi) = \frac{N_n + N_p}{D_n + D_p}, \quad (3.43)$$

et

$$|I_{ac}| = G_{ac} S q \xi \sqrt{(N_n + N_p)^2 + (D_n + D_p)^2} \quad (3.44)$$

Si les inégalités suivantes sont satisfaites

$$N_n \gg N_p \quad (3.45.a)$$

$$D_n \gg D_p \quad (3.45.b)$$

Les expressions (3.39) et (3.40) se simplifient et ce cas correspond à un comportement contrôlé par les électrons:

$$\tan \phi \approx \frac{B_n}{A_n} \quad (3.46)$$

et

$$|I_{ac}| \approx \frac{G_{ac} q S \xi \mu_n}{\sqrt{A_n^2 + B_n^2}} \quad (3.47)$$

Ces deux expressions sont similaires à celles trouvées par Oheda[1]. Bruggemann et al [2] ont montré que l'expression de  $B_n$  peut s'écrire :

$$B_n = \omega + c_n \int_{E_m}^{E_c} G_n(E) dE \quad (3.48)$$

tel que

$$G_n(E) = \frac{\omega e_n(E)}{e_n^2(E) + \omega^2} \quad (3.49)$$

La fonction  $G_n(E)$  peut être approximée par une fonction de Dirac donc l'expression de  $B_n$  est comme suit :

$$B_n = \omega + \frac{\pi}{2} c_n kTN(E_{on}) \quad (3.50)$$

En utilisant  $\sin \phi = \frac{B_n}{\sqrt{A_n^2 + B_n^2}}$  et en remplaçant l'équation (3.50) dans

l'équation(3.47), la densité d'états s'écrit :

$$N(E_{on}) = \frac{2N(E_c)}{\pi v_n} \left( \frac{Sq\mu_n \xi G_{ac} \sin \phi}{|I_{ac}|} - \omega \right) \quad (3.51)$$

avec  $E_{on}$  défini de l'équation (3.38) par:

$$E_c - E_{on} = kT \ln \left( \frac{v_n}{\omega} \right) \quad (3.52)$$

Lorsque  $N_p \gg N_n$  et  $D_p \gg D_n$ , ce cas correspond à un comportement contrôlé par les trous, la densité des états s'écrit :

$$N(E_{op}) = \frac{2N(E_v)}{v_p} \left( \frac{Sq\mu_p \xi G_{ac} \sin \phi}{|I_{ac}|} - \omega \right) \quad (3.53)$$

avec  $E_{op}$  défini à partir de l'équation (3.38) comme suit:

$$E_{op} - E_v = kT \ln \left( \frac{v_p}{\omega} \right) \quad (3.54)$$

Le terme  $\omega$  est généralement négligeable dans les équations (3.51) et (3.52), ce qui conduit à écrire :

$$\frac{c_n N(E_{on})}{\mu_n} = \frac{2}{\pi kT} S q \xi G_{ac} \frac{\sin(\phi)}{|I_{ac}|} \quad (3.55)$$

$$\frac{c_p N(E_{op})}{\mu_p} = \frac{2}{\pi kT} S q \xi G_{ac} \frac{\sin(\phi)}{|I_{ac}|} \quad (3.56)$$

**Cas (ii)** ( $\omega \ll \bar{n}_{dc} + \bar{p}_{dc}$ )

Le photocourant est dominé par des phénomènes de recombinaison. Le temps caractéristique ( $1/(\bar{n}_{dc} + \bar{p}_{dc})$ ), qui correspond à  $\tau(E)$  pour les états dont l'énergie  $E$  se situe entre les deux quasi-niveaux de Fermi  $E_p$  et  $E_m$ , est alors beaucoup plus petit que la période du signal modulé. Etudier le régime en basses fréquences de la technique PCM revient à considérer  $\omega \ll \bar{n}_{dc} + \bar{p}_{dc}$ , ce qui implique  $\omega\tau(E) < 1$  quelle que soit l'énergie  $E$ . Lorsque l'expérience de PCM est réalisée à très basses fréquences,  $\omega\tau(E) \ll 1$ , et une expression approchée peut être obtenue pour chaque coefficient  $A_n, A_p, A_n^*, A_p^*, B_n, B_p, B_n^*$  et  $B_p^*$ , puis  $\tan(\phi)$ . Pour ce faire, on effectue un développement limité de Taylor en  $\omega\tau(E)$ , le déphasage  $\phi$  du photocourant par rapport à la lumière d'excitation est nul. Le traitement de ce cas montre qu'on ne peut plus évaluer correctement la densité d'états dans ce régime.

La figure 3.2 [6] montre les résultats de simulation de PCM dans un semiconducteur amorphe a-Si:H. Le modèle de la densité d'états est composée par des QBC et QBV de formes exponentielles de températures caractéristiques  $T_c=280$  K et  $T_v=600$  K respectivement, et deux gaussiennes centrées à 0.55 eV et 1.25 eV au dessus de  $E_v$ . Les données de PCM sont simulées pour un flux de lumière  $F=10^{13}$  cm<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup> et dans une gamme de température entre 120 et 450 K avec un pas de 30 K. Les fréquences varient entre 12 Hz et 40 kHz.

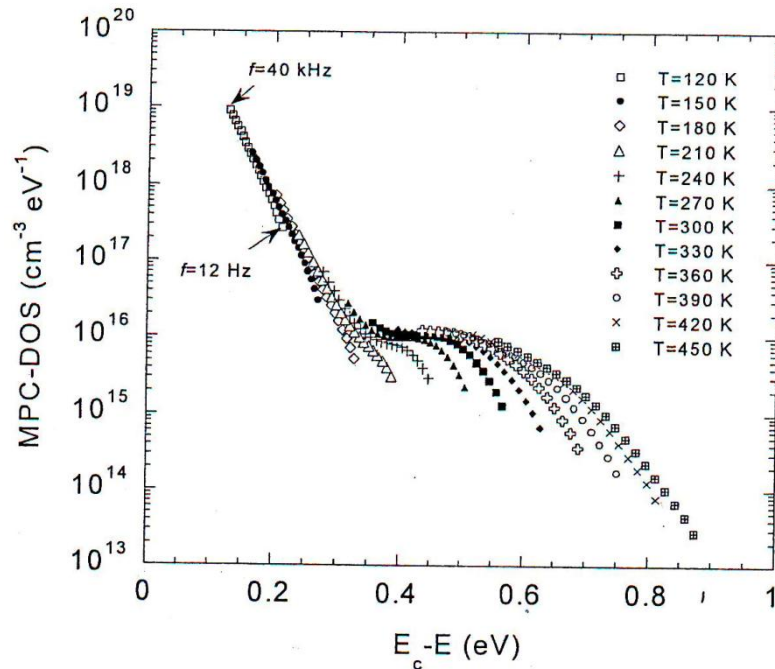


Figure 3.2 : Reconstruction de la densité des états  $N(E)$  à partir de la simulation de PCM en régime HF. Les différents symboles correspondent à la densité des états à une température donnée. Le point le plus bas de chaque courbe est calculé à la fréquence la plus basse comme c'est indiqué pour la courbe correspondant à  $T=120$  K.

La figure 3.3 [6] montre la densité des états introduite dans la simulation (trait plein) et les courbes calculées par la simulation de PCM à différentes températures allant de 120 K jusqu'à 450 K (ces courbes sont les mêmes que celles représentées sur la figure 3.2). L'allure de la densité des états reconstruite par PCM est donnée par l'enveloppe supérieure correspondant aux points calculés aux plus hautes fréquences pour chaque température.



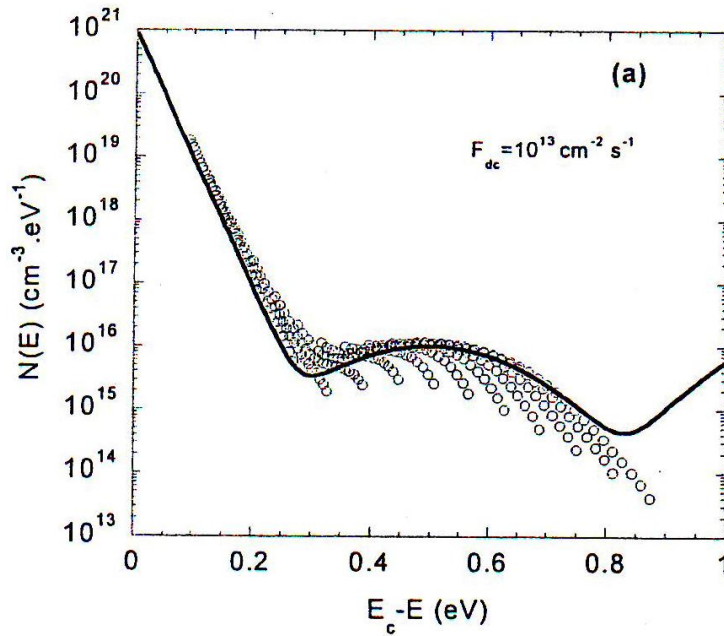


Figure 3.3 : Densité des états introduite (trait plein) et courbes obtenues par simulation de PCM pour différentes températures (la gamme de températures et la gamme de fréquences sont les mêmes que celles indiquées sur Figure 3.2).

### 3.4 Montage expérimental de la technique du photocourant modulé

La figure 3.4 représente le diagramme du banc de mesure de PCM [6]. L'échantillon est placé sur un porte-échantillon chauffé, le tout est placé dans un cryostat sous vide assuré par une pompe qui peut pousser le vide jusqu'à  $10^{-4}$  torr. Le système est équipé par deux sources, l'une constituée par une résistance assurant l'échauffement de l'échantillon et l'autre de l'azote liquide garantissant le refroidissement de l'échantillon. A ce dernier est reliée une sonde qui permet la mesure de sa température. Celle-ci peut être variée dans la gamme de 93 K jusqu'à 450 K par pas de 20 K par l'intermédiaire d'un programme d'acquisition. L'échantillon est polarisé par application d'une tension entre ses deux électrodes. Il est éclairé par une lumière monochromatique d'amplitude modulée provenant d'une diode électroluminescente (DEL) polarisée avec un générateur de fonctions. Le générateur de fonctions assure une polarisation continue et sinusoïdale de la forme  $v = v_{dc} + v_{ac} \cos(\omega t)$ . La gamme de fréquences de modulation est comprise entre 12 Hz et 40 kHz en progression géométrique :  $f_n = f_0 (1.5)^n$ . Le flux de photons reçus par l'échantillon est composé d'un

flux continu et d'un flux alternatif de petite amplitude pour travailler en régime de petits signaux, le flux total  $F = F_{dc} + F_{ac} e^{j\omega t}$ .

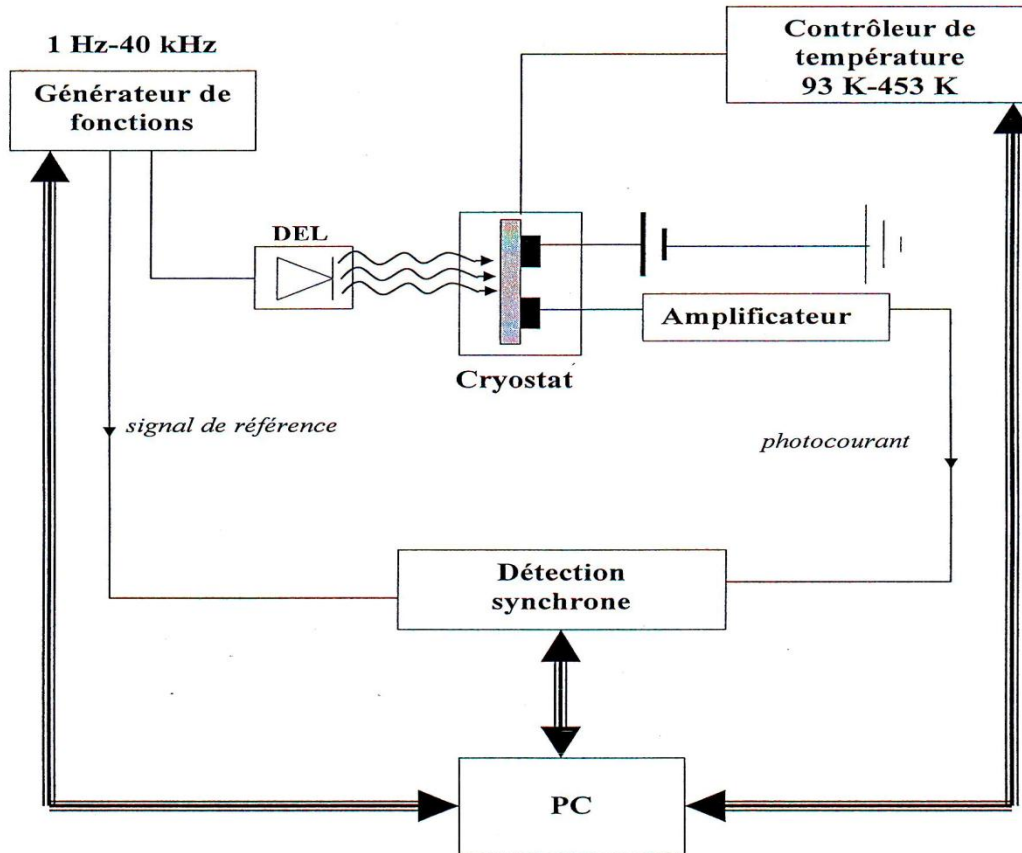


Figure 3.4 : Schéma de montage de la technique de PCM.

Le flux  $F_{dc}$  est compris entre  $10^{12} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  et  $10^{15} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  et  $F_{ac}$  entre  $4.10^{11} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  et  $4.10^{14} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ . Le courant  $i$  qui provient de l'échantillon est aussi formé par deux composantes, une est continue et l'autre est sinusoïdale:  $i = I_{dc} + i_{ac} e^{j\omega t}$ . Il est amplifié par un amplificateur de courant-tension faible bruit avec un gain de  $10^7 \text{ V/A}$ . Le signal mesuré est donc une tension avec une composante continue et une composante alternative:  $v = v_{dc} + v_{ac} e^{j\omega t}$ . La partie alternative est analysée avec une détection synchrone de sorte que de très faibles signaux peuvent être mesurés même s'ils sont noyés dans le bruit. La détection synchrone permet de séparer la partie alternative  $v_{ac} = |v_{ac}| e^{j\phi}$ , en une partie en phase ( $v_1$ ) et une partie en quadrature de phase ( $v_2$ ) par

rapport au signal de référence fourni par le générateur de fonctions qui polarise la DEL :

$$\begin{aligned} v_1 &= |v_{ac}| \cos(\phi) \\ v_2 &= |v_{ac}| \sin(\phi) \end{aligned} \quad (3.57)$$

L'amplitude et la phase sont données par :

$$\begin{aligned} |v_c| &= \sqrt{v_1^2 + v_2^2} \\ \phi &= \arctan\left(\frac{v_2}{v_1}\right) \end{aligned} \quad (3.58)$$

L'ensemble des acquisitions est automatique et l'expérience est gérée par un micro ordinateur.

Un exemple illustrant la détermination de la densité des états à partir des valeurs expérimentales de PCM mesurées sur un échantillon en silicium polymorphe hydrogéné (pm-Si :H) est représenté sur la figure 3.5 [7]. L'allure de la densité des états est donnée par l'enveloppe des courbes obtenues à différentes températures, correspondant aux points calculés à hautes fréquences.

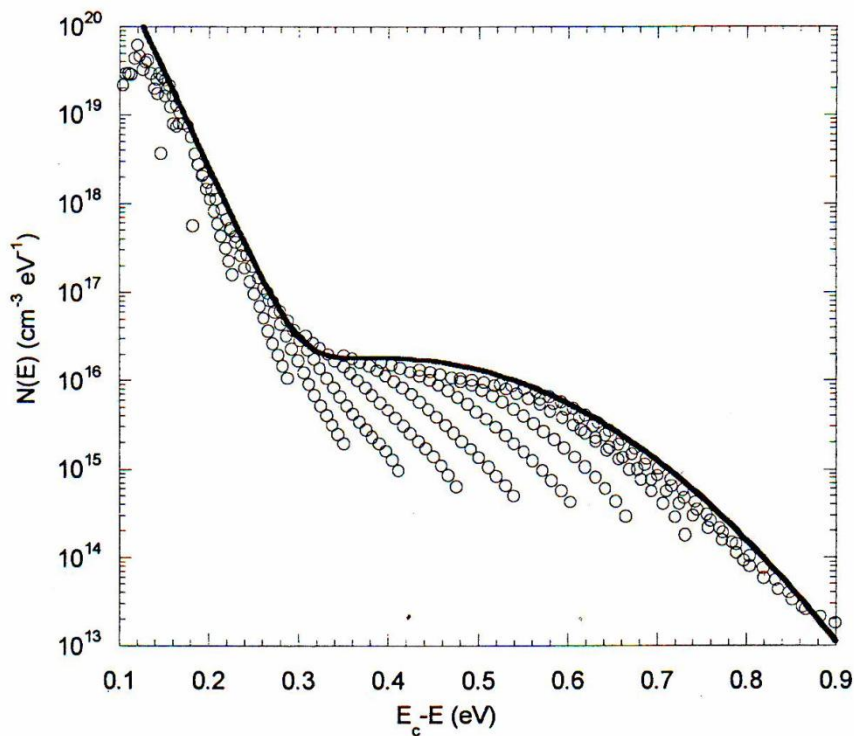


Figure 3.5 : Exemple de densité des états dans un échantillon en pm-Si:H.

**Références**

- [1] Oheda, H. (1981) *J. Appl. Phys.* **52** 6693.
- [2] Brüggemann, R., Main C., Berkin, J., and Reynolds, S.(1990) *Phil. Mag.* B **62** 29.
- [3] Longeaud, C., and Kleider, J .P. (1992) *Phys. Rev. B* **45** 11672.
- [4] Shockley, W., and Read, Jr. W. T. (1952) *Phys. Rev.* **87**. 835.
- [5] Simmons, J. G., and Taylor, G. W. (1971) *Phys. Rev. B* **4**. 502.
- [6] Gueunier, M. E. (2003) " *Alliages silicium-germanium polymorphes en couches minces pour applications photovoltaïques*", Thèse de Doctorat en Sciences, Université Paris XI, Orsay.
- [7] Saadane, O. (2003) " *Etude du silicium polymorphe hydrogéné en couches minces pour applications photovoltaïques*", Thèse de Doctorat en Sciences, Université Paris XI, Orsay.

### 4.1 Introduction

Ce chapitre décrit les modèles de transport par piégeage multiple ("Multitrapping") et par saut ("Hopping") ainsi que la modélisation de la technique de la photoconductivité modulée. Nous allons décrire le modèle physique pour la simulation de la photoconductivité modulée pour le transport de charges par piégeage multiple et par saut. Ce modèle s'applique aussi bien aux semiconducteurs cristallins et amorphes, nous nous intéressons surtout au a-Si:H. Le modèle physique est formé par le modèle de la densité des états du a-Si:H et les équations de continuité pour le régime modulé (alternatif). Le modèle que nous proposons pour le calcul de la PCM est formé par des équations non linéaires qui n'admettent pas de solution analytique. Leur résolution nécessite des méthodes numériques itératives, la procédure de la résolution numérique par des calculs répétitifs sera aussi traitée dans ce chapitre.

### 4.2 Processus de piégeage multiple

Le mécanisme du transport par piégeage multiple peut être illustré par Fig 4.1. Elle montre d'une façon simple le parcours d'un électron dans les états étendus, l'électron est capturé et libéré plusieurs fois par les états pièges du gap avant qu'il ne se recombine. Le transport de charge s'effectue dans la bande des états étendus sous

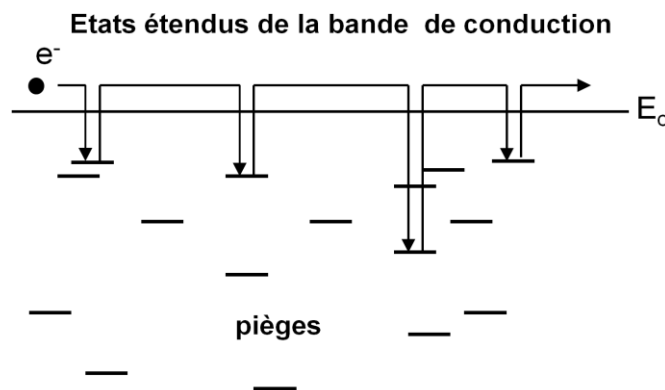


Figure 4.1 : Mécanisme de conduction par piégeage multiple.

l'influence du champ électrique. Le modèle du transport par piégeage multiple et la méthode de simulation ont été décrits par Main et al.[1]. Dans cette méthode, on

prend une distribution particulière de la densité des états qu'on procède à sa division en un nombre de niveaux discrets plus les bandes de conduction et de valence.

L'équation du taux de piégeage multiple des électrons libres dans la bande de conduction est donné par :

$$\frac{dn}{dt} = -\sum_i n C_{ni} N_{ii} + \sum_i \bar{n}_i C_{ni} n_{ii} \quad (4.1)$$

Où la première somme représente le terme de capture des électrons de la bande de conduction par la distribution des états localisés du gap, et la deuxième somme exprime le terme d'émission des électrons à partir des états localisés du gap vers la bande de conduction.  $N_{ii}$  est la densité des états localisés vide d'un niveau d'énergie  $i$ ,  $C_{ni}$  est le coefficient de capture,  $n_{ii}$  est la densité des états remplie par les électrons d'un niveau d'énergie  $i$  et  $\bar{n}_i C_{ni}$  le taux d'émission des électrons de ce même niveau d'énergie.

Le taux de variation de la densité des électrons piégés du niveau d'énergie  $i$  est donné par :

$$\frac{dn_{ii}}{dt} = n C_{ni} N_{ii} - \bar{n}_i C_{ni} n_{ii} \quad (4.2)$$

Des équations similaires à (4.1) et (4.2) peuvent être écrites pour les trous.

### 4.3 Processus de saut

Dans le modèle de conduction par saut, le transport se fait entre les états localisés. On peut définir une fréquence (ou taux) de saut  $\Gamma_{i,j}$ , qui représente le nombre de sauts d'électrons effectués par seconde du site  $i$  vers le site  $j$  (voir Fig 4.2).  $R_{i,j}$  est la distance entre les deux états  $i$  et  $j$ . La théorie du mécanisme de saut dans les semiconducteurs amorphes est juste appliquée aux plus proches voisins pour un état donné [2]. C'est-à-dire le processus de saut d'un électron vers son plus proche voisin s'effectue par effet tunnel entre un état initial autour d'un niveau  $E_i$  et d'un état cible de niveau  $E_j$ .

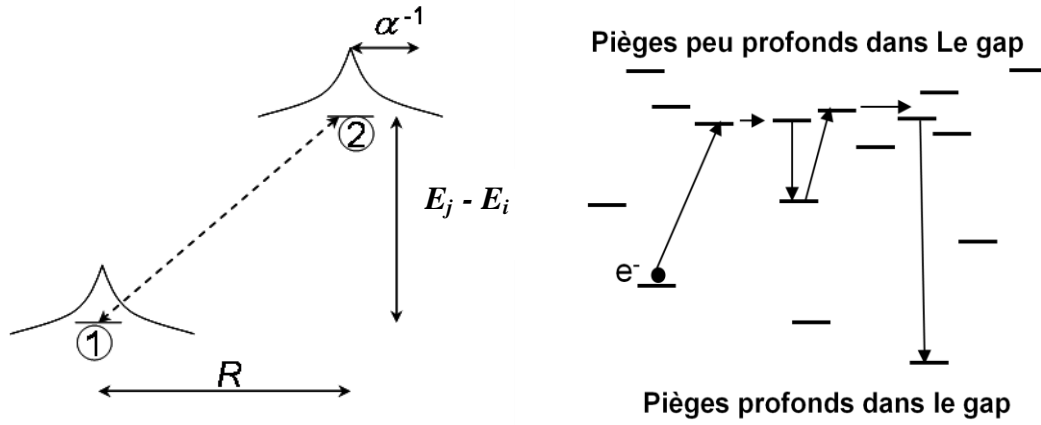


Figure 4.2 : Mécanisme de conduction par saut.

Le terme  $\Gamma_{i,j}$  qui représente le taux de saut entre deux états d'énergies  $E_i$  et  $E_j$  à distance  $R_{i,j}$  est décrit par l'expression de Miller et Abraham [3]:

$$\Gamma_{i,j} = v_0 \exp\left(-\frac{2 R_{i,j}}{a}\right) \times \begin{cases} \exp\left(-\frac{E_j - E_i}{kT}\right) & \text{saut vers le haut pour } E_j > E_i \\ 1 & \text{saut vers le bas pour } E_j \leq E_i \end{cases} \quad (4.3)$$

Où  $v_0$  est la fréquence de saut ("attempt to hop frequency") et  $a$ , la longueur de localisation. La distance  $R_{i,j}$  correspondante au saut vers le bas d'un électron situé au niveau  $E_i$  vers un niveau inférieur et voisin  $E_j$  tel que  $E_j \leq E_i$ , a pour expression [4] :

$$R_{i,j} = \left\{ (4\pi/3) \int_{E_v}^{E_i} g(E) dE \right\}^{-1/3} \quad (4.4)$$

De même, la distance  $R_{i,j}$  de saut vers le haut d'un électron se trouvant au niveau  $E_i$  vers un niveau supérieur et voisin  $E_j$  pour  $E_j > E_i$ , est définie par :

$$R_{i,j} = \left\{ (4\pi/3) \int_{E_v}^{E_j} g(E) dE \right\}^{-1/3} \quad (4.5)$$

L'équation du taux de saut des électrons dans les états localisés de niveau d'énergie  $i$  est donné par [5] :

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_j n_j \Gamma_{j,i} - n_i \sum_j \Gamma_{i,j} \quad (4.6)$$

La première somme de cette équation décrit le saut à partir d'autres niveaux d'énergie du gap vers le niveau  $i$  et la deuxième somme exprime le saut à partir du niveau  $i$  vers d'autres niveaux d'énergie du gap.

#### 4.4 Modélisation numérique de la photoconductivité modulée

##### 4.4.1 Equations du modèle

Avant de décrire les équations permettant le calcul de la photoconductivité modulée, nous commençons par considérer que le semiconducteur est un système formé par  $N$  niveaux d'énergie  $E_i$  ( $i=1, \dots, N$ ) discrets et très proches les uns des autres (voir Fig 4.3).  $N$  est le nombre total des niveaux d'énergies (y compris  $E_c$  et  $E_v$ ). A chaque niveau d'énergie  $E_i$ , on lui associe une densité d'états  $N_i$  et une concentration en électrons capturés  $n_i$  ( $i=2 : N-1$ ).  $i=1$  et  $i=2$  sont attribués respectivement aux concentrations des électrons libres  $n$  et des trous libres  $p$ . La figure 4.3 représente la densité des états dans le a-Si:H avec la discrétisation uniforme du gap. Les flèches

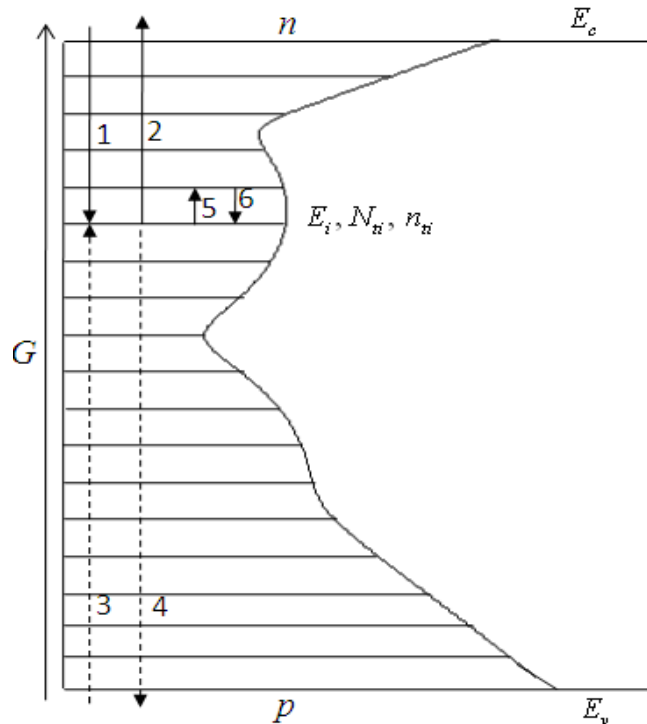


Figure 4.3 Discrétisation de la densité des états dans le a-Si:H avec les transitions possibles des porteurs.



représentent les transitions possibles de capture et d'émission des porteurs ainsi que les transitions de saut des porteurs dans le gap et  $G$  est le taux de génération. Les transitions (1) et (3) correspondent à la capture des électrons et des trous par les états localisés, les transitions (2) et (4) expriment l'émission des électrons et des trous piégés par les états localisés, la transition (5) décrit le saut des électrons vers un niveau d'énergie supérieur à  $E_i$  et la transition (6) représente le saut des électrons de niveau d'énergie supérieur vers un niveau inférieur  $E_i$ .

Les équations décrivant le phototransport dans le silicium amorphe hydrogéné sont les équations de continuité exprimant les taux de variation en fonction du temps des concentrations des électrons libres  $\frac{dn}{dt}$ , des trous libres  $\frac{dp}{dt}$  ainsi que celles correspondantes aux électrons piégés  $\frac{dn_i}{dt}$  dans les différents niveaux d'énergie  $E_i$  du gap. Les équations de continuité sont exprimées en fonction des taux de capture et d'émission ainsi que les taux correspondants au saut des électrons dans le gap. Les équations de continuité s'écrivent comme suit :

$$\frac{dn}{dt} = G - C_n n \left( \sum_i (N_{ii} - n_{ii}) \right) + C_n \sum_i n_i n_{ii} \quad (4.7.a)$$

$$\frac{dn_i}{dt} = \underbrace{C_n n (N_{ii} - n_{ii}) - C_n n_i n_{ii} - C_p p n_{ii} + C_p p_{li} (N_{ii} - n_{ii})}_{(1)} + \underbrace{\left( \frac{N_{ii}}{G_T} \right) \sum_j n_j \Gamma_{i,j}}_{(2)} - \underbrace{n_i \sum_j \frac{N_{ij}}{G_T} \Gamma_{i,j}}_{(3)} \quad (4.7.b)$$

$$\frac{dp}{dt} = G - C_p p \left( \sum_i n_{ii} \right) + C_p \sum_i p_{li} (N_{ii} - n_{ii}) \quad (4.7.c)$$

L'équation (4.7.b) décrit : (1) le processus de "multitrapping" correspondant aux transitions de capture et d'émission des porteurs par les états localisés du gap, (2) le taux de transition qui décrit le processus de saut d'un électron vers le niveau  $i$  et provenant de tous les niveaux voisins  $j$  et (3) le taux de transition de retour d'un électron du niveau  $i$  vers tous les niveaux voisins  $j$ .

Les deux termes  $\left(\frac{N_{ii}}{G_T}\right)$  et  $\left(\frac{N_{ij}}{G_T}\right)$  de l'équation (4.7.b) sont des facteurs de poids statistiques de la probabilité de saut entre deux niveaux  $E_i$  et  $E_j$  dans un volume donné, les termes (1) et (2) contiennent des sommations pour tous  $j$  ( $j = i$  est inclus). L'excitation lumineuse étant périodique, on distingue les termes permanents des termes variant dans le temps tels que :  $G = G_{dc} + G_{ac} \exp(j\omega t)$ ,  $n = n_{dc} + n_{ac} \exp(j\omega t)$   $p = p_{dc} + p_{ac} \exp(j\omega t)$  et  $n_{ii} = n_{ii}^{dc} + n_{ii}^{ac} \exp(j\omega t)$

Où  $\omega$  représente la pulsation de la lumière, l'indice dc indique la composante continue (état stationnaire) et ac représente la composante alternative.

Nous pouvons introduire ces termes dans le système d'équations (4.7) et regrouper ceux du même ordre ( $(\exp j\omega t)^m$  avec  $m = 0, 1$  les termes dc et ac respectivement).

Les termes d'ordre 2 sont négligés. Après regroupement des termes d'ordre 0, nous trouvons:

$$G_{dc} - C_n n_{dc} \left( \sum_i (N_{ii} - n_{ii}^{dc}) \right) + C_n \sum_i n_{li} n_{ii}^{dc} = 0 \quad (4.8.a)$$

$$C_n n_{dc} (N_{ii} - n_{ii}^{dc}) - C_n n_{li} n_{ii}^{dc} - C_p p_{dc} n_{ii}^{dc} + C_p p_{li} (N_{ii} - n_{ii}^{dc}) + \left(\frac{N_{ii}}{G_T}\right) \sum_j n_{ij}^{dc} \Gamma_{i,j} - n_{ii}^{dc} \sum_j \frac{N_{ij}}{G_T} \Gamma_{i,j} = 0 \quad (4.8.b)$$

$$G_{dc} - C_p p_{dc} \left( \sum_i n_{ii}^{dc} \right) + C_p \sum_i p_{li} (N_{ii} - n_{ii}^{dc}) = 0 \quad (4.8.c)$$

Après regroupement des termes d'ordre 1, nous trouvons:

$$j\omega n_{ac} = G_{ac} - C_n n_{ac} \sum_i (N_{ii} - n_{ii}^{dc}) + C_n \sum_i n_{li} n_{ii}^{ac} + C_n n_{dc} \sum_i n_{ii}^{ac} \quad (4.9.a)$$

$$\left( j\omega + \frac{1}{\tau_i} \right) n_{ii}^{ac} = C_n n_{ac} (N_{ii} - n_{ii}^{dc}) - C_p p_{ac} n_{ii}^{dc} + \frac{N_{ii}}{G_T} \sum_j n_{ij}^{ac} \Gamma_{i,j} \quad (4.9.b)$$

$$j\omega p_{ac} = G_{ac} - C_p p_{dc} \sum_i n_{ii}^{ac} - C_p \sum_i p_{li} n_{ii}^{ac} - C_p p_{ac} \sum_i n_{ii}^{dc} \quad (4.9.c)$$

tel que

$$\frac{1}{\tau_i} = C_n n_{dc} + C_n n_{li} + C_p p_{li} + C_p p_{dc} + \sum_j \frac{N_{ij}}{G_T} \Gamma_{i,j} \quad (4.10)$$

Dans le système d'équations (4.9), on pose :

$$n_{ac} = n^r + jn^i, p_{ac} = p^r + jp^i, n_{ii}^{ac} = n_{ii}^r + jn_{ii}^i$$

Avec les indices  $r$  et  $i$  sont attribués respectivement aux parties réelle et imaginaire.

Après cela, on regroupe les termes réels d'une part et les termes imaginaires d'autre part, on obtient le système d'équations suivant:

$$-C_n n^i \sum_i (N_{ii} - n_{ii}^{dc}) + \sum_i (C_n n_{dc} + C_n n_{li}) n_{ii}^i - \omega n^r = 0 \quad (4.11.a)$$

$$C_n n^i (N_{ii} - n_{ii}^{dc}) + \left( \frac{N_{ii}}{G_T} \right) \sum_j n_{ij}^i \Gamma_{i,j} - \frac{n_{ii}^i}{\tau_i} - n_{ii}^r \omega - C_p p^i n_{ii}^{dc} = 0 \quad (4.11.b)$$

$$-C_p p^i \sum_i n_{ii}^{dc} - \sum_i (C_p p_{dc} + C_p n_{li}) n_{ii}^i - \omega p^r = 0 \quad (4.11.c)$$

$$-C_n n^r \sum_i (N_{ii} - n_{ii}^{dc}) + \sum_i (C_n n_{dc} + C_n n_{li}) n_{ii}^r + \omega n^i = -G_{ac} \quad (4.11.d)$$

$$C_n n^r (N_{ii} - n_{ii}^{dc}) + \left( \frac{N_{ii}}{G_T} \right) \sum_j n_{ij}^r \Gamma_{i,j} - \frac{n_{ii}^r}{\tau_i} + n_{ii}^i \omega - C_p p^r n_{ii}^{dc} = 0 \quad (4.11.e)$$

$$-C_p p^r \sum_i n_{ii}^{dc} - \sum_i (C_p p_{dc} + C_p n_{li}) n_{ii}^r + \omega p^i = -G_{ac} \quad (4.11.f)$$

#### 4.4.2 Méthode de résolution

Nous avons abouti à deux systèmes d'équations (4.8) et (4.11) indépendants l'un de l'autre. Le premier système formé par les équations (4.8) exprime le comportement continu (régime stationnaire). Dans ce système, les inconnues à calculer sont les densités des électrons et des trous libres ( $n_{dc}, p_{dc}$ ) et la densité des électrons piégés de niveau d'énergie  $i$  ( $n_{ii}^{dc}$ ) avec  $i=2:N-1$ . Le deuxième système d'équations (4.11) traduit le régime alternatif, les inconnus à rechercher sont les quantités réelles et imaginaires des densités des électrons et des trous libres ( $n^r, n^i, p^r, p^i$ ) et la partie réelle et la partie imaginaire de la densité des électrons piégés ( $n_{ii}^r, n_{ii}^i$ ).

Le système d'équations (4.8) est formé par des équations non linéaires à résoudre numériquement. Pour sa résolution, on définit un vecteur  $y$  formé par des éléments qui représentent les variables du système  $n_{dc}, n_{ii}^{dc}$ , et  $p_{dc}$  tel que :

$y_1 = n_{dc}$ , le premier élément attribué à la bande de conduction.

$y_i = n_i^{dc}$  ( $i : 2..N-1$ ), ( $N-2$ ) éléments pour les niveaux des états localisés du gap.

$y_N = p_{dc}$ , le dernier élément attribué à la bande de valence.

Par conséquent, le vecteur  $y$  est formé par  $N$  éléments.

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ y_N \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

Après le changement de variables, le système d'équations sous forme discrétisée s'écrit de la façon suivante :

$$G_{dc} - C_n y_1 \sum_i (N_{ii} - y_i) + C_n \sum_i n_{ii} y_i = 0 \quad (4.13.a)$$

$$y_1 C_n (N_{ii} - y_i) - C_n n_{ii} y_i - C_p n_{ii} y_N + C_p p_{ii} (N_{ii} - y_i) + \left( \frac{N_{ii}}{G_T} \right) \sum_j n_{ij} y_i - y_i \sum_j \frac{N_{ij}}{G_T} \Gamma_{i,j} = 0 \quad (4.13.b)$$

$$G_{dc} - C_p y_N \sum_i y_i + C_p \sum_i p_{ii} (N_{ii} - y_i) = 0 \quad (4.13.c)$$

La résolution de ce système d'équations non linéaires à  $N$  inconnus s'effectue par l'application de la méthode itérative de Newton Raphson [6]. La description de cette méthode est comme suit :

On définit un vecteur  $f$  qui contient des éléments représentant les taux d'augmentation (dérivées par rapport au temps) des éléments du vecteur  $y$  :

$$f(y) = \frac{dy}{dt} = \begin{bmatrix} \frac{dy_1}{dt} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{dy_N}{dt} \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

Nous réécrivons le système d'équations de la façon suivante:

$$\frac{dy_i}{dt} = G_{dc} - C_n y_i \sum_i (N_{ii} - y_i) + C_n \sum_i n_{ii} y_i \quad (4.15.a)$$

$$\begin{aligned} \frac{dy_i}{dt} = & C_n y_i (N_{ii} - y_i) - C_n n_{ii} y_i - C_p y_N n_{ii} + C_p p_{ii} (N_{ii} - y_i) \\ & + \left( \frac{N_{ii}}{G_T} \right) \sum_j y_j \Gamma_{i,j} - y_i \sum_j \frac{N_{ij}}{G_T} \Gamma_{i,j} \end{aligned} \quad (4.15.b)$$

$$\frac{dy_N}{dt} = G_{dc} - C_p y_N \sum_i y_i + \sum_i C_p p_{ii} (N_{ii} - y_i) \quad (4.15.c)$$

La linéarisation du système d'équations est obtenue par le développement en série de Taylor de la fonction  $f_i(y)$  autour d'une estimation  $y^s$  proche de  $y$  tel que  $y$  désigne le vecteur solution du système et  $s$  l'indice d'itération. Si on néglige les termes du second ordre, le développement en série de Taylor de la fonction  $f_i(y)$  est donné par:

$$f_i(y) = f_i(y^s + y - y^s) = f_i(y^s) + \sum_{j=1}^N \frac{\partial f_i(y^s)}{\partial y_j^s} (y_j - y_j^s) = 0 \quad (4.16)$$

A partir de l'équation (4.39), on peut écrire:

$$\sum_{j=1}^N \frac{\partial f_i(y^s)}{\partial y_j^s} (y_j - y_j^s) = -f_i(y^s) \quad (4.17)$$

Le système d'équations (4.15) peut se mettre sous la forme vectorielle suivante :

$$J^s \cdot \Delta y = -f(y^s) \quad (4.18)$$

où  $\Delta y$  désignant le vecteur erreur qui correspond à un accroissement du vecteur solution  $y$  après chaque itération:  $\Delta y = y - y^s$ .  $J^s$  représente la matrice Jacobienne  $N \times N$  dont les éléments sont définis par :

$$J_{ij}^s = \frac{\partial f_i(y^s)}{\partial y_j^s} \quad (4.19)$$

Avec  $i=1 \dots N$  et  $j=1 \dots N$ .

L'équation (4.18) est une équation vectorielle linéaire dont le seul inconnu est le vecteur  $\Delta y$ . Par itération et à travers la solution intermédiaire  $y^s$  et le vecteur  $\Delta y$ , la solution  $y^{s+1}$  correspondante à l'itération  $s+1$  est donnée par :  $y^{s+1} = y^s + \Delta y$ .

A chaque itération, on résout le système d'équation jusqu'à ce qu'on obtient une erreur relative  $\frac{\Delta y}{y^{s+1}}$  inférieure à  $\varepsilon$ .  $\varepsilon$  est une erreur fixée pour le calcul approché de  $y$ , nous avons choisi une valeur égale à  $10^{-8}$  pour laquelle le calcul s'arrête.

Une fois les inconnus  $n_{dc}$ ,  $p_{dc}$  et  $n_{ii}^{dc}$  sont calculés, on les introduit dans le système d'équations (4.11). A ce moment, on obtient un système d'équations linéaires, sa résolution permet de calculer les inconnus  $n^r, n^i, p^r, p^i, n_{ii}^r$  et  $n_{ii}^i$ .

Il n'y a aucune difficulté mathématique particulière concernant la résolution de ce système sauf l'énorme grandeur de la matrice qui doit être considérée. Ce système peut être résolu numériquement en définissant une échelle de niveaux d'énergie dans le gap du semiconducteur considéré. Si le gap est divisé en  $N$  niveaux d'énergie, le nombre de variables à déterminer sera égal à  $2N$ , deux variables pour  $n_{ac}$  ( $n^r$  et  $n^i$ ), deux variables pour  $p_{ac}$  ( $p^r$  et  $p^i$ ) et  $2N-4$  variables pour  $n_{ii}^{ac}$  ( $N-2$  pour  $n_{ii}^r$  et  $N-2$  pour  $n_{ii}^i$ ).

#### 4.5 Calcul de la photoconductivité et de la densité des états $g(E)$

Le processus de "multitrapping" des électrons et des trous libres par les états localisés contribue à la photoconductivité par la relation connue suivante:

$$\sigma_{mt} = q(\mu_n n + \mu_p p) \quad (4.20)$$

La photoconductivité totale de saut ( $\sigma_h$ ) est évaluée par une sommation sur tous les niveaux  $i$  [5]:

$$\sigma_h = \frac{q^2}{6kT} \sum_i (R_{i,j})^2 v_i n_{ii} \quad (4.21)$$

Ou  $v_i$  est équivalente à la probabilité par seconde de saut effectué par un électron au delà du niveau d'énergie  $i$ , elle est donnée par [5]:

$$v_i = v_o \sum_j \frac{N_{ij}}{G_T} \exp\left(\frac{-2R_{i,j}}{a}\right) \exp\left(-\frac{E_j - E_i}{kT}\right) \quad (4.22)$$

Quand les deux processus de "multitrapping" et de saut se déroulent ensemble, la photoconductivité totale ( $\sigma_{ph}$ ) est la somme de l'équation (4.20) et l'équation (4.21) :

$$\begin{aligned} \sigma_{ph} &= q(\mu_n n + \mu_p p) \\ &+ \frac{q^2 v_o}{6kT} \sum_i (R_{i,j})^2 \sum_j \frac{N_{ij}}{G_T} \exp\left(\frac{-2R_{i,j}}{a}\right) \exp\left(-\frac{E_j - E_i}{kT}\right) n_{ii} \end{aligned} \quad (4.23)$$

La partie réelle  $\sigma_{ph}^r$  et la partie imaginaire  $\sigma_{ph}^i$  en fonction de la pulsation  $\omega$  de la photoconductivité peuvent s'écrire comme suit:

$$\begin{aligned} \sigma_{ph}^r(\omega) &= q(\mu_n n^r(\omega) + \mu_p p^r(\omega)) \\ &+ \frac{q^2 v_o}{6kT} \sum_i (R_{i,j})^2 \sum_j \frac{N_{ij}}{G_T} \exp\left(\frac{-2R_{i,j}}{a}\right) \exp\left(-\frac{E_j - E_i}{kT}\right) n_{ii}^r(\omega) \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{ph}^i(\omega) &= q(\mu_n n^i + \mu_p p^i(\omega)) \\ &+ \frac{q^2 v_o}{6kT} \sum_i (R_{i,j})^2 \sum_j \frac{N_{ij}}{G_T} \exp\left(\frac{-2R_{i,j}}{a}\right) \exp\left(-\frac{E_j - E_i}{kT}\right) n_{ii}^i(\omega) \end{aligned} \quad (4.25)$$

Pour le calcul de la densité des états localisés  $g(E)$  dans le gap, nous utilisons la méthode de calcul proposé par Longeaud et al. [7] utilisant à la fois l'amplitude alternative et le déphasage de la photoconductivité modulée par rapport à l'excitation de la lumière. Le module du photocourant modulé  $|I_{ac}|$  est calculée en tenant compte des deux composantes  $\sigma_{ph}^r$  et  $\sigma_{ph}^i$  et il est exprimée par [8]:

$$|I_{ac}(\omega)| = S\xi \left[ (\sigma_{ph}^r(\omega))^2 + (\sigma_{ph}^i(\omega))^2 \right]^{1/2} \quad (4.26)$$

Le déphasage  $\phi$  est donné à partir de l'expression suivante :

$$\phi(\omega) = -\text{artan} \frac{\sigma_{ph}^i(\omega)}{\sigma_{ph}^r(\omega)} \quad (4.27)$$

Par conséquent la densité des états est donnée par :

$$g(E_\omega) = \frac{2}{\pi C_n k T G_c} \left( \frac{S q \mu_n \xi G_{ac} \sin \phi(\omega)}{|I_{ac}(\omega)|} - \omega \right) \quad (4.28)$$

avec  $E_\omega$  défini par:

$$E_c - E_\omega = kT \ln \left( \frac{C_n k T G_c}{\omega} \right) \quad (4.29)$$

Les mesures de la PCM sont malheureusement limitées dans une gamme de fréquences entre 12 Hz et 40 kHz à cause des effets inhérents du couplage électromagnétique provenant de l'expérience elle-même. La densité d'états n'est donc déterminée que dans une gamme d'énergies limitée.



**Références**

- [1] Main, C., Berkin, J., and Merazga, A. (1991) *in New Physical Problems in Electronic Materials*, Borissov, M. et al eds. (World Scientific, Singapore), p. 55.
- [2] Mott, N. F., and Davis, E. A. (1979) "*Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*" Second edition. Clarendon Press. Oxford.
- [3] Miller, A. and Abraham, E. (1960) *Phys. Rev.* **120**. 745.
- [4] Baranovskii, S. D., Thomas, P., and Adriaenssens, G. J. (1995) *J. Non-Cryst. Solids* **190**. 283.
- [5] Main, C., Marshall, J. M., and Reynolds, S. (2005) *J. Optoelectronics and advanced materials*,
- [6] Boumahrat, M., and Gourdin, A. (1993) "*Méthodes numériques appliquées*", ed. OPU
- [7] Longeaud, C., and Kleider, J. P. (1992) *Phys. Rev. B* **45** 11672.
- [8] Longeaud, C., and Tobbeche, S. (2009), *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 045508.

## 5.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous exposons les résultats de la simulation numérique concernant la photoconductivité en régime stationnaire et modulée dans le a-Si:H selon le modèle présenté dans le chapitre 4. La section 5.2.1 est consacrée au régime stationnaire, nous décrivons les courbes de la photoconductivité stationnaire en fonction de la température. Cette section porte aussi sur l'effet de la température, la densité des états et du taux de génération de la lumière sur les deux processus de conduction: le transport par le processus de "multitrapping" seul (MT seul) et le transport par les deux processus de "multitrapping" et de saut (MT+saut). Dans la section 5.2.2, nous nous concentrons sur le régime alternatif. Nous décrivons les courbes de la DOS reconstruite pour différentes températures. Nous analysons ensuite l'effet de la densité des états introduite et l'effet de l'excitation de la lumière sur les deux processus de conduction. Dans les deux régimes (stationnaire et modulée), nous avons comparé les résultats obtenus par la simulation avec les mesures expérimentales existantes dans la littérature.

## 5.2 Résultats et interprétations

### 5.2.1 Photoconductivité à l'état stationnaire (PCS)

Pour simuler la PCS, nous avons considéré une densité des états (DOS) typique du silicium amorphe hydrogéné. Cette densité des états est représentée sur la figure 5.1, le gap  $E_g$  est pris égal à 1.9 eV. La densité des états est composée par une queue de bande de valence (QBV) de température caractéristique  $T_v=600$  K et une queue de bande de conduction (QBC)  $T_c=348$  K, et deux distributions gaussiennes. La première gaussienne est centrée à 0.65 eV au dessous de  $E_c$ , avec une valeur de la crête de  $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  et un écart type de 0.12 eV. La seconde gaussienne est centrée à 1.25 eV au dessous de  $E_c$ , avec une valeur de la crête de  $10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  et un écart type de 0.12 eV.

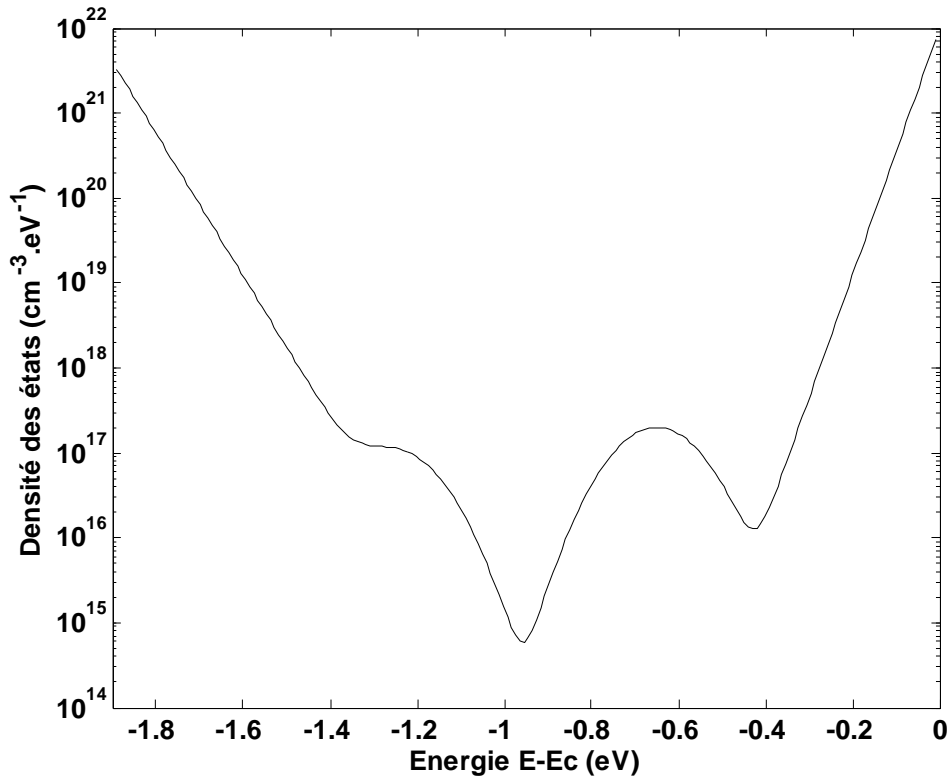


Figure 5.1 : Densité des états introduite dans la simulation de la PCS et de la MPC

Les grandeurs physiques suivantes, adaptées aux semi-conducteurs amorphes ont été utilisées dans la simulation:  $N_c=N_v=5\times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  à  $T=300 \text{ K}$ ,  $C_n=10^{-8} \text{ cm}^3.\text{s}^{-1}$ ,  $C_p=10^{-9} \text{ cm}^3.\text{s}^{-1}$ ,  $\mu_n = 10 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  et  $\mu_p = 0.3 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ .  $\nu_0$  est la fréquence de saut ("attempt to hop frequency") et  $a$ , la longueur de localisation ont pour valeurs respectives  $5\times 10^{-8} \text{ cm}$  et  $10^9 \text{ s}^{-1}$ . Fig. 5.2 illustre la variation en fonction de l'inverse de la température  $1/T$  de la photoconductivité normalisée  $\sigma_{ph}/(e.G)$  simulée en régime stationnaire pour le a-Si:H intrinsèque et avec une excitation de la lumière  $G = 10^{17} \text{ cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$ . Cette courbe ressemble qualitativement à celle de fig.5.3 observée expérimentalement [1]. La dépendance en température de la photoconductivité apparait avoir quatre régimes: (I) aux très basses températures, la photoconductivité est très petite et presque constante, (II) aux basses et moyennes températures, la photoconductivité augmente de plusieurs ordres de grandeur avec la température, (III) à hautes températures, la photoconductivité présente un maximum et un minimum. La diminution de la photoconductivité avec l'augmentation de la température est appelée "thermal quenching", (IV) aux températures très élevées, la photoconductivité croit d'une façon rapide avec la température.

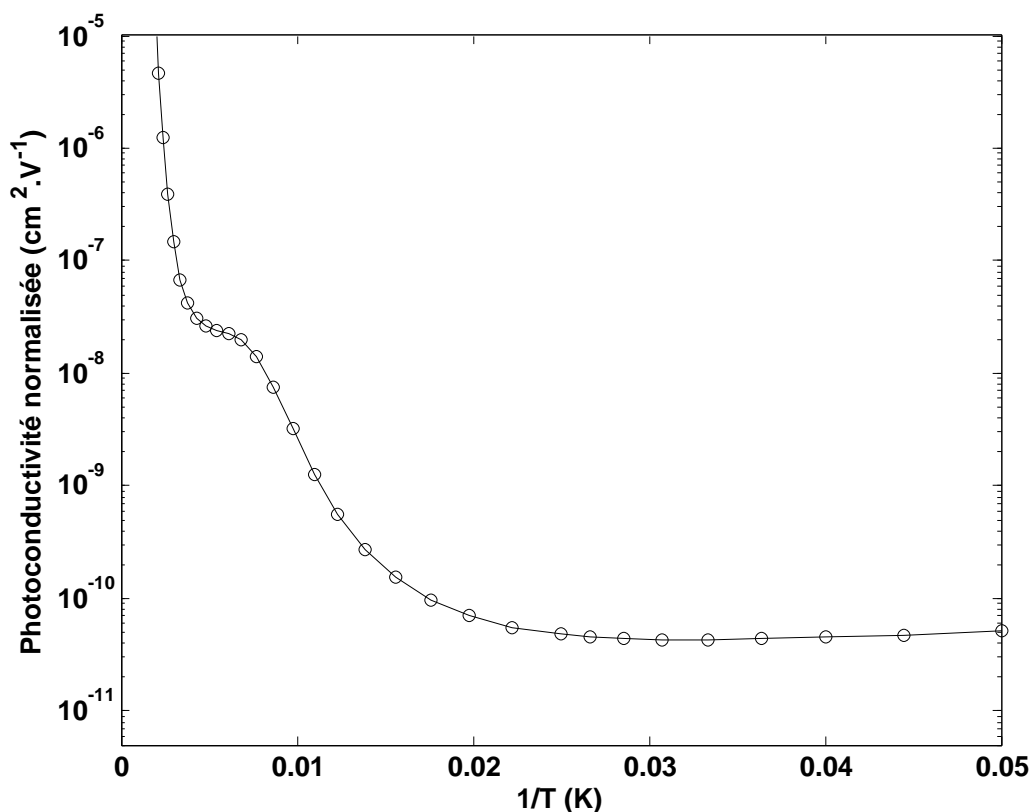


Figure 5.2 : Variation de la photoconductivité normalisée avec l'inverse de la température simulée pour l'a-Si:H intrinsèque avec  $G = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ .

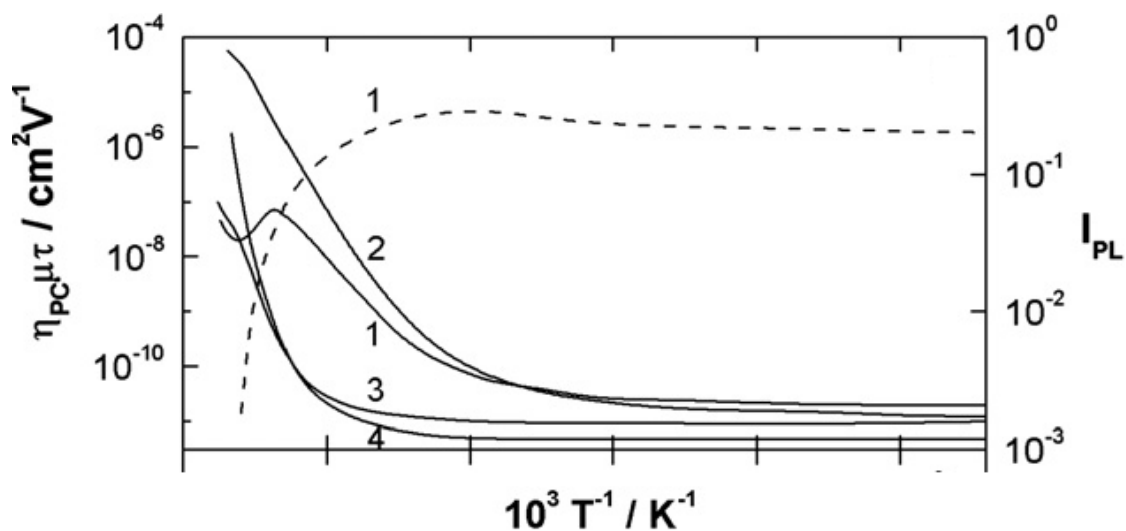


Figure 5.3 : Variation de la photoconductivité normalisée avec l'inverse de la température mesurée sur l'a-Si:H. Couches par "PECVD" : (1) non dopée, (2) dopée de type n, (3) dopée de type p, (4) couche non dopée obtenue par pulvérisation cathodique. Le trait en pointillé représente la variation avec l'inverse de la température de l'intensité de la photoluminescence de l'échantillon (1) [1].

Dans notre simulation de la PCS, nous avons considéré deux mécanismes de transport: le transport par le processus de "multitrapping" (MT) et le transport de saut ("hopping"). Dans les paragraphes qui suivent, nous allons étudier l'effet de la température et de la densité des états sur ces deux processus.

### 5.2.1.1 Influence de la température sur les processus de conduction (MT, saut)

Nous avons considéré deux cas de transport: le transport par le processus de "multitrapping" seul (MT seul) et le transport par les deux processus de MT et de saut se déroulant simultanément (MT avec saut+saut) (figure 5.4). Pour savoir lequel des deux cas de transport domine la photoconductivité, nous avons tracé dans la figure la photoconductivité et ces deux composantes (MT avec saut, saut) correspondantes au mode de MT associé au processus de saut et la photoconductivité du mode MT seul. Rappelons que la photoconductivité  $\sigma_{ph}$  est la somme de deux composantes :  $\sigma_{ph} = \sigma_{MT} + \sigma_h$ . Où  $\sigma_{MT}$  est la photoconductivité des porteurs libres résultante du mécanisme de MT et  $\sigma_h$  est la photoconductivité de saut.

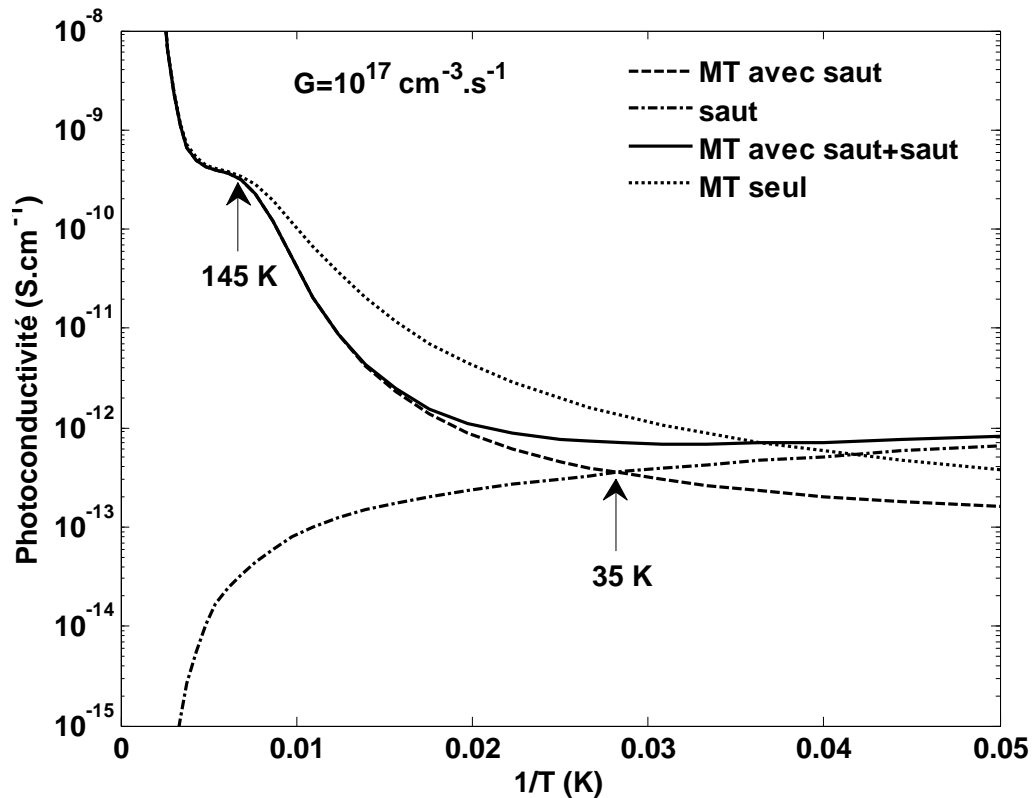


Figure 5.4 : Les courbes de la photoconductivité simulée dans les deux cas de transport MT seul et MT+saut pour l'a-Si:H intrinsèque avec  $G = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ .

D'après cette figure, nous pouvons voir que l'introduction du processus de saut n'influe pas sur la photoconductivité pour les températures supérieures à 145 K. Dans cette gamme de température, la contribution du processus de saut diminue d'une manière plus prononcée et favorise le mécanisme de transport de MT, ceci induit une photoconductivité égale à la photoconductivité de MT seul), par conséquent, la photoconductivité est contrôlée par le processus de MT. Au fur et à mesure que la température diminue ( $T < 145$  K), nous pouvons voir que l'introduction du mécanisme de saut dans la conduction entraîne un changement de la forme et de la grandeur de la photoconductivité par rapport à la photoconductivité de MT seul, de plus, la composante des porteurs libres (MT avec saut) est réduite quand le processus de saut est introduit dans le transport. La photoconductivité (MT avec saut+saut) est contrôlée par les deux composantes relatives au (MT avec saut) et de (saut). La photoconductivité est donc contrôlée par les deux mécanismes de MT et de saut pour l'intervalle de température entre 35 et 145 K.

Si nous faisons une comparaison entre cette figure dans le cas simulé et Fig 5.28.b dans le cas des mesures expérimentales, pour  $T < 145$  K, nous pouvons remarquer que la photoconductivité (MT seul) simulée ne reflète pas l'aspect observé expérimentalement correspondant à l'indépendance de la photoconductivité avec  $T$  pour les très basses températures. Par ailleurs, cet aspect est bien reproduit par la photoconductivité de (MT avec saut+saut) et cette indépendance commence à partir de la température 35 K.

### 5.2.1.2 Influence de la densité des états sur les processus de conduction (MT, saut)

La simulation est faite pour les trois DOS représentées sur la figure 5.5 avec un taux de génération  $G = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  et en supposant que le processus de MT est impliqué seul dans le transport de porteurs de charges ou en supposant que le transport survient par les deux processus de MT et de saut ensemble. Les résultats sont illustrés sur la figure 5.6. Quand le MT est supposé le seul processus de transport (MT seul), il y'a une diminution de la photoconductivité avec l'augmentation de la densité d'états (les symboles complets). Ce comportement est en accord avec ce qu'on s'attendrait avec un taux de génération fixe et une augmentation de la DOS : plus la DOS est haute, plus le sondage des quasi-niveaux de Fermi est bas et par conséquent plus le photocourant est petit. Quand le processus de saut est tenu en compte, la conduction par MT est dominante à hautes températures et le transport de saut apparaît à basses températures pour les trois

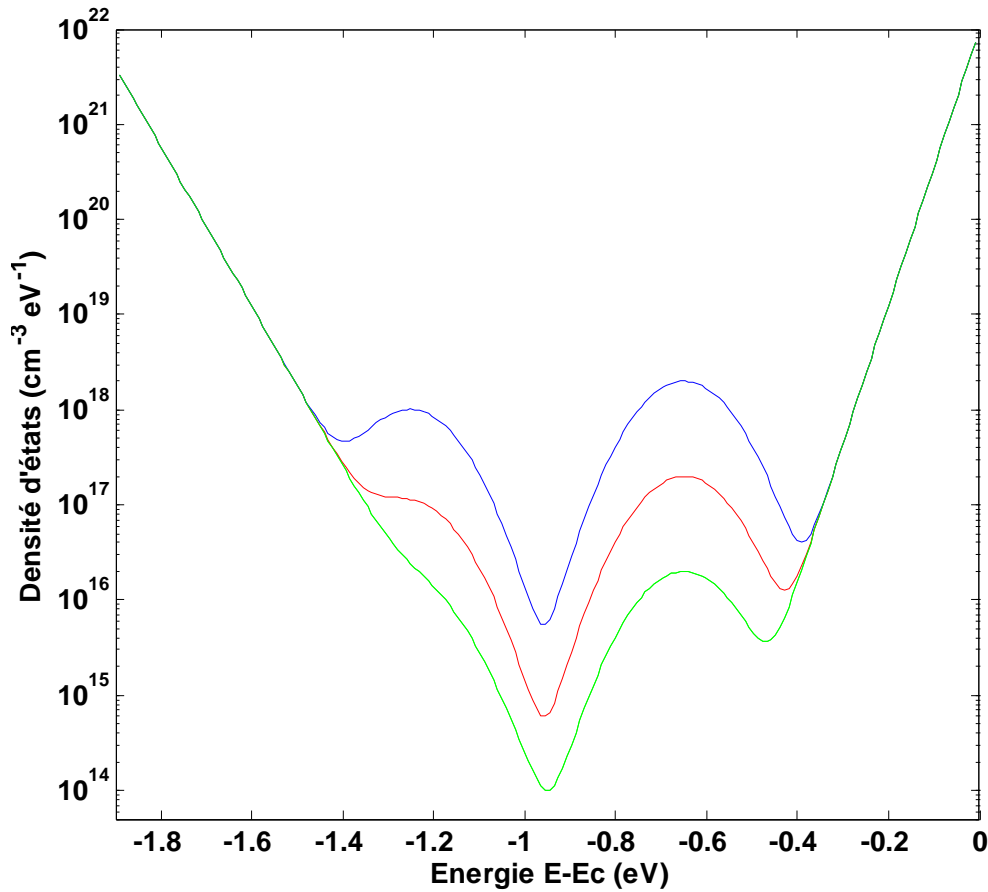


Figure 5.5 : Densités des états utilisées pour la simulation de l'effet de la DOS sur les processus de conduction par MT et par Saut.

DOS. Cependant, la contribution du MT à la photoconductivité est affectée par le processus de saut du moment que les valeurs de la photoconductivité (les symboles ouverts) sont plus petites par rapport à celles obtenues en considérant le transport par MT seul. Dans la figure 5.7, nous avons tracé l'évolution des variations des fonctions d'occupation avec un taux de génération  $G=10^{17}\text{cm}^{-3}\text{eV}^{-1}$  à la température  $T=102\text{K}$  appartenant à la région où la photoconductivité est affectée par le processus de saut en considérant les trois DOS de la figure 5.5. Nous avons considéré les deux cas de transport; le transport par le processus de MT seul et le transport par les deux processus MT+saut se déroulant simultanément. Dans le cas du transport par MT seul, l'évolution est comme prédite de la théorie développée par Taylor et Simmons pour un état monovalent [2], La zone de recombinaison est limitée par le plateau de la fonction d'occupation et la largeur de ce plateau augmente avec la diminution de la DOS. Dans ce cas les porteurs de charges se déplacent d'un état localisé à un autre état de la bande de conduction par émission de l'état de départ vers l'état étendu, cette émission est

suivie par la capture par un autre état localisé. La conduction est assurée par le phénomène de capture et émission par les états localisés du gap et le chemin de transport dominant est à travers les états étendus autour du niveau  $E_c$  de la bande de conduction. Quand le saut est tenu en compte, il y'a changement dans les fonctions d'occupation. Quand la DOS augmente, le saut entraîne une condensation de porteurs de charges dans des niveaux localisés de plus en plus proches de la position de niveau Fermi à l'obscurité ( $E_{fo} = -0.95$  eV). Les électrons se déplacent par saut vers le bas, en remplissant les niveaux d'énergie vides. Comme résultat, le quasi-niveau de Fermi  $E_{fn}$  est plus proche de la position du niveau Fermi à l'obscurité en comparaison avec le cas du MT seul et le nombre de porteurs de charges libres diminue en conséquence. Cela explique pourquoi sous illumination à l'état stationnaire, bien que la photoconductivité soit contrôlée par le processus de MT, l'introduction du processus de saut abaisse les valeurs de la photoconductivité en comparaison au cas dans lequel le MT est considéré seul (voir la figure 5.6).

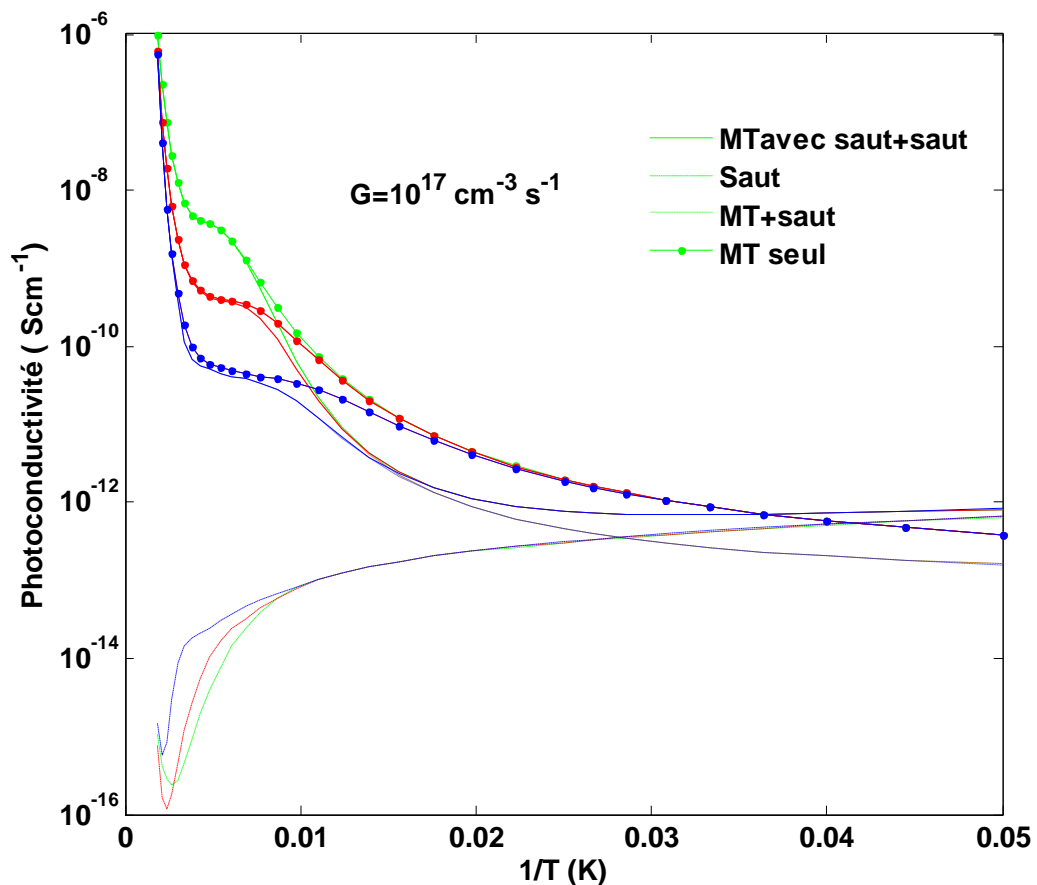


Figure 5.6 : Les courbes de la photoconductivité simulée dans les deux cas de Transport MT seul et MT+saut pour l'a-Si:H intrinsèque avec  $G = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$  et pour différentes DOS de la figure .



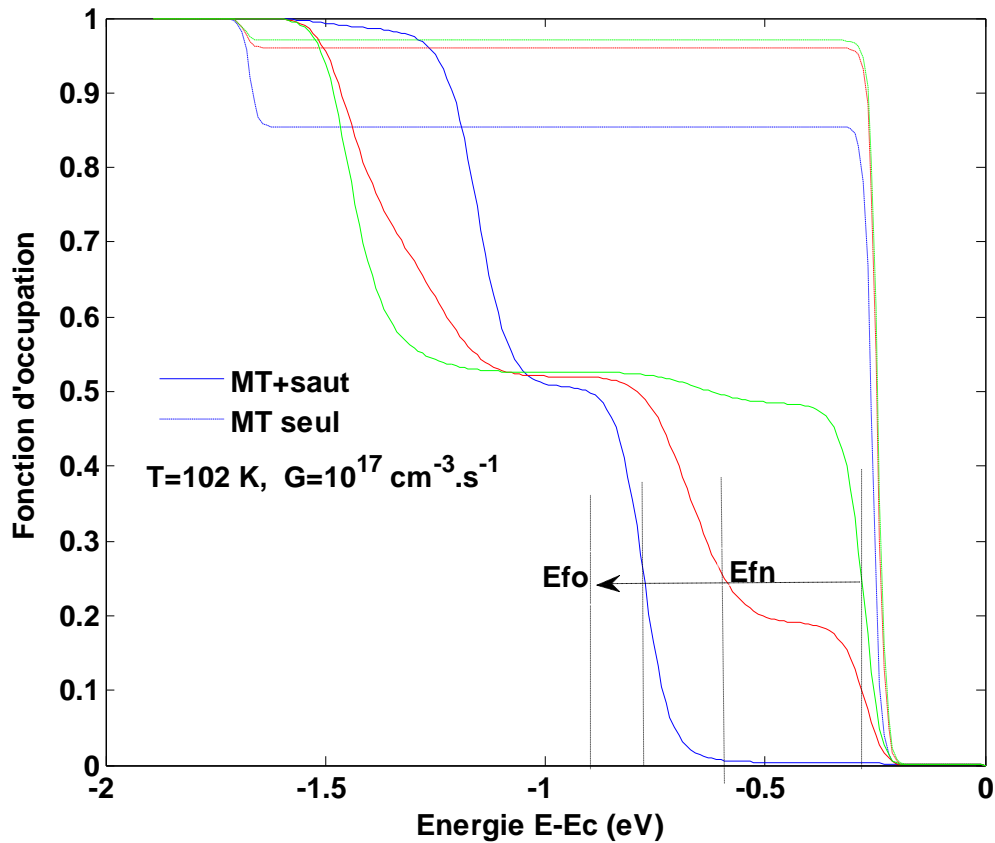


Figure 5.7 : Les courbes de la variation de la fonction d'occupation avec l'énergie simulée dans les deux cas de transport MT seul et MT+saut pour l'a-Si:H intrinsèque avec  $G=10^{17} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$  et pour différentes DOS de la figure .

### 5.2.1.3 Influence de l'excitation de la lumière sur la photoconductivité

Dans ce paragraphe, nous allons s'assurer de la validité de la proportionnalité de la photoconductivité à l'état stationnaire avec l'intensité de la lumière par le modèle de saut couplé avec le modèle de MT. Dans la figure 5.8, nous avons représenté la variation de la photoconductivité avec la température pour trois valeurs de l'intensité de la lumière  $G$  ( $10^{17}$ ,  $10^{19}$  et  $10^{20} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ). Nous remarquons qu'il y'a accroissement de la photoconductivité avec l'intensité de la lumière. Avec l'augmentation de  $G$ , la température de la contribution du saut sur la photoconductivité diminue et par conséquent il y'a rétrécissement de la région où le processus de saut est dominant. Dans la région dominée par le processus de saut et avec le choix de  $T=35 \text{ K}$  appartenant à cette région, la photoconductivité est une fonction de l'excitation de la lumière  $G$  ( $\sigma_{ph} \propto G^\gamma$ ) avec l'indice  $\gamma=1$  (fig. 5.9), ce résultat est en très bon accord avec les résultats expérimentaux de la photoconductivité en fonction de l'excitation de la lumière où  $\gamma=1$  pour  $T < 40 \text{ K}$  [3].

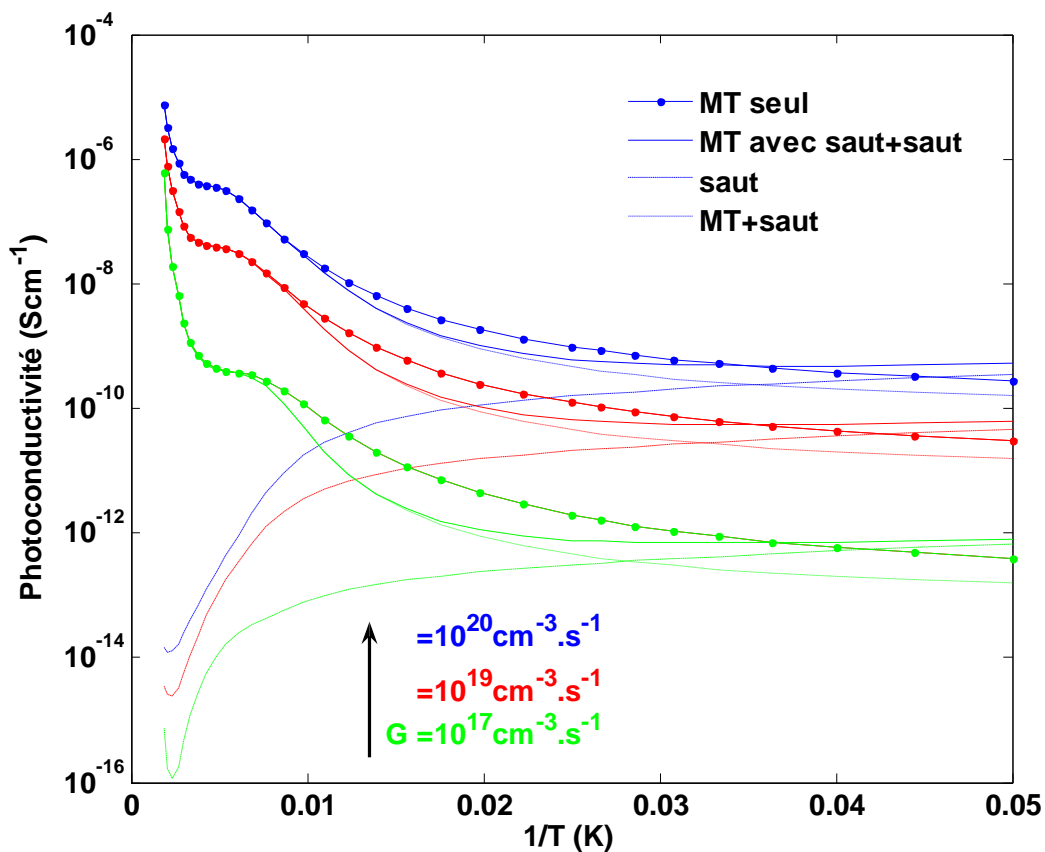


Figure 5.8 : Les courbes de la photoconductivité simulée dans les deux cas de transport MT seul et MT+saut pour l'a-Si:H intrinsèque pour différents taux de génération de la lumière appliquée.

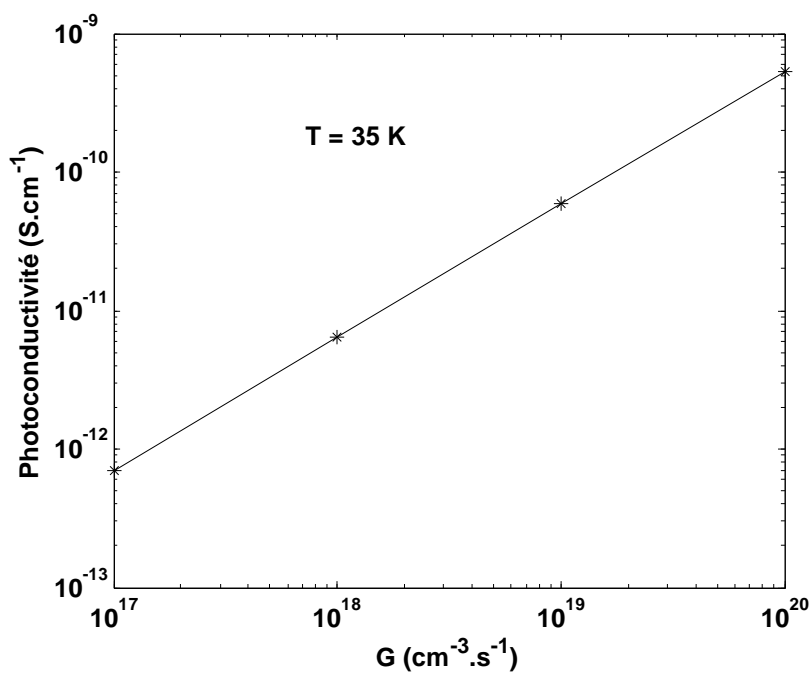


Figure 5.9 : Variation de la photoconductivité en fonction de l'intensité de la lumière.

Dans la figure 5.10, nous avons montré l'évolution de la fonctions d'occupation avec l'énergie, pour différents taux de génération à  $T=72$  K et pour la densité d'état moyenne de la figure 2, dans le cas du processus de MT seul et le cas du processus de MT+saut. En cas du MT seul l'évolution est comme prédite par la théorie développée par Taylor et Simmons pour un état monovalent [2]. La zone de recombinaison est délimitée par le plateau de la fonction d'occupation et la largeur de ce plateau augmente avec le taux de génération, c'est simplement parce qu'avec le l'augmentation du flux la zone de recombinaison s'élargit pour atteindre l'état stationnaire. Dans ce cas les porteurs de charges se déplacent d'un état localisé à l'autre par l'émission de l'état de départ vers les états étendus suivi par la capture par l'autre état localisé. Quand le processus de saut est tenu en compte les variations avec l'énergie des fonctions d'occupation sont complètement différentes, le saut entraîne une condensation de porteurs dans les niveaux localisés proches du niveau Fermi à l'obscurité.

Les électrons se déplacent par saut vers des états d'énergies basses dans le gap en remplissant les niveaux vides. Avec la diminution du taux de génération  $G$ , les quasi niveaux de Fermi s'approchent de plus en plus de la position du niveau de Fermi à l'obscurité que lorsque le processus de MT est considéré seul et le nombre de porteurs libres diminuent en conséquence.

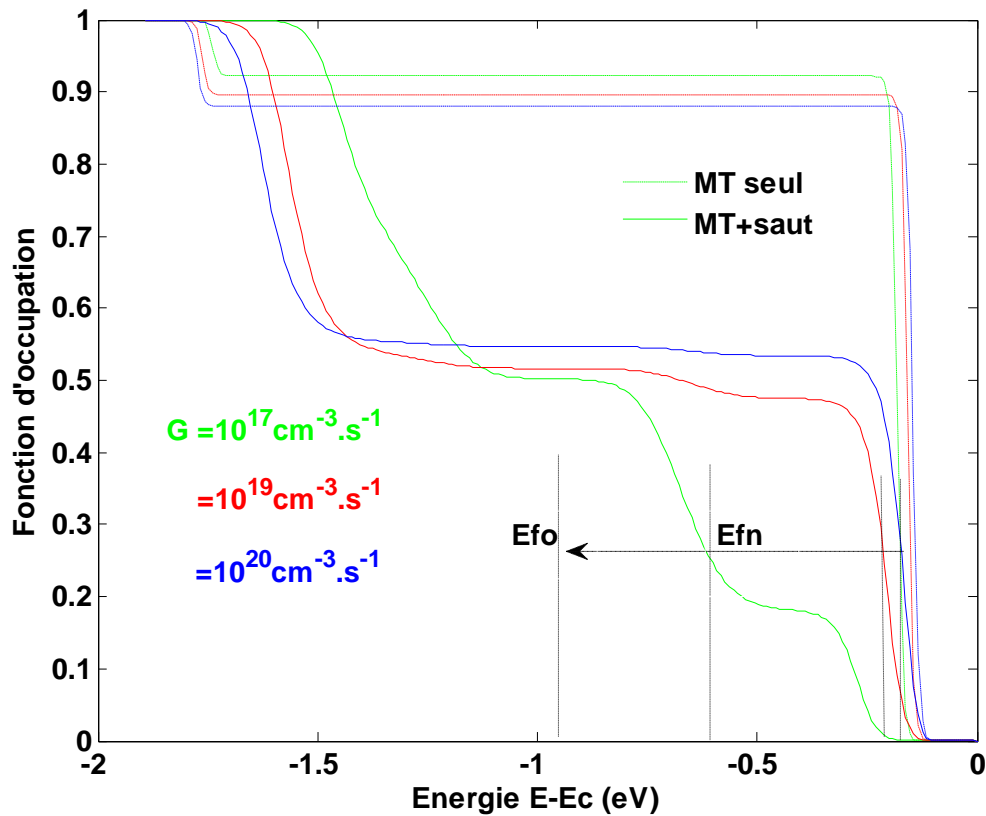


Figure 5.10 : Les courbes de la variation de la fonction d'occupation avec l'énergie simulée dans les deux cas de transport MT seul et MT+saut pour l'a-Si:H intrinsèque pour différents taux de génération de la lumière appliquée.

### 5.2.2 Photoconductivité modulée

Dans cette section, nous allons étudier par simulation numérique la technique de la photoconductivité modulée utilisée pour l'investigation des défauts dans les semiconducteurs très résistifs en particulier l'a-Si:H. Dans cette simulation, nous allons considérer le transport par saut dans la MPC. Nous devons signaler qu'il est assez difficile de déterminer une équation reliant la densité des états aux grandeurs mesurables tels que le module et le déphasage du photocourant modulé en considérant le processus de saut.

Les équations (5.1) et (5.2) permettent de calculer la DOS à partir du module et du déphasage du photocourant modulé.

$$N(E) = \frac{2N_c}{\pi\nu} \left( \frac{Sq\mu_n \xi G_{ac} \sin \phi}{|I_{ac}|} - \omega \right) \quad (5.1)$$

avec  $E$  défini par:

$$E_c - E = kT \ln \left( \frac{\nu}{\omega} \right) \quad (5.2)$$

Avec  $\xi$  le champ électrique appliqué,  $G_{ac}$  le taux de génération alternatif,  $S$  la section à travers laquelle le courant circule,  $\nu$  la fréquence d'échappement du processus d'émission défini par  $C_n \times N_c$  où  $C_n$  est le coefficient de capture des électrons et  $N_c$  la densité équivalente des états du niveau  $E_c$ .

Comme ces deux équations sont les seules équations à notre disposition pour calculer la DOS, ce sont celles qui peuvent être utilisées pour déterminer la DOS même dans le cas où le transport par saut présente une contribution non-négligeable [4]. Dans ces deux équations, on suppose un seul type de porteur est prédominant et que les électrons sont les porteurs majoritaires.

La DOS définie par l'équation (5.1) est obtenue en considérant le transport de Multitrapping. Cette DOS peut être calculée soit en variant la pulsation  $\omega$  pour une température donnée ou en variant  $T$  pour une pulsation donnée. Dans notre simulation et pour une température choisie, nous avons pris une gamme des fréquences entre 12 Hz et 40 kHz avec un pas tel que  $f_{r_{i+1}} = f_{r_i} \times 1.5$ . Selon l'équation (5.2) et à haute fréquence ou à basse température, la densité d'états ( Eq (5.1)) est plus près de la bande de conduction. La photoconductivité modulée est simulée à différentes températures (45 K-50 K-56 K-64 K-72 K-81 K-91 K-102 K-115 K-129 k-145 K-164 K-184 K-207 K-233 K-263 K-295 K-332 K-374 K-421 K- 474 K), ce qui permet de couvrir une large gamme d'énergie (de -0.05 eV jusqu'à -1 eV) pour la densité des états.

Dans la section suivante, nous allons simuler la DOS reconstruite à partir de la simulation de la photoconductivité modulée tout en étudiant l'effet des deux processus de conduction (MT, saut) pour différentes DOS introduites.

### 5.2.2.1 Effet de la DOS sur la MPC en présence des deux processus de transport (MT, saut)

Dans la simulation, nous avons considéré les trois densités des états illustrées dans la figure 5.5. La simulation est effectuée en supposant le processus de MT seul et les deux processus de MT et de saut ensemble.

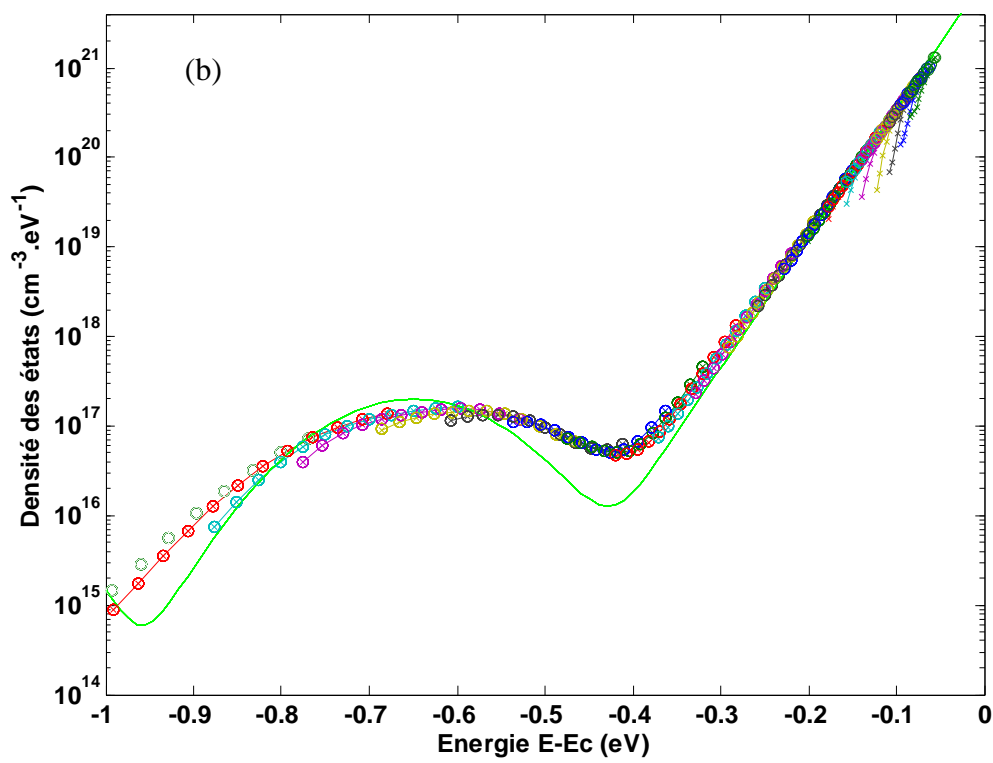
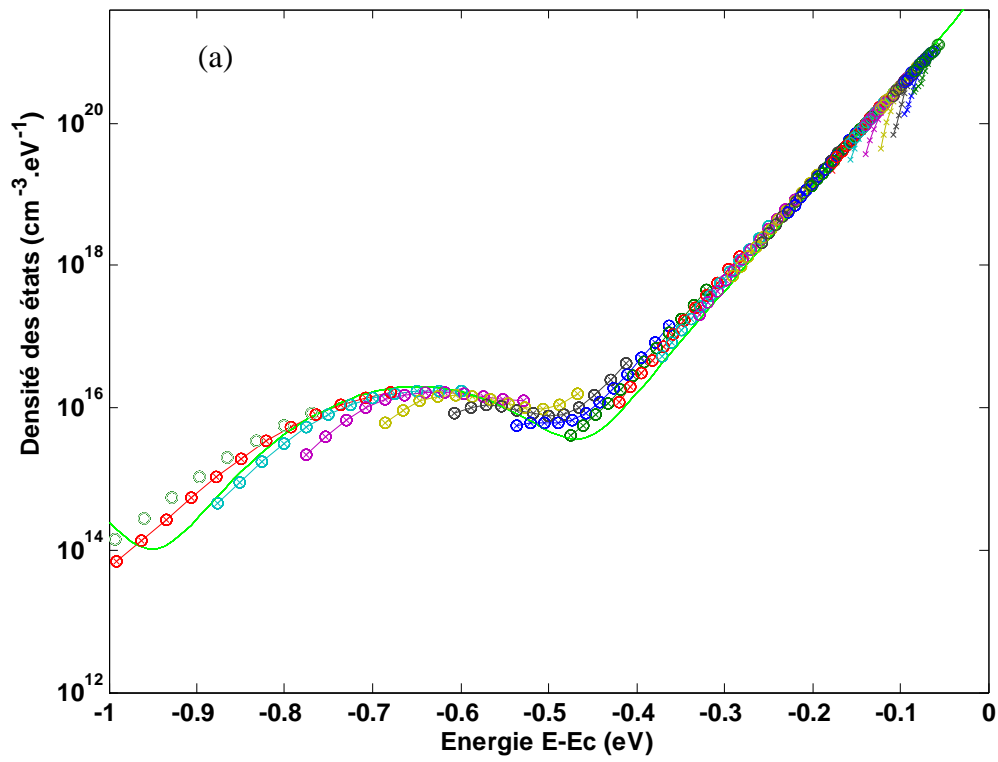
Les paramètres utilisés pour déterminer la DOS sont les suivants en plus de ceux cités précédemment dans la simulation de la photoconductivité à l'état stationnaire:

Un taux de génération dc  $G_{dc} = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ , un taux de génération ac  $G_{ac} = G_{dc}/10$ , une section de conduction  $S = 2.25 \times 10^{-5} \text{ cm}^2$  et un champ électrique dc  $\xi = 3000 \text{ V cm}^{-1}$ .

Nous avons tracé sur la figure 5.11 les trois DOS calculées à partir de la simulation de la PCM et par application de la formule (5.1). L'allure de la DOS est obtenue par l'enveloppe supérieure des courbes obtenues, correspondant aux points calculés aux plus hautes fréquences pour chaque température.

Nous remarquons que lorsque le processus de MT seul est considéré, les deux basses densités d'états introduites (en lignes continues) sont bien reproduites, les courbes obtenues aux différentes températures (en cercle) se recouvrent bien et leur enveloppe supérieure décrit bien les densités d'états introduites (figs. 5.11 (a) et (b)). Pour la densité d'états élevée (fig.5.11 (c)), nous avons obtenu des courbes révélant qu'il y'a une sous-estimation de la DOS; le pic de la gaussienne de la densité d'états proposée n'est pas parfaitement reproduit.

La comparaison entre les DOS (en croix), calculées en tenant compte du processus de saut avec les DOS (en cercle), calculées dans le cas du processus de MT seul permet de mettre en évidence l'influence du processus de saut sur la photoconductivité modulée. Les résultats montrent l'effet du mécanisme de saut sur la photoconductivité modulée par l'apparition des segments ou des queues, la partie la plus profonde du segment étant obtenue pour les faibles fréquences tandis que la partie près de la queue de bande de conduction correspond aux fréquences élevées. D'après ces figures, nous remarquons qu'avec l'accroissement de la densité des états, la température de la contribution du saut sur la photoconductivité modulée augmente et par conséquent il y'a élargissement de la région où le processus de saut est influençant sur la photoconductivité modulée. Le processus de saut est de plus en plus dominant avec l'accroissement de la DOS en régime alternatif comme pour le régime continu (voir figure 5.6).



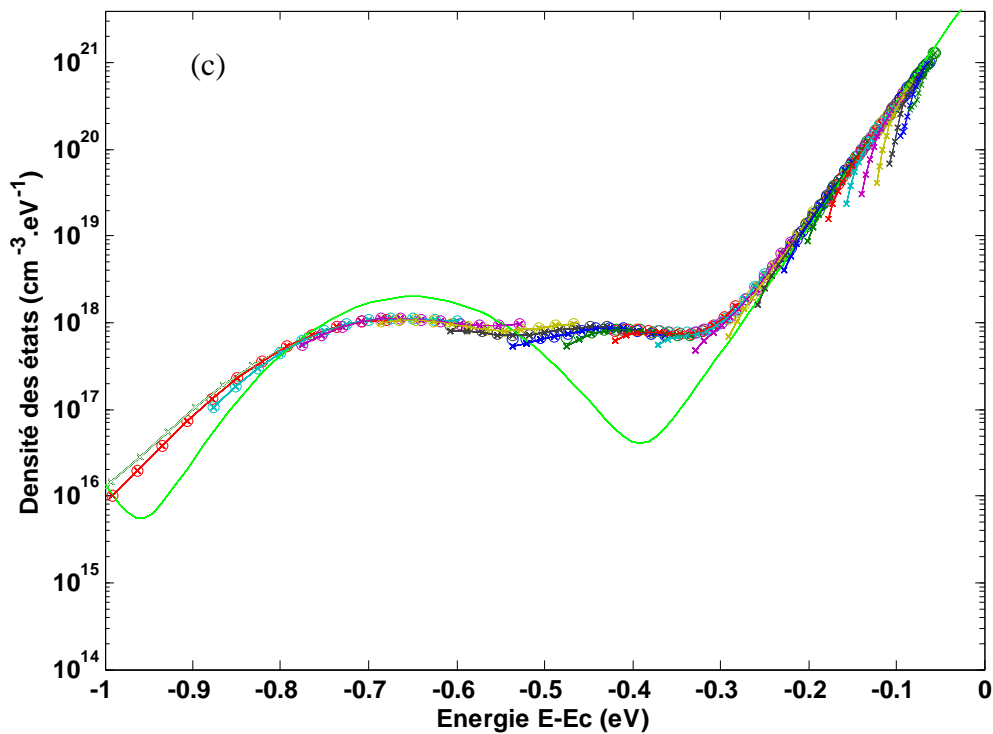


Figure 5.11 : Densités des états reconstruites à partir de la simulation de la photoconductivité modulée en mode MT seul (en cercle) et en mode MT+saut (en croix) pour différentes densités des états introduites (en ligne continue) présentées sur fig.5.5.

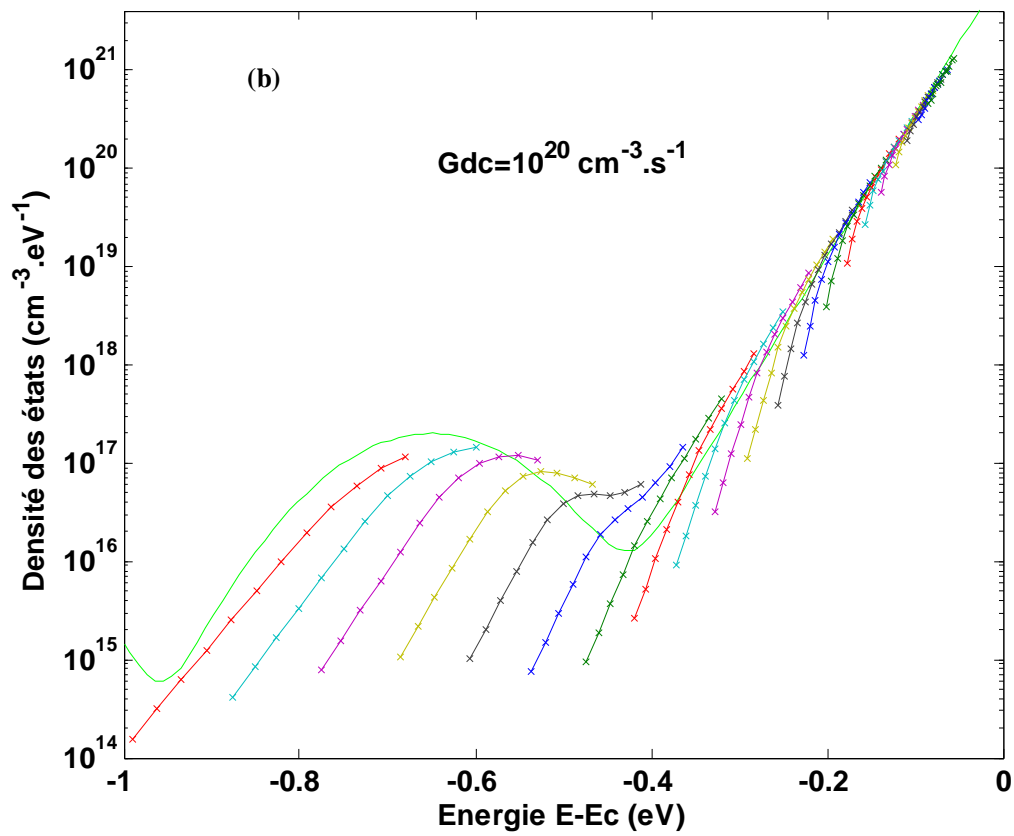
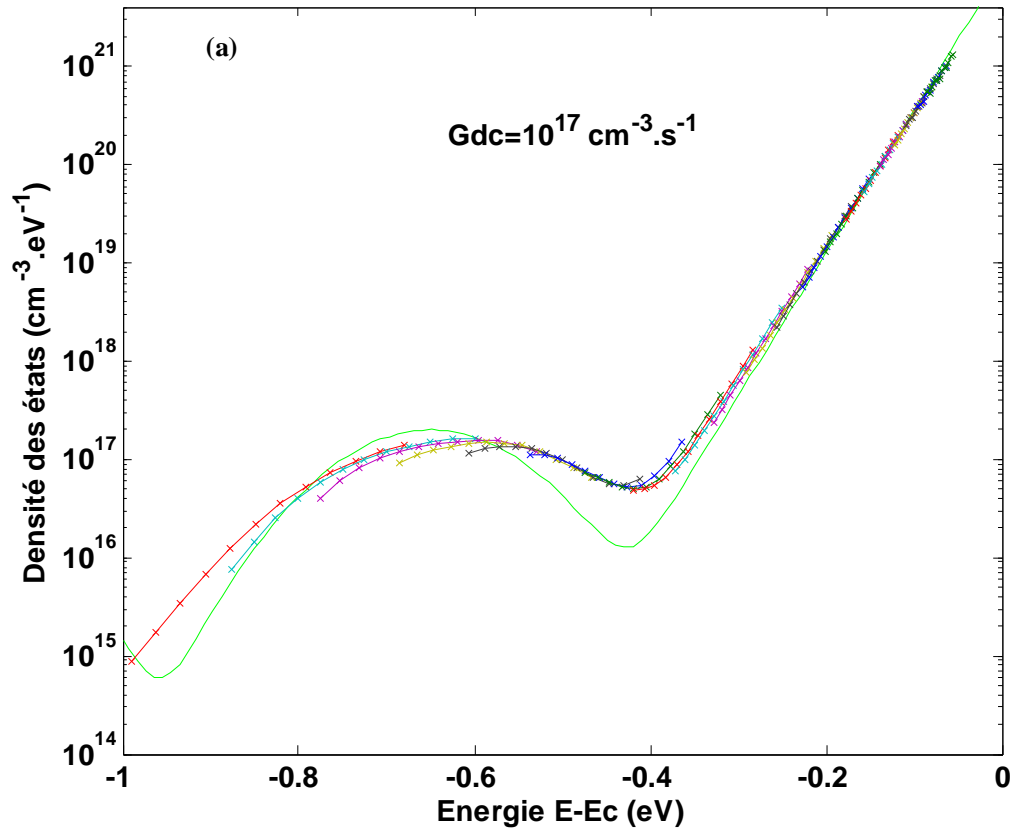
### 5.2.2.2 Effet de l'excitation de la lumière sur la photoconductivité modulée

Dans cette section, nous allons simuler la DOS reconstruite à partir de la simulation de la photoconductivité modulée tout en étudiant l'effet des deux processus de conduction (MT, saut) pour différent taux de génération de la lumière appliquée.

La photoconductivité modulée est simulée pour deux valeurs du taux de génération de l'excitation lumineuse ( $10^{17}$  et  $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$ ) dans les deux cas du processus de MT seul (figs. 5.12 (a) et (b) ) et du processus de MT couplé au processus de saut (figs. 5.12 (c) et (d)) pour la densité des états introduite égale à la DOS moyenne de la figure 5.5 . On peut voir que l'influence du flux lumineux sur la photoconductivité modulée est très perceptible dans le cas du transport par MT seul. Ce résultat est comme celui obtenu par simulation dans la référence [5] et a été aussi prouvé expérimentalement dans la référence [6]. Lorsque le processus de saut est pris en compte, nous remarquons que le flux lumineux a une influence sur la partie de la DOS ou le processus de MT est dominant, par contre son influence est petit dans la région de la DOS ou le processus de



saut est dominant. Nous pouvons conclure que le flux lumineux a peu d'influence sur la PCM dont le processus de saut est dominant tandis que son influence est très nette sur la PCM ou le processus de MT est le prédominant.



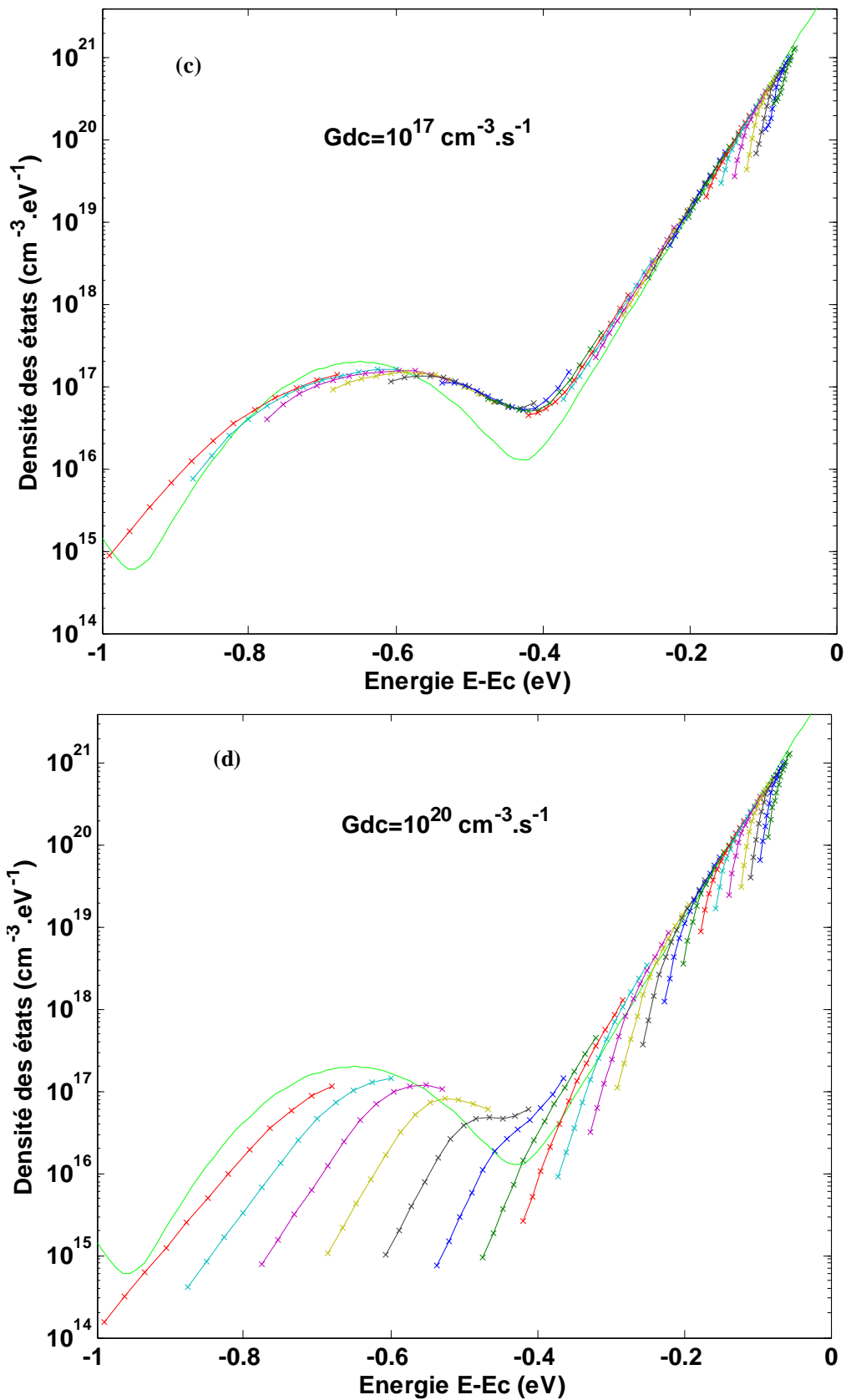


Figure 5.12 : Densités des états reconstruites à partir de la simulation de la photoconductivité modulée en mode MT seul et en mode MT+saup. (a) et (b) en mode MT seul avec  $G_{dc} = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$  pour (a) et  $G_{dc} = 10^{20} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$  pour (b). (c) et (d) en mode MT+saup avec  $G_{dc} = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$  pour (c) et  $G_{dc} = 10^{20} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$  pour (d).

### 5.2.3 Densité des états mesurée par la technique du photocourant modulé

L'échantillon a-Si:H intrinsèque en couche mince a été préparé par la décomposition d'un gaz de silane ( $\text{SiH}_4$ ) par décharge lumineuse radio fréquence (13.56 MHz) à une température de déposition  $200^\circ\text{C}$ . Deux contacts coplanaires en aluminium distants de 2 mm et de 1 cm de longueur sont déposés sur la surface du film. L'échantillon est placé sur un porte-échantillon refroidi par l'hélium dans un cryostat fonctionnant dans un intervalle de températures 40-150 K avec un pas de 10 K. La source lumineuse employée est une led avec un pic d'émission à 650 nm. L'expérience est réalisée avec deux flux lumineux continus  $F_{dc}$  de  $2 \times 10^{14}$  et  $10^{15} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ , Le flux lumineux alternatif  $F_{ac} = F_{dc}/4$  et dans une gamme de fréquences 12 Hz-40 KHz choisies de telle sorte que  $f_{i+1} = 1.5 \times f_i$  [4].

Les courbes de densité d'états présentées dans fig. 5.13 ont été reconstruites à partir des mesures de PCM. Ces courbes ont été tracées en prenant la mobilité  $\mu_n = 10 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1}$ , le coefficient de capture  $C_n = 4 \times 10^{-8} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  et la fréquence  $\nu = 10^{12} \text{ s}^{-1}$ .

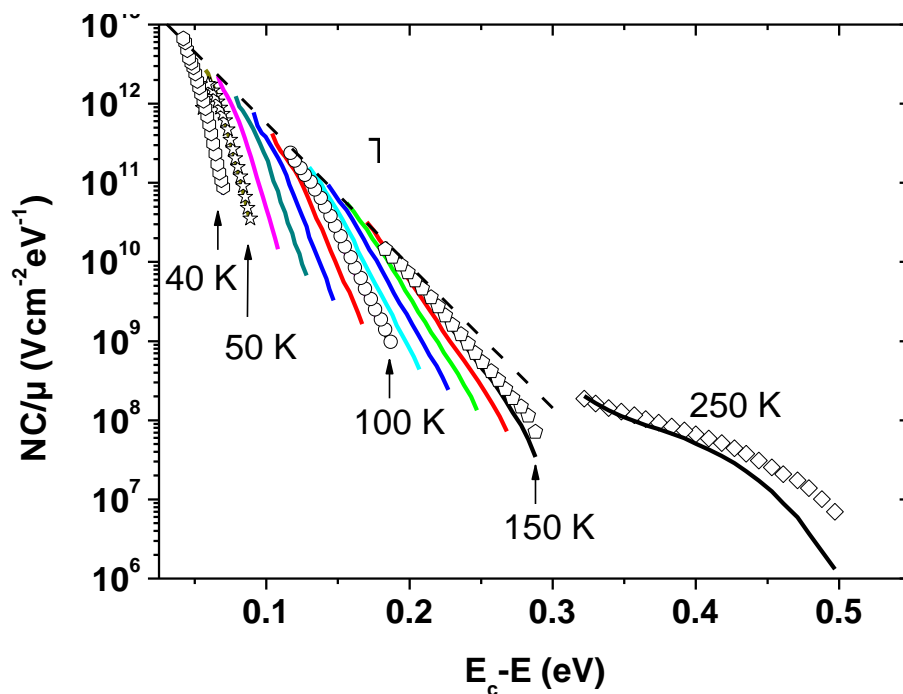


Figure 5.13 : Densité des états reconstruite à partir des données expérimentales de PCM sur un échantillon en a-Si:H intrinsèque. Les traits en continu correspondent à un flux  $F_{dc} = 10^{15} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  et les symboles pour  $F_{dc} = 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  [4].

Nous observons que la densité des états reconstruite se compose surtout de segments de droites. Ces segments ressemblent à ceux que nous avons obtenus par simulation dans le cas où le processus de conduction par saut est dominant. Nous pouvons aussi remarquer que pour la température 100 K et pour des températures inférieures à cette valeur, il n'y a pas d'influence du flux sur la DOS. Ce résultat expérimental est aussi prévu par notre simulation dans le cas où le transport par saut est dominant. A 150 K et à la fréquence la plus basse, il y'a une augmentation par un facteur de 2 sur la densité des états reconstruite et calculée quand le flux a diminué par un facteur de 5, ceci indique que le processus de MT influence toujours sur le processus de transport.

Pour tester l'occurrence possible du processus de saut à haute température, l'expérience est effectuée à 250 K. A la fréquence basse, les résultats de la photoconductivité modulée entraînent une augmentation par un facteur de 5 de la densité des états reconstruite montrant que la contribution du processus de saut est petite [4].

**Références**

- [1] Fuhs, W. (2008) *J. Non Cryst. Solids* 354, 2067–2078.
- [2] Taylor, G. W., and Simmons, J. G. (1972) *J. Non Cryst. Solids* **8-10**, 940.
- [3] Tran, M. Q. (1995) *Phil. Mag. B* **72**. 35.
- [4] Longeaud, C., and Tobbeche, S. (2009) *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 045508.
- [5] Longeaud, C., and Kleider, J. P. (1992) *Phys. Rev. B* **45**, 11672.
- [6] Kleider, J. P., Longeaud, C., and Glodt, O. (1991) *J. Non Cryst. Solids* **137-138**, 447.

## Abstract

This work aims to study by computer simulation the modulated photoconductivity in hydrogenated amorphous silicon (a-Si: H) and therefore its usefulness in determining the gap density of localized states (DOS) of this material. This work is based on Multitrapping and Hopping transport mechanisms in the simulation of the modulated photoconductivity which takes account, of the temperature conditions, the density of states and the light excitation. Numerical simulation of the modulated photoconductivity (MPC) first requires the simulation of the steady state. For that, we started our work by simulating the steady state photoconductivity (SSPC). The SSPC curves as a function of temperature for an intrinsic sample are in good agreement with corresponding experimental results. The contributions of the two transport mechanisms (Multitrapping, Hopping) in SSPC as a function of temperature, density of states and light excitation are also discussed. The MPC simulation has allowed us to calculate the reconstructed DOS for different temperatures. The DOS curves obtained by the MPC simulation are in agreement with the MPC experimental results in a-Si: H. The introduced DOS and the light excitation effects on the two conduction processes (Multitrapping, Hopping) are also discussed in the MPC.

**Keywords:** Modulated Photoconductivity, a-Si: H, Multitrapping, Hopping.

## ملخص

يهدف هذا العمل إلى المحاكاة الرقمية للناقلية الضوئية المتناوبة للسيليسيوم المتبلور المهدرج (a-Si:H) و حسب فوائده في تحديد الكثافة للمواضع المتمركزة في فراغ هذا المعدن ، هذا العمل يتركز على طريقتين للنقل : نقل عن طريق الصيد بالفخ و النقل بالقفز بواسطة المحاكاة الرقمية للناقلية الضوئية المتناوبة (PCM) مع حساب شروط درجة الحرارة و كثافة المواضع الأصلية و التحريض الضوئي. أول ما تحتاج إليه المحاكاة الرقمية للناقلية الضوئية المتناوبة هو المحاكاة في النظام المستمر. لأجل هذا بدأنا عملنا بالمحاكاة الناقلية الضوئية في النظام المستمر. وجدنا أن نتائج المنحنيات (PCM) للعينة الأصلية بدلالة درجة الحرارة المتحصل عليها عن طريق المحاكاة متوافقة مع النتائج التجريبية. مساهمة الطريقتين للنقل (الصيد بالفخ ، القفز) في الناقلية الضوئية المستمرة بدلالة درجة الحرارة ، كثافة المواضع و التحريض الضوئي هي كذلك مفحوصة ، المحاكاة الرقمية للناقلية الضوئية المتناوبة تسمح لنا بحساب الكثافة المتجددة لمختلف درجات الحرارة ، تأثير كثافة المواضع الأصلية و التهيج الضوئي على المنوالين للنقل (الصيد بالفخ ، القفز) هي كذلك مفحوصة في الناقلية الضوئية المتناوبة ، منحنيات الناقلية الضوئية المتناوبة المتحصل عليها عن طريق المحاكاة توافق النتائج التجريبية للناقلية الضوئية المتناوبة للسيليسيوم المتبلور المهدرج.

كلمات المفتاح : الناقلية الضوئية المتناوبة ، (a-Si:H) ، "الصيد بالفخ" ، "القفز"

# **Introduction générale**



# **Chapitre 1**

## **Propriétés du silicium amorphe**

## **Chapitre 2**

# **Mécanisme de conduction dans les semiconducteurs amorphes**

# **Chapitre 3**

**Technique du photocourant modulé et  
calcul de la DOS dans le gap**

# **Chapitre 4**

## **Simulation numérique de la photoconductivité modulée**

# **Chapitre 5**

## **Résultats et discussions**

# **Conclusion générale**

## Conclusion

Le travail effectué dans le cadre de ce mémoire avait pour objectif principal la simulation numérique de la photoconductivité en régime stationnaire et modulée dans le silicium amorphe hydrogéné a-Si:H en considérant les deux processus de phototransport des photoporteurs par les deux mécanismes de multi-piégeage et de saut et la détermination de la densité des états dans ce matériau.

Après avoir rappelé certaines propriétés électroniques et optiques du silicium amorphe hydrogéné a-Si:H telles que la structure atomique et électronique, nous avons présenté une étude du modèle de la technique de la photoconductivité modulée qui est développé pour la détermination de la distribution de la densité des états dans l'a-Si:H. Nous avons également décrit le concept de "multitrapping" et de saut dans les semiconducteurs amorphes. La structure électronique utilisée dans la simulation numérique comprend deux densités des états de la QBC et la QBV de formes exponentielles et deux distributions gaussiennes des états profonds. La photoconductivité étant une fonction de plusieurs processus, génération, recombinaison, piégeage et transport, les processus de conduction s'effectuent à travers les états étendus avec le processus de multi-piégeage par les états localisés et par le mécanisme de saut à travers les états localisés. La recombinaison des électrons s'effectue dans les états des queues de bandes et les états profonds comme il y'a des transitions de "multitrapping" et des transitions de saut dans les états localisés. Le régime stationnaire et le régime modulé sont simulés par les équations de continuité, les équations de "multitrapping" décrivant le processus de "multitrapping" et de saut ensemble. Après une discrétisation uniforme du 'gap' en plusieurs niveaux d'énergie discrets très proches les uns des autres, nous avons abouti à deux systèmes d'équations discrétisées. Le premier système d'équations pour le régime stationnaire est non linéaire tandis que le deuxième pour le régime modulé est linéaire. La résolution du premier système a nécessité l'emploi d'une méthode d'analyse numérique de Newton Raphson. Le programme de calcul par le logiciel Matlab a permis de simuler la photoconductivité en fonction de la température en régime stationnaire et la photoconductivité modulée.

La dépendance de la PCS de la température reproduit bien les observations expérimentales telles que la région où la PCS est approximativement constante à très basses températures suivie par une région où la photoconductivité augmente de plusieurs ordres de grandeurs pour les basses et moyennes températures et une région du thermal quenching observée à hautes températures.

La simulation numérique nous a permis d'étudier les contributions relatives à la conduction dans les états étendus par le processus de "multitrapping" et la conduction à travers les états localisés par le mécanisme de saut. Les résultats ont montré que le mécanisme de conduction de saut est dominant pour les très faibles températures et que le processus de transport de "multitrapping" est dominant pour les hautes températures dans le silicium amorphe hydrogéné. Nous avons également examiné les contributions des deux mécanismes de transport ("multitrapping", saut) dans la PCS pour différentes densités des états et pour différentes intensités de la lumière appliquée. Nous avons trouvé que plus la densité des états augmente, plus la température à partir de laquelle l'influence du processus de saut dans la conduction augmente aussi. Nous avons également abouti à une valeur constante de  $\gamma$  ( $\gamma \cong 1$ ) à basses températures montrant que la conduction est dominée par le processus de saut pour les basses températures. Ce résultat est aussi confirmé par des mesures expérimentales dans la littérature.

La simulation numérique de la photoconductivité modulée nous a permis de calculer la DOS. Nous avons donné une description des courbes de la DOS reconstruite pour différentes températures. Nous avons analysé l'effet de la densité des états introduite et l'effet de l'excitation de la lumière sur les deux processus de conduction ("multitrapping", saut). Les résultats montrent que l'effet du mécanisme de saut sur la photoconductivité modulée se manifeste par l'apparition des segments ou des queues. Avec l'accroissement de la densité des états, la température de la contribution du saut sur la photoconductivité modulée augmente et par conséquent il y a élargissement de la région où le processus de saut est influençant sur la photoconductivité modulée. Le processus de saut est de plus en plus dominant avec l'accroissement de la DOS en régime alternatif comme pour le régime stationnaire. L'influence du flux lumineux sur la photoconductivité modulée est très perceptible dans le cas du transport par MT seul. Ce résultat est comme celui obtenu par simulation et par mesure existant dans la littérature. Lorsque le processus de saut est pris en compte, le flux lumineux a une influence sur la partie de la DOS où le processus de MT est dominant, par contre son influence est petite dans la région de la DOS où le processus de saut est dominant. Nous avons conclu que le flux lumineux a peu d'influence sur la MPC dont le processus de saut est dominant tandis que son influence est très nette sur la MPC où le processus de MT est le prédominant. Ce résultat est aussi en accord avec les résultats expérimentaux de la MPC en basses températures dans l'a-Si :H.