



N° d'ordre : 03/2005-M/PH

**UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
"HOUARI BOUMEDIENNE"
U.S.T.H.B**

FACULTE DE PHYSIQUE

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MAGISTER

EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique des Matériaux

Par :

Affia ZIKEM

SUJET

**Simulation numérique de dispositifs à
multicouches à base de silicium amorphe
hydrogéné et de ses alliages**

Soutenu publiquement le : 19/01/2005, devant le jury composé de :

M. Mohamed FELLAH	Professeur	Président
M. Moussa AOUCHE	Professeur	Directeur de thèse
M. Fouad BOUBNIDER	Professeur	Examineur
Mme Abba RAHAL	Maître de conférence	Examineur
Mme Tania SMAÏ L	Chargée de cours	Examineur

Remerciements

Le travail présenté dans ce manuscrit a été effectué au sein de l'équipe « Couches Minces et Semiconducteurs » du laboratoire de Physique des Matériaux de la Faculté de Physique, de l'Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumedienne (USTHB) d'Alger.

J'adresse mes vifs remerciements à M. M. AOUCHER, professeur à l'USTHB, qui m'a guidée et conseillée durant toute la préparation de ce travail.

Je tiens à remercier vivement M. M. FELLAH, professeur à l'USTHB, d'avoir accepté de présider le jury de cette thèse.

Mes remerciements vont également à M. F. BOUBNIDER, professeur à l'USTHB, Mme A. RAHAL, maître de conférence à l'USTHB, et Mme T. SMAÏ L, chargée de cours à l'USTHB, pour avoir accepté de participer au jury.

Je remercie également tout les membres de l'équipe couches minces et semiconducteurs pour le soutien et l'encouragement qu'ils m'ont apporté.

Je remercie enfin tout ceux qui m'ont aidé, de près ou de loin, à la réalisation de ce travail.

Sommaire

Introduction.....	4
-------------------	---

Chapitre I : Description des matériaux

I.1 Arrangement atomique	6
I.1.1 Le silicium amorphe	6
I.1.2 Le silicium amorphe hydrogéné	6
I.1.3 L'alliage a-SiGe:H	7
I.1.4 Effet du dopage	7
I.2 Densité d'états	7
I.3 Absorption optique	9
I.4 Applications des multicouches à base de a-Si:H et de ses alliages	12
I.4.2 Les cellules solaires	13
I.4.3 Les photodétecteurs en couches minces	14

Chapitre II : Modélisation

II.1 Modèle de densité d'états utilisé dans la simulation.....	17
II.2 Recombinaison	18
II.3 Densité de charge	26

Chapitre III : Résolution des équations de transport

III.1 Equations de transport.....	29
III.2 Procédure de résolution numérique d'une équation différentielle du second ordre non linéaire	31
III.2.1 Discrétisation suivant le schéma des différences finies centrées.....	31
III.2.2 Linéarisation	32
III.2.3 Résolution par l'algorithme de Gauss.....	33
III.3 Résolution du système d'équations de transport dans le cas d'une homostructure PIN	35
III.3.1 Calcul des paramètres du matériau à l'équilibre thermodynamique	38

III.3.2 Concentration des porteurs de charges	38
III.3.3 Maillage de la structure	39
III.3.4 Conditions aux limites	39
III.3.5 Ecriture matricielle de l'équation de Poisson.....	40
III.3.6 Ecriture matricielle de l'équation de continuité des électrons	43
III.3.7 Ecriture matricielle de l'équation de continuité des trous	45
III.4 Résolution du système d'équations de transport dans le cas d'une hétérostructure PI ₁ I ₂ N.....	47
III.4.1 Condition de passage à l'hétéroface pour l'équation de Poisson	48
III.4.2 Condition de passage à l'hétéroface pour l'équation de continuité des trous.....	49
III.4.3 Condition de passage à l'hétéroface pour l'équation de continuité des électrons.....	52

Chapitre IV : Description des résultats de la simulation

IV.1 Paramètres du modèle de la densité d'états du a-Si:H.....	54
IV.2 Homostructure PIN	55
IV.2.1 Profils des bandes et distribution des charges électriques	56
IV.2.2 Effet de la polarisation.....	68
IV.2.3 Effet de la modification des paramètres de la lumière	70
IV.2.4 Effet de la température	75
IV.2.5 Effet de quelques paramètres du modèle de la densité d'états	77
IV.2.6 Effet des paramètres de la structure: les paramètres géométriques, les dopages et les vitesses de recombinaison.....	83
IV.2.7 Comparaison entre les structures PIN et NIP	99
IV.3 Vérification de la condition de passage au niveau de l'hétérojonction	102
IV.4 Hétérostructure PI ₁ I ₂ N.....	106
IV.4.1 Description de la structure	106
IV.4.2 Spectres d'absorption du a-Si:H et du a-SiGe:H.....	107
IV.4.3 Caractéristique courant-énergie de photons	110
IV.4.4 Profil de la photogénération et profil du champ électrique	112

Chapitre V : Récapitulatif et discussion

V.1 Comparaison entre les structures PIN et NIP.....	116
--	-----

V.2 Homostructure PIN	116
V.2.1 Effet de quelques paramètres du modèle de la densité d'états	116
V.2.2 Effet des paramètres géométriques et des dopages.....	117
V.3 Hétérostructure PI_1I_2N	118
V.4 Prévion du comportement de la réponse spectrale d'une hétérostructure formée de deux PIN en configuration tête-bêche	119
Conclusion.....	120
Références	122

Le silicium amorphe hydrogéné peut être déposé sur de grandes surfaces, à des faibles températures de dépôt et avec un faible coût. Ceci a motivé de grands progrès, aussi bien sur le plan fondamental que sur le plan technologique.

Le silicium amorphe hydrogéné et ses alliages, particulièrement l'alliage silicium carbone et l'alliage silicium germanium, possèdent des propriétés optiques intéressantes, notamment leur fort coefficient d'absorption optique et sa variation en fonction de l'énergie des photons ($h\nu$). Ces propriétés optoélectroniques ont été exploitées dans le domaine photovoltaïque et dans le domaine de l'imagerie à grande surface. La détection de rayonnements électromagnétiques s'étend sur les rayons X, les ultraviolets, le visible et l'infrarouge. Les cellules photovoltaïques et les détecteurs de rayonnements électromagnétiques sont des dispositifs à multicouches. La plupart de ces multicouches sont basées sur la structure PIN qui est constituée d'une couche dopée P, d'une couche non dopée I et d'une couche dopée N.

Le but de notre travail est de simuler les propriétés optoélectroniques de deux types de structures : l'homostucture PIN en silicium amorphe hydrogéné et l'hétérostructure PI_1I_2N . Dans la structure PI_1I_2N , la couche P et la couche I_1 sont en silicium amorphe hydrogéné, tandis que la couche I_2 et la couche N sont formées de l'alliage silicium germanium. Nous étudions ces deux structures à l'équilibre thermodynamique et hors équilibre. Nous nous sommes restreint au cas du régime stationnaire (régime permanent).

Dans le présent manuscrit, le chapitre I présente une description du silicium amorphe hydrogéné ainsi que ses applications en tant que matériau de base. En particulier, nous décrivons les cellules solaires et les photodétecteurs en expliquant leurs principes de fonctionnement.

Dans le chapitre II, nous décrivons le modèle de densité d'état utilisé dans la simulation numérique ainsi que le modèle de recombinaison adopté.

Dans le chapitre III, nous exposons, en premier lieu, les équations de transport ainsi que les conditions aux limites et les conditions de passage, suivies par la procédure utilisée pour la résolution numérique d'une équation différentielle du second ordre non linéaire dans un espace limité. Nous passons, ensuite, à l'application de cette procédure à la résolution des équations de transport dans le cas de :

1. Une homostructure PIN
2. Une hétérostructure PI_1I_2N

Nous avons développé ainsi deux programmes de calcul : « programme homostructure » et « programme hétérostructure ».

Le chapitre IV est consacré à la présentation et à la description des résultats des deux programmes de simulation développés. Dans la première partie, nous exploitons le « programme homostructure ». Nous discutons les profils des bandes énergétiques, le profil de la densité de charge, le profil du champ électrique et le profil du taux de recombinaison. Ensuite, nous étudions l'effet de la variation de quelques paramètres externes (température, lumière et polarisation), des paramètres de la structure et de quelques paramètres de la DOS sur le comportement de l'homostructure PIN. Dans la deuxième partie, nous effectuons une comparaison entre les deux programmes de calcul dénommés « programme Homostructure » et « programme hétérostructure » afin de valider la condition de passage appliquée à l'hétérostructure. Dans la troisième partie, nous étudions l'hétérostructure PI_1I_2N , composée d'une première partie (PI_1) en $\alpha\text{-Si:H}$ et d'une deuxième partie (I_2N) en $\alpha\text{-SiGe:H}$. Nous examinons la réponse spectrale dans différents cas de polarisation. Nous avons essayé d'expliquer son comportement en étudiant le profil du champ électrique. Ce qui nous offre la possibilité de comprendre les performances de la structure vis-à-vis de la détection de la couleur.

La possibilité de dépôt du a-Si:H sur de grandes surfaces à de faibles températures de dépôt et avec un faible coût a stimulé une recherche intense et approfondie.

Les propriétés électroniques et optoélectroniques d'un matériau solide dépendent de la distribution des états électroniques. Dans le cas des matériaux amorphes, on trouve une densité d'états (Density Of States : DOS) dans le gap qui est le résultat de l'arrangement atomique du matériau.

De nombreux travaux sur les matériaux amorphes sont consacrés aux modèles de densité d'états, aussi bien sur le plan expérimental en vue d'expliquer les propriétés du matériau, que sur le plan théorique afin de simuler ces propriétés.

I.1 Arrangement atomique

I.1.1 Le silicium amorphe

La nature covalente de la liaison Si-Si et le caractère tétraédrique de la liaison sont maintenus dans le silicium amorphe (a-Si), d'où la conservation de l'ordre à courte distance, à partir de quelques distances interatomiques, l'arrangement périodique disparaît dans le silicium amorphe. Ce désordre crée des contraintes qui se manifestent par la présence de liaisons non satisfaites. Des mesures de résonance paramagnétiques électroniques ont montré que le nombre de liaisons brisées atteint 10^{20} liaisons par cm^3 [1,2]. Cet aspect général de la structure est confirmé par les techniques de diffraction des rayons X et des électrons [3,4].

I.1.2 Le silicium amorphe hydrogéné

Le nombre très élevé de liaisons libres dans le a-Si se répercute négativement sur sa qualité électronique. L'incorporation de l'hydrogène (de 5 à 20%) dans le matériau permet de saturer un grand nombre de liaisons non satisfaites. Ceci entraîne la relaxation du « réseau amorphe » [5]. La concentration des liaisons pendantes diminue d'une façon considérable à quelques 10^{15} liaisons par cm^3 . L'intérêt du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) est apparu, et encore plus depuis que la possibilité du dopage a été démontrée [6].

I.1.3 L'alliage a-SiGe:H

L'alliage amorphe peut être plus ou moins désordonné par rapport au matériau de base. La DOS peut alors prendre une forme semblable à celle du matériau de base.

Le gap de l'alliage silicium-germanium (a-SiGe:H) est plus faible que celui du a-Si:H. Selon la concentration du germanium, la largeur du gap varie entre 0,9 et 1,8 eV [7].

I.1.4 Effet du dopage

Pour les semiconducteurs amorphes, ce n'est qu'en 1975 qu'on a montré la possibilité de leur dopage au bore (B), pour le type P, ou au phosphore (P), pour le type N.

Les dopants ont pour effet d'introduire des états localisés peu profonds dans le gap jouant le rôle de donneurs (proches du bas de la bande de conduction) dans le type N, ou d'accepteurs (proches du haut de la bande de valence) dans le type P.

La variation de la concentration des atomes dopants ionisés en fonction de la concentration des atomes introduits, mesurée expérimentalement, n'est pas linéaire.

I.2 Densité d'états

Dans les matériaux cristallins la bande de conduction et la bande de valence sont séparées par une bande interdite.

La conservation de l'ordre à courte distance dans le 'réseau' du silicium amorphe hydrogéné entraîne la validité de la notion de bandes. Ceci nous permet de parler de bande de valence et de bande de conduction dans le a-Si:H.

Néanmoins, les défauts de structure dans le a-Si:H introduisent des états énergétiques localisés dans le gap. Pour les semiconducteurs amorphes, ce dernier porte alors le nom de «gap de mobilité» de largeur $E_{gm} = E_{cm} - E_{vm}$, E_{cm} et E_{vm} sont les énergies critiques qui marquent la variation brutale de la mobilité : la mobilité des électrons augmente de plusieurs ordres de grandeurs quand on passe des énergies $E < E_{cm}$ aux énergies $E > E_{cm}$, la mobilité des trous augmente également de plusieurs ordres de grandeurs quand on passe des énergies $E > E_{vm}$ aux énergies $E < E_{vm}$. Ce modèle de variation de la mobilité a été proposé par Mott [8] et Cohen [9] et il permet d'esquisser un modèle de DOS.

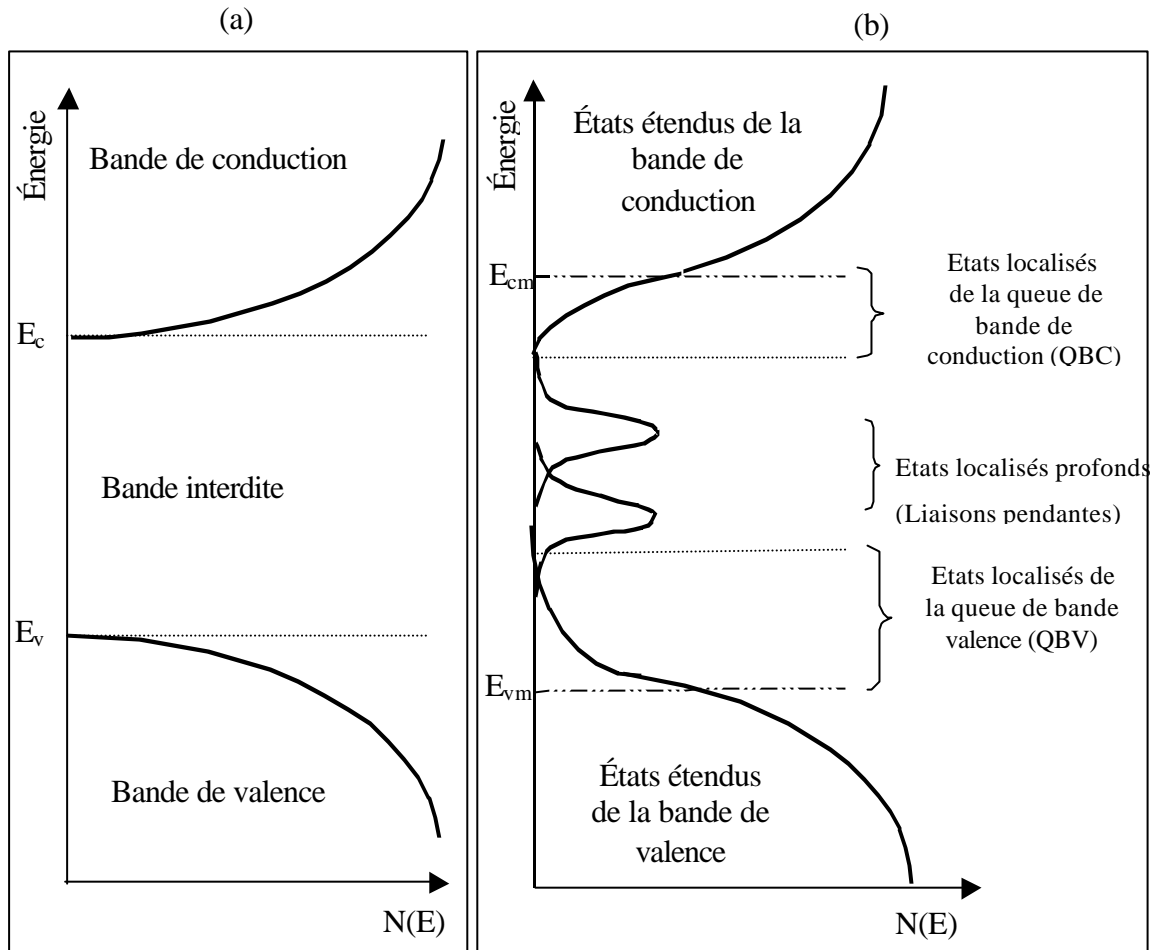


Figure I. 1 (a) Densité d'états dans un semiconducteur cristallin parfait. (b) Densité d'états dans les semiconducteurs amorphes (Modèle de Mott et Davis).

Le modèle de Mott et Davis [10] est le modèle généralement adopté pour les matériaux amorphes (Figure.I. 1-b). On y distingue deux ensembles d'états :

- Les bandes d'états étendus : elles concernent la bande de conduction qui représente les états étendus pour les électrons pour $E > E_{cm}$ et la bande de valence qui représente les états étendus pour les trous pour $E < E_{vm}$.
- Les états localisés : dont les niveaux d'énergie sont situés entre E_{vm} et E_{cm} ($E_{vm} < E < E_{cm}$). On distingue les états localisés proches des bords de bandes des états étendus et les états localisés profonds situés loin des bords de bandes :

(a) États localisés proches des bords de bandes : Queues de bandes

La queue de bande de valence (QBV) et la queue de bande de conduction (QBC) sont la conséquence des distorsions des liaisons (fluctuation des longueurs de liaisons et

des angles de liaisons). Elles se prolongent sous forme d'une décroissance dans le gap de mobilité (*Figure I.1-b*).

(b) Etats localisés loin des bords de bandes : Défauts profonds

Ces états sont dus aux liaisons non satisfaites. Ces états sont parfois appelés états profonds du fait qu'ils se trouvent loin des bords de bandes (*Figure I.1-a*). la liaison pendante peut prendre trois états de charge :

- un état de charge électrique neutre (D^0) : liaison pendante à un électron,
- un état de charge électrique positif (D^+) : liaison pendante vide,
- un état de charge électrique négatif (D^-) : deux électrons sur la liaison pendante.

I.3 Absorption optique

L'interaction d'une onde électromagnétique, d'énergie de photons $h\nu$, avec la matière, supposée homogène (*Figure I.2*), se manifeste par une décroissance exponentielle du nombre de photons pénétrant le matériau. Cette décroissance avec la profondeur x suit la loi de Lambert-Bouguert :

$$F(x) = F_0(1 - R)\exp(-ax) \tag{I-1}$$

où

- F_0 : flux de photons incidents,
- R : coefficient de réflexion à la surface du matériau,
- a : coefficient d'absorption optique du matériau,
- x : profondeur.

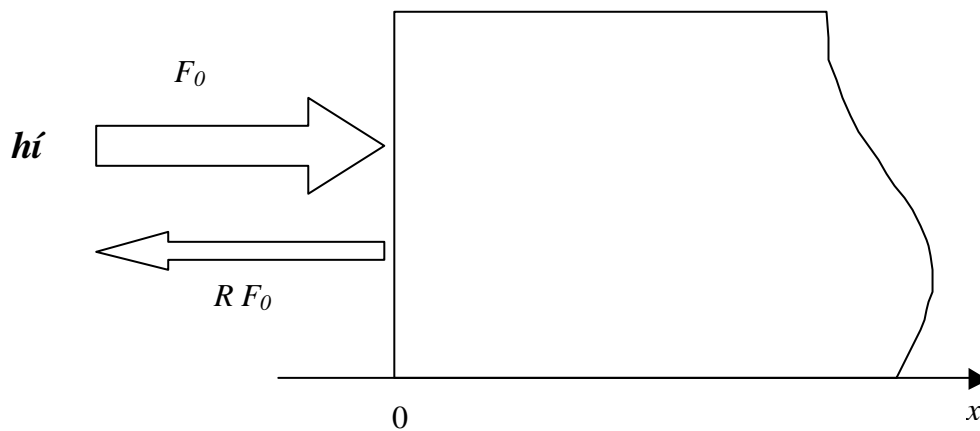


Figure I. 2 Schéma descriptif de l'éclairage du matériau en surface par une lumière d'énergie de photons $h\nu$

Le taux de génération de paires electron-trou, à une profondeur x à l'intérieur du matériau, pour un matériau homogène éclairé uniformément sur la surface s'écrit:

$$G(x) = \mathbf{ah}F(x) \quad (\text{I-2})$$

où

\mathbf{h} : rendement quantique défini comme étant la probabilité pour qu'un photon crée une paire electron-trou libre. \mathbf{h} est souvent pris égal à l'unité.

Le spectre d'absorption optique

Les résultats expérimentaux montrent une allure typique du coefficient d'absorption optique (\mathbf{a}) du a-Si:H en fonction de $h\nu$ analogue à celle présentée sur la *Figure I.3*. Nous pouvons distinguer sur ce spectre trois comportements différents :

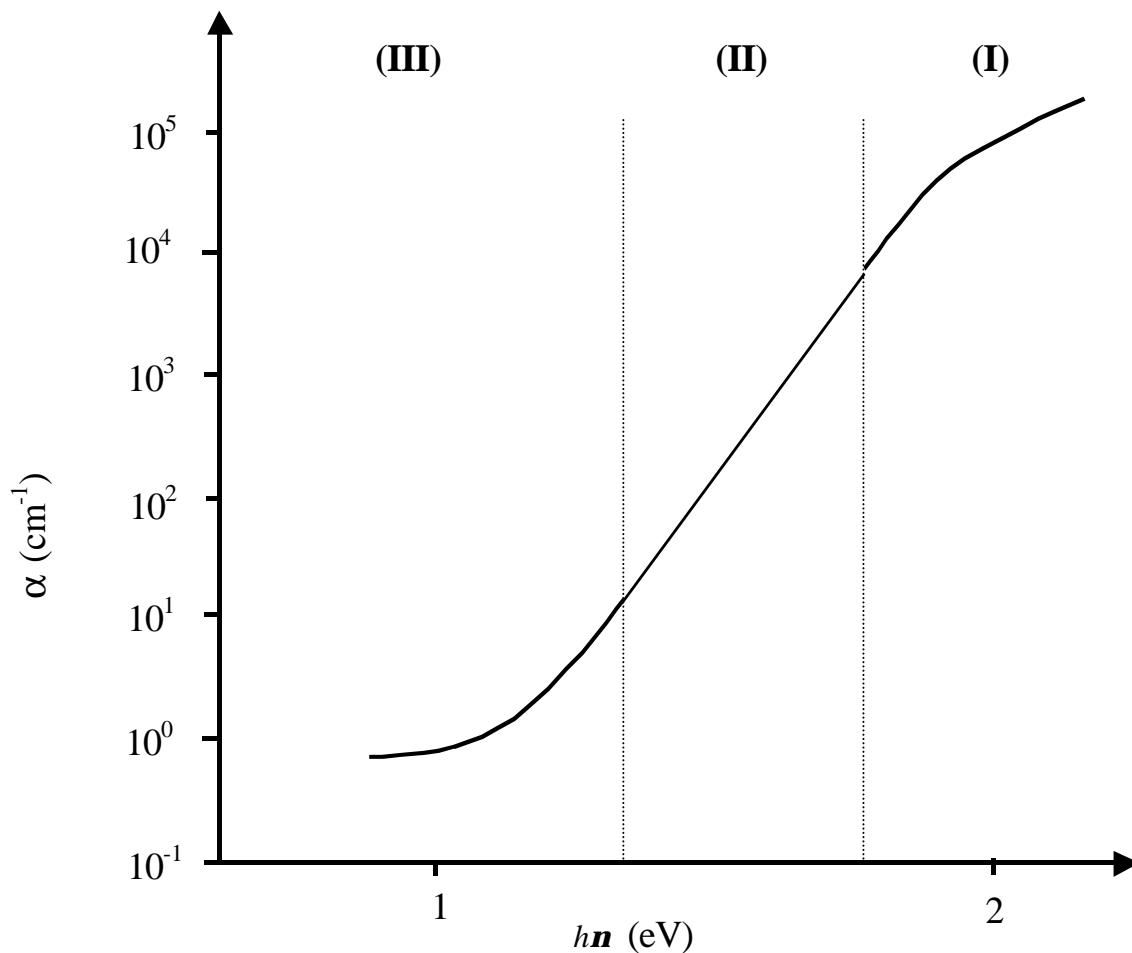


Figure I.3 Spectre d'absorption typique des semiconducteurs amorphes.

(I) Zone de forte absorption:

Le mécanisme d'absorption prédominant dans cette gamme d'énergie induit des transitions de la bande de valence à la bande de conduction (dites transitions bande à bande).

Le comportement de α dans cette zone est décrit par la relation de Tauc:

$$(\alpha \cdot h\nu)^{\frac{1}{2}} = B(h\nu - E_g) \quad (\text{I-3})$$

où

E_g : gap optique de Tauc [11],

B : constante indépendante de l'excitation lumineuse directement liée à la structure du matériau.

(II) Zone de moyenne absorption

L'absorption dans cette zone est due, essentiellement, aux transitions des électrons de la queue de bande de valence à la bande de conduction, d'une part, et aux transitions des électrons de la bande de valence à la queue de bande de conduction, d'autre part.

L'expression du coefficient d'absorption d'après les travaux d'Urbach est la suivante:

$$\alpha(h\nu) = \alpha_0 \exp\left(\frac{h\nu}{E_0}\right) \quad (\text{I-4})$$

où

E_0 : énergie d'Urbach [12].

(III) Zone de faible absorption

Les transitions qui caractérisent l'absorption dans cette gamme se passent entre les états profonds des liaisons pendantes et les états étendus de la bande de conduction ou de la bande de valence.

I.4 Applications des multicouches à base de a-Si:H et de ses alliages

Les semiconducteurs sont généralement des matériaux très sensibles à l'éclairement, au champ électrique, et au gradient de température. C'est cette forte réactivité qui est mise à profit dans les composants à semiconducteurs d'une façon générale.

Un semiconducteur pur ne peut pas constituer en lui-même un dispositif électronique. C'est avec l'assemblage de couches dopées, d'alliages, d'isolants, ou de métaux que sont réalisés les différents types de composants électroniques. On distingue deux types de structures :

Homostructures: les couches sont des matériaux semiconducteurs de même nature. La différence provient du dopage.

Hétérostructures: les couches sont semiconductrices mais elles sont de natures différentes.

La publication du premier résultat sur le dopage du a-Si:H par Spear, Le Comber et Madan en 1975 [6] a suscité de nombreux travaux dans le domaine des applications du a-Si:H. En 1976, Carlson et Wronski [13] ont réussi la première cellule photovoltaïque en a-Si:H dans la structure PIN. Depuis, le a-Si:H a suscité d'autres applications. La possibilité du dépôt uniforme sur de grandes surfaces a été exploitée pour développer des transistors à effet de champ en couches minces (TFT) [14] qui sont utilisés dans les affichages et le contrôle des écrans plats à cristaux liquides [15]. Le premier circuit intégré à base du a-Si:H a été rapporté en 1980 par Matsumura et Hayama de l'Institut de Tokyo de Technologie. Ce circuit intégré utilise les TFT en a-Si:H [16]. La réponse spectrale et le temps de réponse du a-Si:H ont été exploités dans le domaine de l'imagerie à grandes surfaces. La détection de rayonnements électromagnétiques s'étend sur les rayons X, les ultraviolets, le visible et l'infrarouge. Des détails sur diverses applications peuvent être trouvés dans d'excellents livres [17-20].

Parmi ces applications, les cellules solaires et les détecteurs de rayonnements constitués de multicouches basées sur la photodiode PIN. La structure PIN est constituée d'une couche dopée P, d'une couche non dopée I et d'une couche dopée N.

I.4.1 Les cellules solaires

Une cellule solaire à semiconducteur est un dispositif permettant de débiter un courant électrique lorsqu'il est exposé à la lumière. Le fonctionnement d'une cellule solaire peut se résumer en deux étapes:

1. L'absorption des photons dans le semiconducteur génère des électrons et des trous libres (*paragraphe I.3*).

2. Les électrons et les trous photogénérés sont séparés et collectés sur des contacts ohmiques. La séparation des porteurs de charges est assurée par un champ électrique.

Dans le cas des semiconducteurs monocristallins, ceci peut être réalisé par une jonction PN. La longueur de diffusion est suffisamment élevée pour permettre aux porteurs générés, loin de la jonction, de diffuser jusqu'à celle-ci. Où ils seront séparés par le champ électrique interne de la jonction PN.

Dans le cas du a-Si:H, ses qualités optoélectroniques ont conduit à proposer la structure PIN (*Figure I.4*) pour de meilleures performances. Les épaisseurs des couches dopées doivent être faibles car la longueur de diffusion des porteurs est faible. L'introduction d'une couche supplémentaire intrinsèque (I) en a-Si:H entre les couches dopées (N et P) permet d'élargir le champ électrique interne de la jonction et de favoriser la collection des charges. Cette même couche intrinsèque sert, en même temps, de siège de génération de paires électrons-trous.

Pour absorber le maximum du spectre solaire, les cellules solaires à base de a-Si:H peuvent être améliorées en empilant plusieurs cellules du type PIN de faibles épaisseurs et avec des gaps optiques différents (*Figure I.5*) (cellules multijonctions) [20]. On obtient des structures de type PI_1NPI_2N , et les structures de type PI_1I_2N . Un ensemble de travaux ont montré que les cellules multijonctions montrent plus d'efficacité de conversion: l'efficacité de conversion théorique de la cellule du type PIN atteint 15% tandis que pour une structure du type $PI_1NPI_2NPI_3N$, utilisant le aSiGe:H, le coefficient de conversion calculé atteint 20% [20]. Elles sont aussi plus stables que les cellules unijonction [21-23].

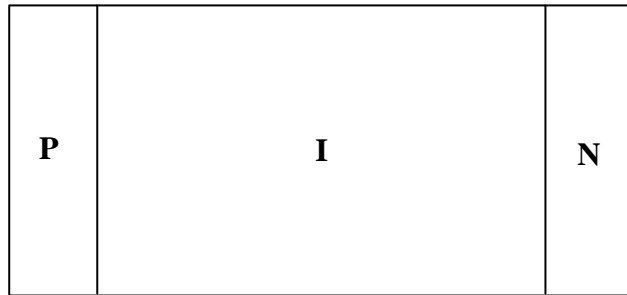


Figure I. 4 Schéma d'une cellule solaire unijonction en a-Si:H.

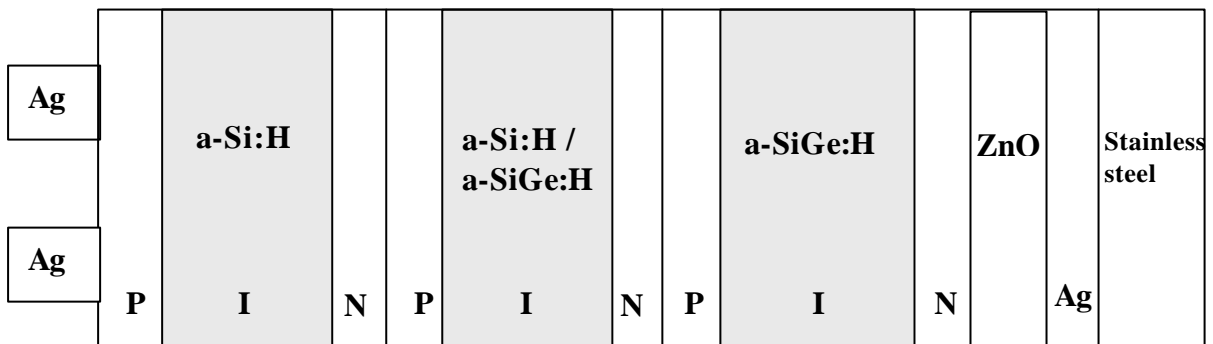


Figure I. 5 Schéma d'une cellule solaire multijonction en a-Si:H et en a-SiGe:H sur substrat inox. [18].

Les cellules solaires en a-Si:H bénéficient d'un avantage certain. Elles peuvent être réalisés sur des substrats « bon marché ». Comme du plastique. Le silicium amorphe peut aussi être déposé sur des substrats en ruban.

I.4.2 Les photodétecteurs en couches minces

A. Les détecteurs noir & blanc (Photodiodes)

Les diodes PIN et NIP à base du a-Si:H sont préférables pour la détection noir&blanc. Elles montrent un faible courant d'obscurité et un faible temps de réponse.

La couche (I) est la région principale d'absorption du dispositif avec une épaisseur de quelques 1 000 Å à 10 000 Å, tandis que chacune des couches N et P ont seulement quelques 100 Å d'épaisseur.

B. Les détecteurs multicolores

Actuellement, les détecteurs en couches minces à base de a-Si:H sont les seuls dispositifs où la sensibilité spectrale peut être modifiée en variant la polarisation. Cet effet permet d'identifier différentes couleurs. Il est, en effet, possible de fabriquer un détecteur de couleur sans avoir recours à des filtres qui sont exigés dans les CCD (Charge Coupled Devices). Donc, au lieu de quatre cellules (pixels) (deux cellules sensibles à la couleur verte, une cellule sensible à la couleur rouge et une cellule sensible à la couleur bleu), une cellule multicouches en a-Si:H et ses alliages suffit pour identifier les trois couleurs. L'emplacement de chaque couche par rapport aux autres est contrôlé par deux effets :

- a) La variation du coefficient d'absorption (α) en fonction de la longueur d'onde (λ). En effet, plus l'énergie de photons est grande plus le coefficient d'absorption est grand (Voir *Figure I.3*).
- b) Le profil de la photogénération : pour les ondes de fortes énergies de photons, la majeure partie de la lumière est absorbée dans une région proche de la surface. Pour les ondes de faibles énergies de photons, la photogénération s'étend dans des régions plus profondes du dispositif.

On peut distinguer deux classes de détecteurs de couleurs : les détecteurs bipolaires et les détecteurs unipolaires.

Parmi les détecteurs bipolaires, nous citons les structures NI_1PI_2N et PI_1NI_2P . Ces deux structures se composent de deux diodes PIN dans une configuration « tête-bêche » (avec une couche commune au centre du dispositif). En changeant le signe de la polarisation du positif au négatif, la sensibilité de la diode NI_1PI_2N passe de la lumière bleue à la lumière rouge et verte [24]. Par conséquent, la structure NI_1PI_2N permet de distinguer deux couleurs. La séparation entre la lumière verte et la lumière rouge peut être réalisée par un dédoublement de la diode arrière en insérant une couche N additionnelle, ceci donne naissance à une structure de type $NI_1PI_2NI_3N$. Pour des tensions de polarisation légèrement négatives, la couche I_2 est activée et la structure entière $NI_1PI_2NI_3N$ est, donc, sensible à la lumière verte. Lorsque la polarisation devient fortement négative, c'est la couche I_3 qui devient active, elle correspond alors à la réponse de la couleur rouge [25]. La photodiode $NI_1PI_2I_3N$ est un autre dispositif bipolaire qui permet la détection de trois couleurs [26].

Tous les types de détecteurs bipolaires qui sont basés sur des diodes dans la configuration « tête-bêche » : NI_1PI_2N , $NI_1PI_2NI_3N$ et les structures de type $NI_1PI_2I_3N$,

montrent un comportement transitoire lent [27, 28]. Ce comportement transitoire lent est dû à la recharge de la couche P quand la polarisation ou l'éclairement change. Ce problème peut être surmonté si, dans la structure simple PIN, la couche I est remplacée par plusieurs couches I de matériaux différents. On trouve alors des structures de type PI_1I_2N , $PI_1I_2I_3N$. Elles fonctionnent seulement en polarisation inverse. Elles sont, donc, appelées « les détecteurs unipolaires ». Le fonctionnement en polarisation inverse, uniquement, fait qu'elles sont plus rapides car la nouvelle répartition des charges électriques se fait rapidement.

II.1 Modèle de densité d'états utilisé dans la simulation

Le modèle de densité d'états standard du a-Si:H est utilisé dans la simulation. Dans ce modèle, les queues de bandes se prolongent sous forme d'une décroissance exponentielle dans le gap de mobilité. En considérant le plus haut niveau de la bande de valence E_v comme origine des énergies, la densité d'états est alors donnée par :

Pour la QBC

$$N_{ct}(E) = N_{ct}^0 \exp[-(E_c - E)/kT_c] \quad (\text{II-1})$$

Pour la QBV

$$N_{vt}(E) = N_{vt}^0 \exp(-E/kT_v) \quad (\text{II-2})$$

où N_{ct}^0 et N_{vt}^0 : densités d'états en E_v et E_c respectivement.
 kT_c et kT_v : énergies caractéristiques de la QBC et de la QBV respectivement.

Les états profonds sont constitués de deux niveaux discrets corrélés : un niveau à E_{db} pour les états D^+ et D^0 , et un autre niveau à $(E_{db} + U)$ pour l'état D^- . U est appelée énergie de corrélation (*Figure II. 1*).

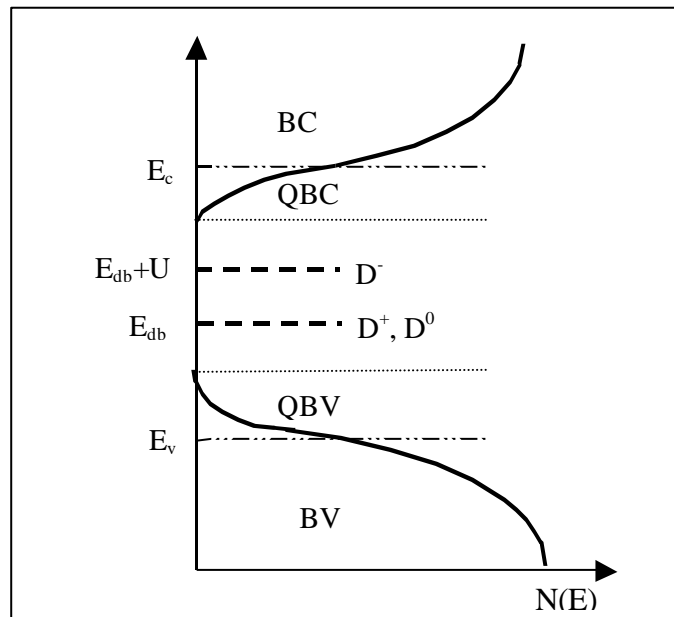


Figure II. 1 Le modèle de densité d'états utilisé dans la simulation.

II.2 Recombinaison

Nous venons de décrire le modèle la densité d'états adopté. Les états localisés interagissent avec les états étendus. Dans ce paragraphe nous décrivons ces interactions.

Schockley, Read et Hall ont étudié les transitions électroniques pour obtenir la fonction d'occupation dans le cas d'un centre monovalent (à deux états de charge) [29]. A partir de cette statistique, Simmons et Taylor [30] ont calculé la fonction d'occupation dans le cas d'une distribution continue d'états monovalents. Le modèle de Simmons et Taylor a été appliqué aux états des queues de bandes et a donné de bons résultats dans le cadre de l'étude de la photoconductivité [31,32].

Les liaisons pendantes introduisent un état bivalent à trois états de charge, qui nécessite une statistique différente de celle développée par Schockley, Read et Hall. Schockley et Last ont établi une statistique régissant les centres à plusieurs états de charge [33].

Dans ce paragraphe, nous décrivons préalablement la statistique de Schockley et Read et Hall, ensuite nous montrons son application au cas des queues de bandes. Nous passerons, ensuite, à la statistique régissant les liaisons pendantes.

II.2.1 Statistique de Shockley-Read-Hall

Considérons un état localisé monovalent situé en E_t et de concentration N_t . Ce niveau d'énergie a deux états de charge : neutre (0) quand il est vide et négatif (-) quand il est occupé par un électron. Sur la *Figure II. 2*, nous avons schématisé les quatre transitions possibles dans ce cas.

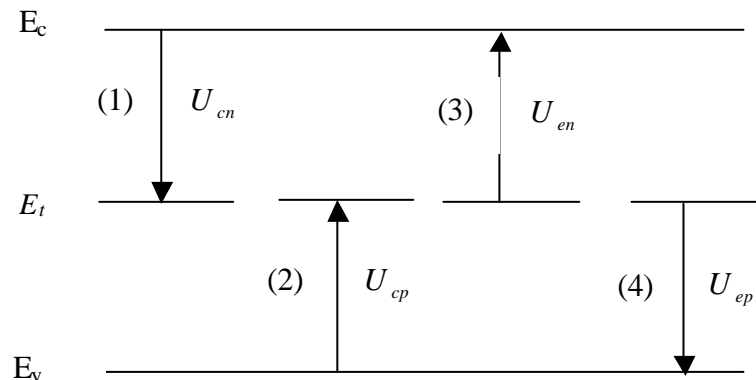


Figure II. 2 Représentation des transitions possibles sur un état monovalent.

Les taux des différentes transitions que l'on peut avoir peuvent être écrits comme suit :

$$(1) \text{ Capture d'un électron} \quad U_{cn} = nC_n(N_t - n_t) = nC_nN_t(1 - f_t) \quad (\text{II-3})$$

$$(2) \text{ Capture d'un trou} \quad U_{cp} = pC_p n_t = pC_p N_t f_t \quad (\text{II-5})$$

$$(3) \text{ Emission d'un électron} \quad U_{en} = n_t e_n = N_t f_t e_n \quad (\text{II-4})$$

$$(4) \text{ Emission d'un trou} \quad U_{ep} = (N_t - n_t)e_p = N_t(1 - f_t)e_p \quad (\text{II-6})$$

où

C_n (C_p) : probabilité de capture d'électrons de la bande de conduction (trous de la bande de valence). Ces grandeurs sont aussi appelées coefficients de capture et sont définies comme le produit de la vitesse thermique par la section de capture du centre,

e_n (e_p) : coefficient d'émission des électrons (trous) à partir du centre,

f_t : taux d'occupation du centre,

N_t : concentration totale des états sur le niveau E_t ,

$n_t = f_t N_t$: concentration des porteurs sur le niveau E_t ,

n (p) : concentration des électrons (trous) libres.

Le taux net de recombinaison des électrons (trous) sur un centre monovalent est donné par la différence entre le taux de capture et le taux d'émission d'un électron (trou) par ce centre. Ainsi le taux net de recombinaison des électrons et le taux net de recombinaison des trous, U_n et U_p , respectivement, s'écrivent:

$$U_n = U_{cn} - U_{en} = C_n N_t (1 - f_t) n - e_n N_t f_t \quad (\text{II-7})$$

$$U_p = U_{cp} - U_{ep} = C_p N_t f_t p - e_p N_t (1 - f_t) \quad (\text{II-8})$$

A l'équilibre thermodynamique (sans excitation externe), le nombre de porteurs captés par le niveau d'énergie E_t est égal au nombre de porteurs émis, d'où le taux de recombinaison des électrons et le taux de recombinaison des trous à l'équilibre sont nuls ($U_n^0 = U_p^0 = 0$). Les coefficients d'émission e_n et e_p peuvent être déduits, en fonction des coefficients de capture C_n et C_p , des relations suivantes :

$$e_n = C_n n_0 \frac{(1 - f_t^0)}{f_t^0} \quad (\text{II-9})$$

$$e_p = C_p p_0 \frac{f_t^0}{(1 - f_t^0)} \quad (\text{II-10})$$

$$f_t^0 = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_t - E_{f_0}}{kT}\right)} \quad (\text{II-11})$$

où

f_t^0 : fonction de Fermi-Dirac écrite pour l'énergie E_t ,

E_{f_0} : niveau de Fermi,

k : constante de Boltzman,

T : température.

$n_0(p_0)$: concentration des électrons (trous) libres à l'équilibre thermodynamique.

En remplaçant f_t^0 par son expression, (II-9) et (II-10) deviennent:

$$e_n = C_n n_l \quad \text{avec} \quad n_l = n_i \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT}\right)$$

$$e_p = C_p p_l \quad \text{avec} \quad p_l = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT}\right)$$

où

$n_i = \sqrt{n_0 p_0}$: concentration intrinsèque des porteurs,

E_i : milieu de la bande interdite.

D'où l'écriture des taux nets de recombinaison :

$$U_n = C_n [N_t (1 - f_t) n - N_t f_t n_l] \quad (\text{II-12})$$

$$U_p = C_p [N_t f_t p - N_t (1 - f_t) p_l] \quad (\text{II-13})$$

En régime stationnaire, nous avons $U_n = U_p$. Le taux de recombinaison U_t sur

le niveau E_t et sa fonction d'occupation sont alors donnés par :

$$U_t = N_t \frac{C_n C_p (np - n_i^2)}{C_n (n + n_l) + C_p (p + p_l)} \quad (\text{II-14})$$

$$f_t = \frac{n C_n + p_l C_p}{C_n (n + n_l) + C_p (p + p_l)} \quad (\text{II-15})$$

II.2.2 Modèle de recombinaison

La recombinaison directe n'est pas prise en considération à cause de la largeur importante du gap. Nous supposons que chaque état n'interagit qu'avec les deux bandes (on néglige les transitions entre les états localisés). Les transitions prises en compte sont schématisées sur la *Figure II. 3*.

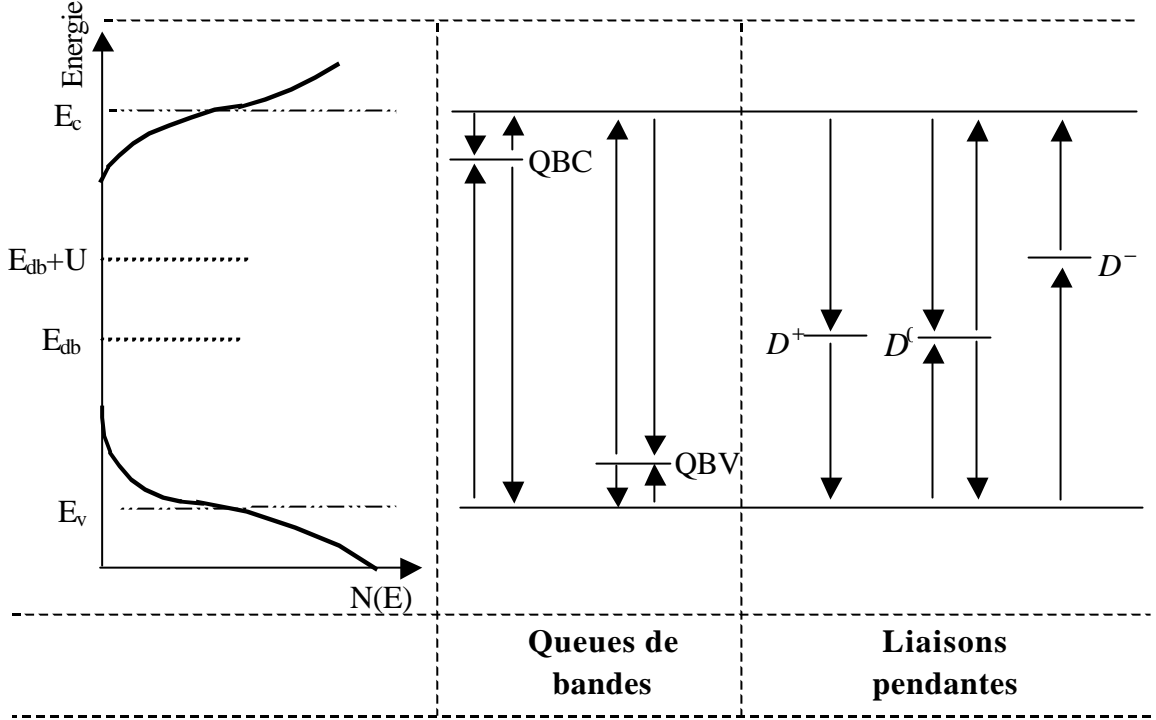


Figure II. 3 Les échanges de porteurs dans un modèle de recombinaison sur les liaisons pendantes et les états de queues de bandes.

A. La recombinaison sur les queues de bandes

En régime stationnaire, la fonction d'occupation est déduite de l'équation donnant la cinétique de la concentration des électrons sur un niveau E de la queue de bande Bt ($Bt = \text{QBC}$ ou QBV) :

$$\frac{d}{dt}[N_{Bt}(E)f_{Bt}(E)]dE = \{ nC_n^{Bt}(E)N_{Bt}(E)[1-f_{Bt}(E)] - n_l(E)C_p^{Bt}(E)N_{Bt}(E)f_{Bt}(E) + p_l(E)C_p^{Bt}(E)N_{Bt}(E)[1-f_{Bt}(E)] - pC_p^{Bt}(E)N_{Bt}(E)f_{Bt}(E) \} dE = 0 \quad (\text{II-16})$$

$$\text{avec} \quad n_l(E) = n_i \exp\left(\frac{E - E_i}{kT}\right) \quad \text{et} \quad p_l(E) = n_i \exp\left(\frac{E_i - E}{kT}\right)$$

où

n_i : concentration intrinsèque des porteurs, elle est donnée par l'expression $n_i = \sqrt{n_0 p_0}$ tel que $n_0(p_0)$ est la concentration des électrons (trous) libres à l'équilibre thermodynamique.

E_i : milieu de la bande interdite,

$C_n^{Bt}(E)$ et $C_p^{Bt}(E)$: coefficients de capture des électrons et des trous par le centre d'énergie E de la queue de bande B_t ,

$n(p)$: concentration des électrons (trous),

dE : intervalle d'énergie.

De l'équation (II-16), nous déduisons le taux d'occupation d'un état d'énergie E noté $f_{Bt}(E)$:

$$f_{Bt}(E) = \frac{C_n^{Bt}(E)n + C_p^{Bt}(E)p_l}{C_n^{Bt}(E)[n + n_l(E)] + C_p^{Bt}(E)[p + p_l(E)]} \quad (\text{II-17})$$

En étendant les équations fondamentales de la statistique de Shockley et Read et Hall au cas d'une distribution continue d'états, le taux net de recombinaison sur la queue de bande notée Bt s'écrit :

$$U_{Bt} = \int_{E_v}^{E_c} N_{Bt}(E) \frac{C_n^{Bt}(E)C_p^{Bt}(E)(np - n_i^2)}{C_n^{Bt}(E)[n + n_l(E)] + C_p^{Bt}(E)[p + p_l(E)]} dE \quad (\text{II-18})$$

Le rapport des coefficients de capture (C_n^{Bt}/C_p^{Bt}) peut être considéré comme constant, d'où :

$$U_{Bt} = \int_{E_v}^{E_c} N_{Bt}(E) \frac{C_n^{Bt} C_p^{Bt} (np - n_i^2)}{C_n^{Bt} n + C_p^{Bt} p + p} dE \quad (\text{II-19})$$

En supposant $T < T_{Bt}$ ceci est conforme avec les valeurs expérimentales de T_c et T_v , un calcul analytique de l'intégral utilisant le théorème des résidus, aboutit à :

$$U_{Bt} = \frac{C_n^{Bt} C_p^{Bt} (np - n_i^2)}{C_n^{Bt} n + C_p^{Bt} p} N_{Bt}^0 kT_{Bt} \exp \left[\frac{(-1)^{Bt} (E_{f0} - E_g)}{kT_{Bt}} \right] \left[\left(\frac{C_n^{Bt} n + C_p^{Bt} p}{C_n^{Bt} n_0} \right)^{T/T_{Bt}} - \left(\frac{C_n^{Bt} n + C_p^{Bt} p}{C_p^{Bt} p_0} \right)^{-T/T_{Bt}} \right] \quad (\text{II-20})$$

où

$n_0(p_0)$: concentration des électrons (trous) libres à l'équilibre thermodynamique du matériau.

avec $(-1)^{QBC} = 1$ et $(-1)^{QBV} = -1$

B. La recombinaison sur les liaisons pendantes

Sur la *Figure II.3*, nous avons représenté les différents échanges entre les états profonds, d'une part, et entre les états étendus (bande de conduction et bande de valence), d'autre part. Nous ne considérons pas les échanges entre ces états et les états des queues de bandes.

A l'équilibre thermodynamique, on définit les fonctions de distribution : f_0^+, f_0^0 et f_0^- représentant les probabilités pour que la liaison pendante soit dans l'état D^+, D^0 et D^- , respectivement. Elles s'écrivent ainsi [34] :

$$\begin{cases} f_0^+ = \left[1 + 2 \exp\left(\frac{E_{f_0} - E_{db}}{kT}\right) + \exp\left(\frac{2(E_{f_0} - E_{db}) - U}{kT}\right) \right]^{-1} \\ f_0^0 = 2f_0^+ \exp\left(\frac{E_{f_0} - E_{db}}{kT}\right) \\ f_0^- = f_0^+ \exp\left(\frac{2(E_{f_0} - E_{db}) - U}{kT}\right) \end{cases} \quad (\text{II-21})$$

En régime stationnaire, les équations donnant la cinétique des échanges des électrons et des trous dans les états D^+, D^0 et D^- sont :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(N_{db}f^+) &= U_3 + U_7 - U_1 - U_5 = 0 \\ \Rightarrow e_n^0 N_{db}f^0 + pC_p^0 N_{db}f^0 - nC_n^+ N_{db}f^+ - e_p^+ N_{db}f^+ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{II-22})$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(N_{db}f^-) &= U_2 + U_6 - U_4 - U_8 = 0 \\ \Rightarrow nC_n^0 N_{db}f^0 + e_p^0 N_{db}f^0 - e_n^- N_{db}f^- - pC_p^- N_{db}f^- &= 0 \end{aligned} \quad (\text{II-23})$$

Puisque $f^0 + f^+ + f^- = 1$ nous avons : $\frac{d}{dt}(N_{db}f^0) = -\left[\frac{d}{dt}(N_{db}f^+) + \frac{d}{dt}(N_{db}f^-) \right]$ La

résolution du système d'équations formé par ces trois équations nous donne :

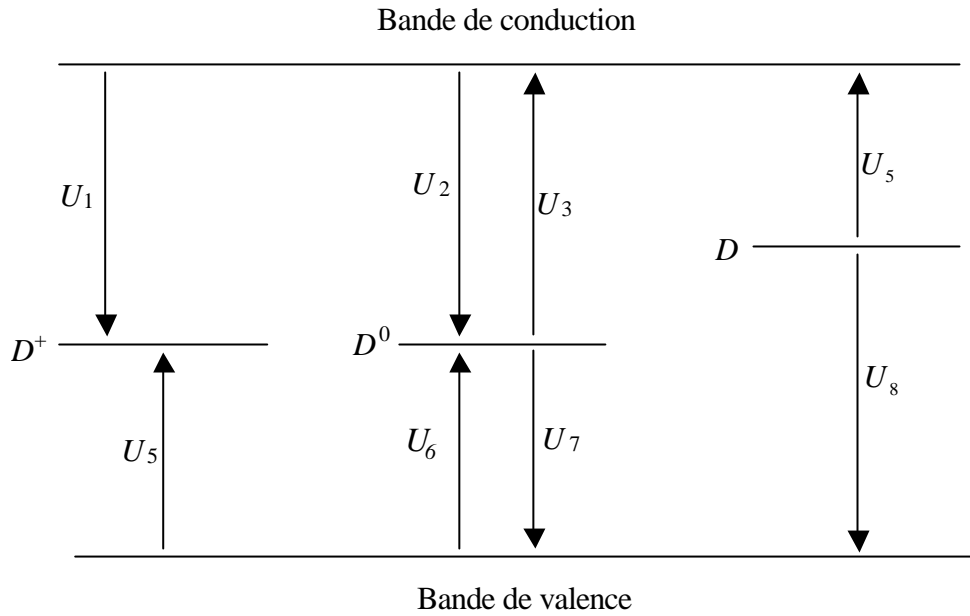


Figure II. 4 Échanges d'électrons dans le modèle de recombinaison sur les liaisons pendantes

	Transition	sens	Notation	Vitesse
Echange avec la bande de conduction	$e + D^+ \rightarrow D^0$	Capture d'un électron par D^+	U_1	$nC_n^+ N_{db} f^+$
	$e + D^0 \rightarrow D^-$	Capture d'un électron par D^0	U_2	$nC_n^0 N_{db} f^0$
	$D^0 \rightarrow D^+ + e$	Emission d'un électron par D^0	U_3	$e_n^0 N_{db} f^0$
	$D^- \rightarrow D^0 + e$	Emission d'un électron par D^-	U_4	$e_n^- N_{db} f^-$
Echange avec la bande de valence	$D^+ \rightarrow D^0 + t$	Emission d'un trou par D^+	U_5	$e_p^+ N_{db} f^+$
	$D^0 \rightarrow D^- + t$	Emission d'un trou par D^0	U_6	$e_p^0 N_{db} f^0$
	$D^0 + t \rightarrow D^+$	Capture d'un trou par D^0	U_7	$pC_p^0 N_{db} f^0$
	$D^- + t \rightarrow D^0$	Capture d'un trou par D^-	U_8	$pC_p^- N_{db} f^-$

où :

- e : électron, t : trou,
- $C_i^j, (e_i^j)$: coefficient de capture (émission) de l'état de charge j vis à vis du porteur de charge i ,
- N_{db} : concentration totale des liaisons pendantes,
- f^j : probabilité d'occupation de la liaison pendante dans l'état de charge j .

$$f^0 = \frac{1}{1+a+b}, \quad f^+ = af^0, \quad f^- = bf^0 \quad (\text{II-24})$$

$$\text{avec} \quad a = \frac{e_n^0 + pC_p^0}{e_p^+ + nC_n^+}, \quad b = \frac{e_p^0 + nC_n^0}{e_n^- + pC_p^-}$$

A l'équilibre thermodynamique, chaque état de charge est en équilibre avec les états étendus alors :

$$U_1 = U_3, \quad U_2 = U_4, \quad U_5 = U_7 \quad \text{et} \quad U_6 = U_8.$$

D'où :

$$e_n^0 = n_0 \frac{f_0^+}{f_0^0} C_n^+ \quad e_n^- = n_0 \frac{f_0^0}{f_0^-} C_n^0 \quad (\text{II-25})$$

$$e_p^0 = p_0 \frac{f_0^-}{f_0^0} C_p^- \quad e_p^+ = p_0 \frac{f_0^0}{f_0^+} C_p^0$$

où $n_0(p_0)$: concentration des électrons (trous) libres.

Le taux net de recombinaison en régime stationnaire sur les états profonds est donné par :

$$U_{ab}(n, p) = U_1 + U_2 - U_3 - U_4$$

$$U_{ab}(n, p) = N_{ab} \frac{nC_n^+ a + nC_n^0 - e_n^0 - e_n^- b}{1+a+b} \quad (\text{II-26})$$

Le taux net de recombinaison total U dans le modèle de la DOS utilisée représente la somme des trois composantes :

- Recombinaison sur la QBC
- Recombinaison sur la QBV
- Recombinaison sur la liaison pendante

Nous avons alors l'expression suivante :

$$U(n, p) = U_{ab}(n, p) + U_{ct}(n, p) + U_{vt}(n, p) \quad (\text{II-27})$$

II.3 Densité de charge

La densité de charge due aux électrons dans la QBC s'exprime par :

$$Q_{ct}(n, p) = -q \int_{E_v}^{E_c} N_{ct}(E) f_{ct}(E) dE \quad (\text{II-28})$$

Avec les mêmes hypothèses prises lors du calcul du taux de recombinaison, la densité de charge peut être calculée analytiquement :

Pour $T < T_c$:

$$Q_{ct}(n, p) = -q N_{ct}^0 kT \exp\left(-\frac{E_c - E_v}{2kT_c}\right) \frac{\mathbf{p}}{\sin\left(\mathbf{p} \frac{T}{T_c}\right)} \left[\left(\frac{C_n^{ct} n + C_p^{ct} p}{C_p^{ct} n_i} \right)^{\frac{T}{T_c}} + \frac{n}{n_i} \left(\frac{C_n^{ct} n + C_p^{ct} p}{C_n^{ct} n_i} \right)^{\frac{T}{T_c} - 1} \right] \quad (\text{II-29})$$

De même pour la densité de charge due aux trous dans la QBV, elle s'écrit :

$$Q_{vt}(n, p) = q \int_{E_p}^{E_c} N_{vt}(E) [1 - f_{vt}(E)] dE$$

Pour $T < T_v$:

$$Q_{vt}(n, p) = q N_{vt}^0 kT \exp\left(-\frac{E_c - E_v}{2kT_v}\right) \frac{\mathbf{p}}{\sin\left(\mathbf{p} \frac{T}{T_v}\right)} \left[\left(\frac{C_n^{vt} n + C_p^{vt} p}{C_n^{vt} n_i} \right)^{-T/T_v} + \frac{p}{n_i} \left(\frac{C_n^{vt} n + C_p^{vt} p}{C_p^{vt} n_i} \right)^{T/T_v - 1} \right] \quad (\text{II-30})$$

Si N_{db} est la concentration totale des liaisons pendantes dans le matériau, la densité de charge négative due aux liaisons pendantes est donnée par:

$$Q_{db}(n, p) = -q N_{db} (f^- - f^+) \quad (\text{II-31})$$

D'où :

$$Q_{db}(n, p) = -q N_{db} \frac{a - b}{a + b + ab} \quad (\text{II-32})$$

La densité de charge totale selon le modèle proposé se compose comme suit :

- Densité de charge négative sur la QBC
- Densité de charge positive sur la QBV

- Densité de charge négative sur la liaison pendante

Dans le cas du matériau dopé, nous devons prendre en compte la concentration des dopants ionisés. L'expression de la densité de charge total est donnée par :

$$\mathbf{r}(n, p) = (-q) [n - p + Na^- - Nd^+] + Q_{db}(n, p) + Q_{ci}(n, p) + Q_{vt}(n, p) \quad (\text{II-33})$$

où

Na^- , Nd^+ : concentration totale des accepteurs et des donneurs supposés entièrement ionisés aux températures considérées.

Dans le présent travail, nous simulons les propriétés optoélectroniques de deux types de structures : l'homostructure PIN et l'hétérostructure PI_1I_2N . Nous étudions ces deux structures à l'équilibre thermodynamique et hors équilibre en régime stationnaires.

Les équations de transport comportent le maximum d'informations sur la réponse de la structure à une excitation donnée. Le système des équations de transport est formé par les équations suivantes :

- Equation de Poisson.
- Equation de continuité des trous.
- Equation de continuité des électrons.

Nous optons pour les variables : potentiel électrochimique des électrons (V_n), potentiel électrochimique des trous (V_p) et potentiel électrostatique (V).

Les équations de transport sont des équations différentielles du second ordre, non linéaires, couplées, d'une expression assez complexe, ce qui nous conduit à les résoudre numériquement. La résolution numérique nécessite deux conditions aux limites pour chaque équation.

Notre but est de résoudre ces équations d'un bout à l'autre de la structure. Les conditions aux limites sont imposées par les contacts avant et arrière que nous supposons ohmiques. Par ailleurs, la non homogénéité du milieu, notamment, dans le cas des hétérojonctions, nécessite des conditions de passage d'une couche à une autre. Nous les avons déterminées en utilisant le modèle du courant d'émission thermoélectronique.

Nous exposons ici, en premier lieu, les équations de transport, ainsi que les conditions aux limites et les conditions de passage, suivies de la procédure de résolution numérique. Nous passons ensuite à l'application de cette procédure à la résolution des équations de transport dans le cas de :

1. Une homostructure PIN.
2. Une hétérostructure PI_1I_2N .

III.1 Equations de transport

A. Cas général

L'ensemble des équations régissant la répartition des charges électriques dans les semiconducteurs sont :

1-L'équation de Poisson

Elle découle de l'équation de Maxwell :

$$\vec{\nabla} \cdot (\hat{\epsilon} \vec{\mathbf{x}}) = \tilde{n} \quad (\text{III-1})$$

où

$\vec{\xi}$: vecteur champ électrique,

\tilde{n} : densité de charge,

$\hat{\epsilon}$: permittivité du matériau.

Dans un matériau homogène et non magnétique, le champ électrique dérive du potentiel électrostatique V par la relation :

$$\vec{\mathbf{x}} = -\vec{\nabla}V \quad (\text{III-2})$$

D'où :

$$\Delta V = -\frac{\mathbf{r}}{\epsilon} \quad (\text{III-3})$$

si le matériau est homogène et isotrope.

2-Equations de continuité

L'équation de continuité des électrons :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + G - U_n \quad (\text{III-5})$$

L'équation de continuité des trous :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p + G - U_p \quad (\text{III-4})$$

où

$\vec{J}_n, (\vec{J}_p)$: vecteur densité de courant des électrons (trous),

G : taux de génération,

U_n, U_p : taux de recombinaison des électrons et des trous, respectivement.

3-Densité de courant (courant de conduction et de diffusion)

Le vecteur densité de courant des trous

$$\bullet \quad \vec{J}_p = -qp\hat{i}_p \cdot \vec{\nabla} V_p \quad (\text{III-6})$$

Le vecteur densité de courant des électrons :

$$\bullet \quad \vec{J}_n = -qn\hat{i}_n \cdot \vec{\nabla} V_n \quad (\text{III-7})$$

où

\hat{i}_n (\hat{i}_p) : mobilité des électrons (trous).

V_n (V_p) : potentiel électrochimique des électrons (trous).

B. Cas unidimensionnel, régime stationnaire

Le régime stationnaire est l'état où les variables d'intensité ont des valeurs indépendantes du temps, d'où :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0, \frac{\partial n}{\partial t} = 0, U_n(x) = U_p(x) = U(x). \quad (\text{III-8})$$

Alors, le système des équations de transport, en régime stationnaire et dans le cas unidimensionnel, s'écrit ainsi :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bullet \quad \frac{dV(x)}{dx} = -\frac{\tilde{n}(x)}{\tilde{a}} \quad (\text{III-9}) \\ \bullet \quad \frac{1}{q} \frac{dJ_n(x)}{dx} = U(x) - G(x) \quad (\text{III-11}) \\ \bullet \quad \frac{1}{q} \frac{dJ_p(x)}{dx} = -(U(x) - G(x)) \quad (\text{III-10}) \end{array} \right.$$

Avec les densités de courant:

$$\left\{ \begin{array}{l} \bullet \quad J_n(x) = -qn(x)\hat{i}_n \frac{dV_n(x)}{dx} \quad (\text{III-13}) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \bullet \quad J_p(x) = -qp(x)\hat{i}_p \frac{dV_p(x)}{dx} \quad (\text{III-12}) \end{array} \right.$$

La densité de courant total s'écrit comme suit:

$$J(x) = J_n(x) + J_p(x) \quad (\text{III-14})$$

En remplaçant $J_n(x)$ et $J_p(x)$ par leurs expressions dans les équations (III-9), (III-10) et (III-11), nous obtenons le système des équations en $V(x), V_n(x), V_p(x)$ à résoudre :

$$\begin{cases} \frac{dV(x)}{dx} = -\frac{\tilde{n}(x)}{a} \\ \frac{dV_n(x)}{dx} + \frac{q}{kT} \frac{d}{dx} [V(x) - V_n(x)] \frac{dV_n(x)}{dx} = \frac{G(x) - U(x)}{i_n n(x)} \\ \frac{dV_p(x)}{dx} + \frac{q}{kT} \frac{d}{dx} [V_p(x) - V(x)] \frac{dV_p(x)}{dx} = -\frac{G(x) - U(x)}{i_p p(x)} \end{cases} \quad (\text{III-15})$$

III.2 Procédure de résolution numérique d'une équation différentielle du second ordre non linéaire

Soit, dans un espace limité, une équation du type :

$$a(x) \frac{d^2 F(x)}{dx^2} + b(x) \frac{dF(x)}{dx} + c(x)F(x) = d(x) \quad (\text{III-16})$$

où a, b et c : coefficients non linéaires.

Supposons que l'équation (III-16) est définie dans un intervalle $[0, L]$. La procédure de résolution de l'équation (III-16) consiste en les trois étapes suivantes :

1. Discrétisation suivant le schéma des différences finies centrées.
2. Linéarisation.
3. Résolution par l'algorithme de Gauss.

III.2.1 Discrétisation suivant le schéma des différences finies centrées

En premier lieu, nous découpons l'espace en N intervalles réguliers, de largeur h . La discrétisation revient à développer en série Taylor la variable F , ici nous nous arrêtons au second ordre :

$$F(x+h) = F(x) + h \frac{dF(x)}{dx} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2 F(x)}{dx^2} \quad (\text{III-17})$$

$$F(x-h) = F(x) - h \frac{dF(x)}{dx} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2 F(x)}{dx^2} \quad (\text{III-18})$$

d'où, on peut tirer la dérivée première et la dérivée seconde de F :

$$\frac{dF(x)}{dx} = \frac{1}{2h} (F(x+h) - F(x-h)) \quad (\text{III-19})$$

$$\frac{d^2 F(x)}{dx^2} = \frac{1}{2h^2} (F(x+h) - 2F(x) + F(x-h)) \quad (\text{III-20})$$

En remplaçant dans l'équation (III-16), nous obtenons une expression du type suivant :

$$\hat{a}(x)F(x+h) + \hat{a}(x)F(x) + \tilde{a}(x)F(x-h) = \ddot{a}(x) \quad (\text{III-21})$$

tel que :

a, b et **g** : coefficients non linéaires.

Pour rendre l'équation plus simple à traiter nous posons ($x_i = hi$) et $L = hN$, ainsi l'équation (III-21) se ramène à la forme :

$$\hat{a}(i)F(i+1) + \hat{a}(i)F(i) + \tilde{a}(i)F(i-1) = \ddot{a}(i) \quad 1 \leq i \leq N-1 \quad (\text{III-22})$$

Après discrétisation le problème s'écrit sous la forme d'un système de $(N-1)$ équations à $(N+1)$ inconnues. Les conditions aux limites donnent deux équations en $i=0$ et en $i=N$.

III.2.2 Linéarisation

Soit $F_0(i)$ une approximation de $F(i)$, nous cherchons la solution sous la forme:

$$F(i) = F_0(i) + f(i) \quad 0 \leq i \leq N \quad (\text{III-23})$$

Où $f(i)$ représente l'incrément de $F(i)$.

La résolution se réduit à la recherche de l'incrément $f(i)$ à partir de l'équation linéarisée à coefficients A, B, C et D :

$$A(i)f(i+1) - B(i)f(i) + C(i)f(i-1) = D(i) \quad 1 \leq i \leq N-1 \quad (\text{III-24})$$

Les équations en $i = 0$ et en $i = N$ sont données par les conditions aux limites.

Après discrétisation et linéarisation de l'équation (III-16), nous obtenons un système d'équations linéaires dont la représentation matricielle est la suivante :

$$\begin{pmatrix}
 B(0) & A(0) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 C(1) & B(1) & A(1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & C(i) & B(i) & A(i) & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C(N-1) & B(N-1) & A(N-1) \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C(N) & B(N)
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 f(0) \\
 f(1) \\
 \vdots \\
 f(i-1) \\
 f(i) \\
 f(i+1) \\
 \vdots \\
 f(N-1) \\
 f(N)
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 D(0) \\
 D(1) \\
 \vdots \\
 D(i) \\
 \vdots \\
 D(N-1) \\
 D(N)
 \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow (M).(f) = (D). \quad (\text{III-25})$$

La première et la dernière ligne correspondent aux équations développées aux limites de la structure.

La matrice (M) est tridiagonale. Nous pouvons, donc, utiliser l'algorithme de Gauss pour résoudre l'équation (III-16).

III.2.3 Résolution par l'algorithme de Gauss

Posons :

$$f(i-1) = L(i-1)f(i) + K(i-1) \quad (\text{III-26})$$

Nous remplaçons $f(i-1)$ par son expression dans l'équation (III-24). Nous obtenons alors :

$$[B(i) - C(i)L(i-1)]f(i) = A(i)f(i+1) + [C(i)K(i-1) - D(i)] \quad (\text{III-27})$$

Posons :

$$Y(i) = B(i) - C(i) \cdot L(i-1)$$

d'où:

$$f(i) = \frac{A(i)}{Y(i)}f(i+1) + \frac{(C(i)K(i-1) - D(i))}{Y(i)} \quad (\text{III-28})$$

Ainsi, nous établissons la relation de récurrence qui permet de déterminer les coefficients $K(i)$ et $L(i)$ ($1 \leq i \leq N$) à partir des coefficients $K(0)$ et $L(0)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} K(i) = \frac{(C(i)K(i-1) - D(i))}{Y(i)} \\ L(i) = \frac{A(i)}{Y(i)} \end{array} \right. \quad 1 \leq i \leq N \quad \text{(III-29)}$$

La détermination de ces coefficients constitue le premier balayage (direct de $i=1$ à $i=N$), ils sont appelés les coefficients de balayage de la matrice (M).

Avec les coefficients : $K(i)$, $L(i)$ et la solution $f(N)$, l'équation (III-6) nous permet de déterminer $f(i)$ ($0 \leq i \leq N$) par un deuxième balayage (inversé de $i=N$ à $i=1$). Par ailleurs, la convergence de la méthode nécessite un critère de convergence. Ce critère dépend du type de l'équation à résoudre. L'organigramme de résolution est donné sur la *Figure II.1*. Ainsi, nous aurons résolu l'équation (III-16) de $i = 0$ à $i = N$.

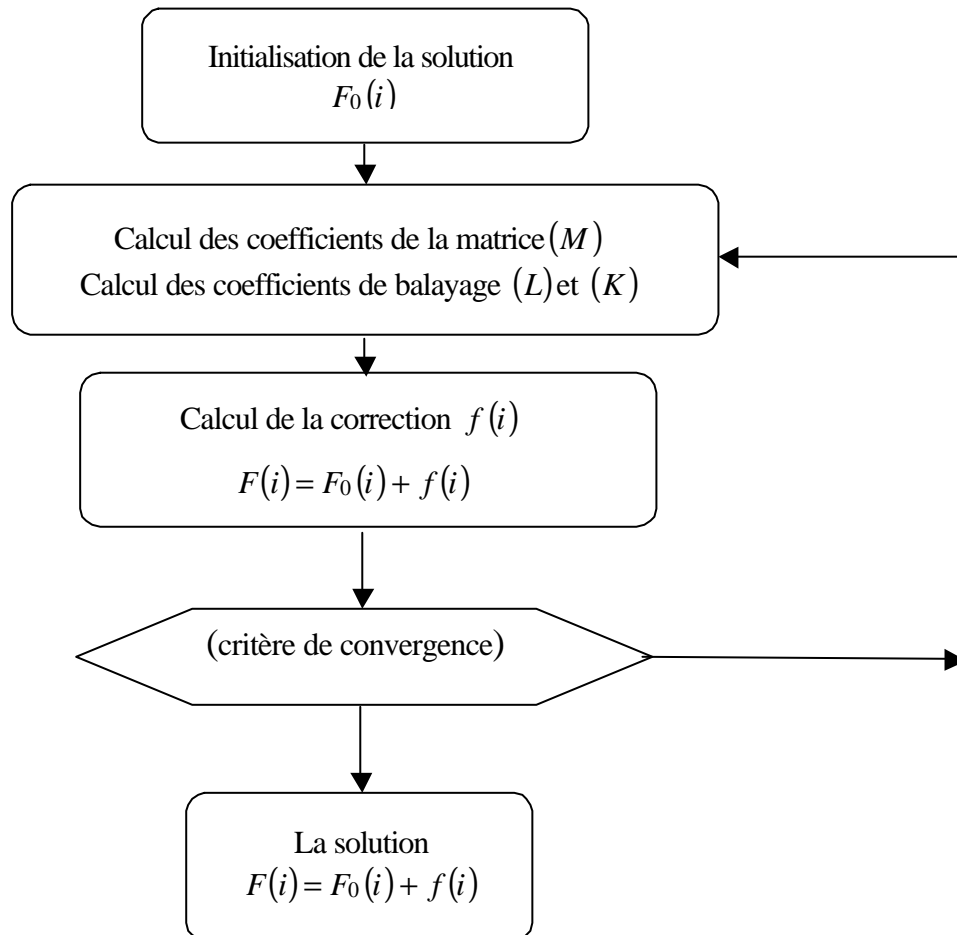


Figure.III.1 Organigramme utilisé pour la résolution d'une équation différentielle du second ordre non linéaire.

III.3 Résolution du système d'équations de transport dans le cas d'une homostructure PIN

Les trois équations de transport constituant le système (III-15) sont couplées. La méthode de résolution du système consiste à supposer les trois équations indépendamment l'une de l'autre : chacune de ces équations s'écrit en fonction de la variable « prédominante ». V prédomine dans l'équation de Poisson, V_n prédomine dans l'équation de continuité des électrons, V_p prédomine dans l'équation de continuité des trous.

La résolution de chaque équation se fait suivant la procédure que nous avons détaillée dans le paragraphe (III.2). Nous approchons la solution par étape de résolution de chacune des équations.

Soit V_0 la solution approchée du système (III-15), et v , l'incrément de potentiel V qui s'écrit donc :

$$V(i) = V_0(i) + v(i)$$

Soit, V_{n0} , la solution approchée du système (III-15), et v_n , l'incrément de potentiel V_n qui s'écrit donc :

$$V_n(i) = V_{n0}(i) + v_n(i)$$

Soit V_{p0} la solution approchée du système (III-15), et v_p , l'incrément de potentiel V_p qui s'écrit donc :

$$V_p(i) = V_{p0}(i) + v_p(i)$$

Après discrétisation et linéarisation des équations de transport, le système (III-15) peut se mettre sous la forme matricielle :

$$\begin{cases} (M)(v) = (D) \\ (M_n)(v_n) = (D_n) \\ (M_p)(v_p) = (D_p) \end{cases}$$

(M) , (M_p) et (M_n) : matrices tridiagonales de balayage correspondant à l'équation de Poisson, l'équation de continuité des trous, et l'équation de continuité des électrons, respectivement.

La résolution du système d'équations revient à rechercher les incréments v , v_n , v_p en suivant l'organigramme de calcul donné sur la *Figure III.2*. Le développement limité

de chacune des trois fonctions n'est licite que si: $v(i) \ll \frac{kT}{q}$, $v_p(i) \ll \frac{kT}{q}$ et

$v_n(i) \ll \frac{kT}{q}$ ($0 < i < N$). Ceci constitue les critères de convergence du système

d'équation.

Dans ce qui suit, nous commençons par calculer les paramètres du matériau à l'équilibre thermodynamique. Ces derniers sont nécessaires pour le calcul des coefficients d'émission à partir des coefficients de capture (paragraphe I.2.3). Par ailleurs, les grandeurs U (taux de recombinaison) et ρ (densité de charge) sont fonctions des variables V, V_n et V_p , et ce à travers les concentrations des porteurs p et n . Nous donnons, alors, l'écriture de p et n en fonction de V, V_p et V_n . Nous passons ensuite à la description des conditions aux limites et le maillage de la structure pour passer enfin au calcul des éléments de la matrice de balayage de chaque équation.

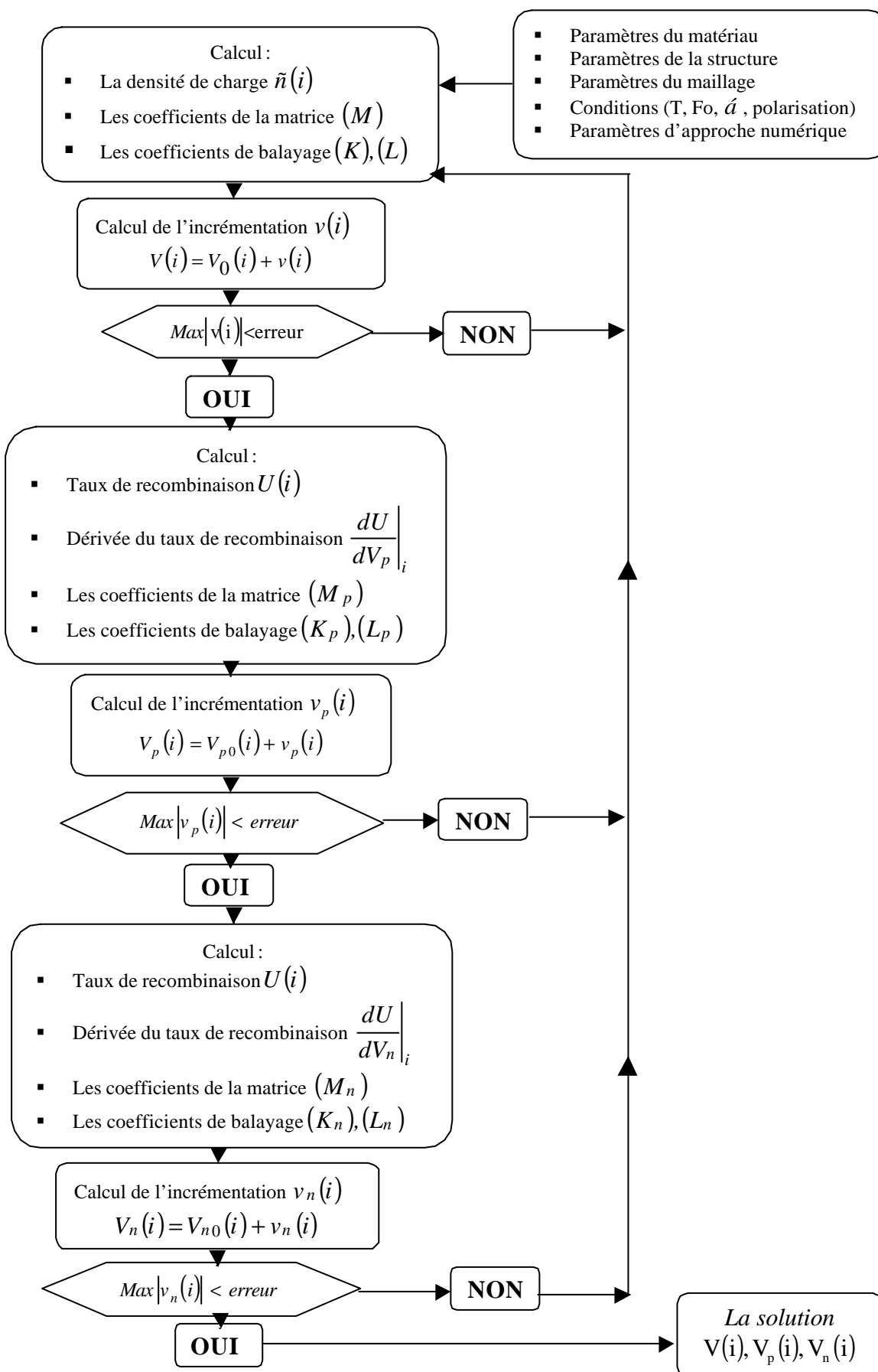


Figure.III.2 Organigramme de résolution du système d'équations de transport.

III.3.1 Calcul des paramètres du matériau à l'équilibre thermodynamique

Les paramètres du matériau à l'équilibre thermodynamique sont fonction du niveau de Fermi (E_{f0}). Le calcul de E_{f0} pour chacun des matériaux composant la structure nécessite la résolution de l'équation de neutralité :

$$r = 0$$

III.3.2 Concentration des porteurs de charges

Les concentrations des porteurs sont données par les expressions :

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{fn}}{KT}\right) \quad (\text{III-30})$$

$$p = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_{fp}}{kT}\right) \quad (\text{III-31})$$

tel que :

E_{fn} : quasi niveau de Fermi des électrons,

E_{fp} : quasi niveau de Fermi des trous,

N_c, N_v : densités d'états aux bords du gap, elles sont prises égales à $(N_{ct}^0 kT)$ et $(N_{vt}^0 kT)$ respectivement.

Supposons le potentiel électrostatique nul au niveau du contact arrière, il vient :

$$E_c = E_{cn} - qV \quad (\text{III-32})$$

$$E_v = E_{vn} - qV \quad (\text{III-33})$$

où :

E_{cn} : position du plus bas niveau de la bande de conduction dans le semiconducteur, constituant la couche type N, à l'équilibre thermodynamique,

E_{vn} : position du plus haut niveau de la bande de valence du semiconducteur, constituant la couche type N, à l'équilibre thermodynamique.

La référence des énergies potentielles est prise au niveau de Fermi de la couche type N. Nous avons donc :

$$E_{fn} - E_{f0n} = -qV_n \quad (\text{III-34})$$

$$E_{f0n} - E_{fp} = -qV_p \quad (\text{III-35})$$

où

E_{f0n} : niveau de Fermi du semiconducteur constituant la couche de type N.

En substituant (III-34) et (III-35) dans les expressions de n et de p , nous trouvons :

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_{cn} - E_{f0n} - qV + qV_n}{kT}\right) \Rightarrow n = n_{0n} \exp\left(-q\frac{V_n - V}{kT}\right) \quad (\text{III-36})$$

$$p = N_v \exp\left(\frac{E_{vn} - E_{f0n} - qV + qV_p}{kT}\right) \Rightarrow p = p_{0n} \exp\left(q\frac{V_p - V}{kT}\right) \quad (\text{III-37})$$

tel que :

n_{0n} (p_{0n}): concentration des électrons (trous) libres, à l'équilibre thermodynamique, dans le semiconducteur constituant la couche de type N.

III.3.3 Maillage de la structure

Dans la *Figure III. 3*, nous avons schématisé une structure PIN. Nous divisons le domaine $[0, L]$ en N intervalles identiques de largeur h . Les points x_{ip} , x_{in} , et L figurent dans le maillage.

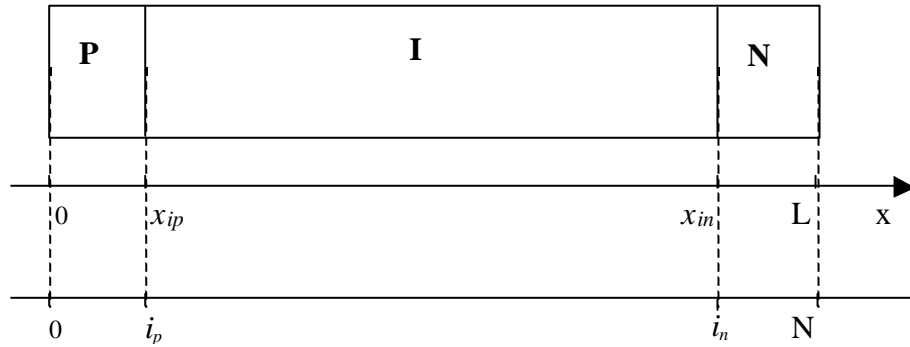


Figure.III.3 Schéma de la structure PIN

III.3.4 Conditions aux limites

La condition au niveau de la surface avant et la condition au niveau de la surface arrière sont imposées par la nature des contacts et leurs rôles. Nous considérons que les deux contacts sont des contacts ohmiques.

Pour l'équation de Poisson un contact ohmique induit une densité de charge nulle au niveau du contact.

Un contact ohmique est caractérisé par des vitesses de recombinaison des porteurs assez élevées (entre 10^5 cm/s à 10^8 cm/s). L'égalité entre le courant de la structure et le courant de recombinaison à la surface constitue la condition aux limites pour les équations de continuité.

III.3.5 Ecriture matricielle de l'équation de Poisson

Dans ce qui suit, nous exposerons l'application de la méthode expliquée auparavant (*paragraphe III.2*) dans le cas de l'équation de Poisson.

A. Région continue $\left[0 < i < i_p, i_p < i < i_n, i_n < i < N\right]$

A la variable potentiel électrostatique V nous faisons un développement Taylor:

$$V(x+h) = V(x) + h \frac{dV(x)}{dx} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2V(x)}{dx^2} + \frac{h^3}{6} \frac{d^3V(x)}{dx^3} + \frac{h^4}{24} \frac{d^4V(x)}{dx^4} \quad (\text{III-38})$$

$$V(x-h) = V(x) - h \frac{dV(x)}{dx} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2V(x)}{dx^2} - \frac{h^3}{6} \frac{d^3V(x)}{dx^3} + \frac{h^4}{24} \frac{d^4V(x)}{dx^4} \quad (\text{III-39})$$

La sommation des deux équations nous permet d'écrire :

$$V(x+h) - 2V(x) + V(x-h) = h^2 \frac{d^2V(x)}{dx^2} + \frac{h^4}{12} \frac{d^4V(x)}{dx^4} \quad (\text{III-40})$$

L'équation de Poisson (comme elle est montré dans le système (III-15)) s'écrit comme suit :

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = - \frac{\mathbf{r}(x)}{\mathbf{e}}$$

En remplaçant dans (III-40) nous trouvons :

$$V(x+h) - 2V(x) + V(x-h) = -h^2 \frac{\mathbf{r}(x)}{\mathbf{e}} - \frac{h^4}{12} \frac{1}{\mathbf{e}} \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \quad (\text{III-41})$$

Un développement au second ordre de $\rho(x+h)$ et $\rho(x-h)$ aboutit à :

$$\frac{d^2 \mathbf{r}(x)}{dx^2} = \frac{1}{h^2} [\mathbf{r}(x+h) - 2\mathbf{r}(x) + \mathbf{r}(x-h)] \quad (\text{III-42})$$

En remplaçant $\Delta\rho(x)$ par son expression dans l'équation (III-41) nous obtenons :

$$V(x+h) - 2V(x) + V(x-h) = -h^2 \frac{\mathbf{r}(x)}{\mathbf{e}} - \frac{h^2}{12\mathbf{e}} [\mathbf{r}(x+h) - 2\mathbf{r}(x) + \mathbf{r}(x-h)] \quad (\text{III-43})$$

Posons $x = hi$, l'équation (III-43) devient :

$$V(i+1) - 2V(i) + V(i-1) = -h^2 \frac{\mathbf{r}(i)}{\mathbf{e}} - \frac{h^2}{12\mathbf{e}} [\mathbf{r}(i+1) - 2\mathbf{r}(i) + \mathbf{r}(i-1)] \quad (\text{III-44})$$

Linéarisons l'équation (III-44). Soit :

$$\begin{cases} V(i) = V_0(i) + v(i) \\ \mathbf{r}(i) = \mathbf{r}_0(i) + \left. \frac{d\mathbf{r}}{dV} \right|_i v(i) \end{cases}$$

En remplaçant dans (III-44) nous trouvons l'équation suivante:

$$A(i)v(i+1) - B(i)v(i) + C(i)v(i-1) = D(i) \quad (\text{III-45})$$

Tel que :

$$A(i) = 1 + \left. \frac{1}{12} \frac{h^2}{\mathbf{a}} \frac{d\mathbf{r}}{dx} \right|_{i+1} \quad (\text{III-46})$$

$$B(i) = 2 - \left. \frac{10}{12} \frac{h^2}{\mathbf{e}} \frac{d\mathbf{r}}{dx} \right|_i \quad (\text{III-47})$$

$$C(i) = 1 + \left. \frac{1}{12} \frac{h^2}{\mathbf{e}} \frac{d\mathbf{r}}{dx} \right|_{i-1} \quad (\text{III-48})$$

$$D(i) = -[V_0(i+1) - 2V_0(i) + V_0(i-1)] - \frac{1}{12} \frac{h^2}{\mathbf{e}} [\mathbf{r}(i+1) + 10\mathbf{r}(i) + \mathbf{r}(i-1)] \quad (\text{III-49})$$

B. Conditions de passage en $x = x_{in}$ et en $x = x_{ip}$

Considérons le cas de l'interface **I-N**. La différence du dopage entre les deux couches induit la discontinuité de la densité de charge, donc toutes les dérivées de V sont discontinues.

Notons: $\left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_{in}}^+, \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_{in}}^+ \left(\left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_{in}}^-, \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_{in}}^- \right)$ les dérivées première et seconde du

potentiel électrostatique à l'interface I-N, calculées dans la région dopée N (calculées dans la région non dopée D), respectivement.

Ainsi, le développement de V à l'interface I-N s'écrit :

$$V(x_{in} + h) = V(x_{in}) + h \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_{in}}^+ + \frac{h^2}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_{in}}^+ + \frac{h^3}{6} \left. \frac{d^3V}{dx^3} \right|_{x_{in}}^+ + \frac{h^4}{24} \left. \frac{d^4V}{dx^4} \right|_{x_{in}}^+ \quad (\text{III-50})$$

$$V(x_{in} - h) = V(x_{in}) - h \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_{in}}^- + \frac{h^2}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_{in}}^- - \frac{h^3}{6} \left. \frac{d^3V}{dx^3} \right|_{x_{in}}^- + \frac{h^4}{24} \left. \frac{d^4V}{dx^4} \right|_{x_{in}}^- \quad (\text{III-51})$$

Par ailleurs, du fait qu'il n'y a pas d'accumulation de charge en régime stationnaire, le théorème de Gauss entraîne la continuité du vecteur Déplacement à l'interface. Ceci permet d'écrire :

$$\mathring{a}_I \mathbf{x}_I = \mathring{a}_N \mathbf{x}_N \quad (\text{III-52})$$

Puisque les trois couches de la structure sont du même matériau (homostructure) nous avons : $\mathbf{e}_I = \mathbf{e}_N$, donc $\mathbf{x}_I = \mathbf{x}_N$ d'où :

$$\left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_{in}}^+ = \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_{in}}^- = \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_{in}} \quad (\text{III-53})$$

Nous réécrivons les expressions (III-50), (III-51) :

$$V(x_{in} + h) = V(x_{in}) + h \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_{in}} + \frac{h^2}{2} \mathbf{r}^+(x_{in}) + \frac{h^3}{6} \left. \frac{d^3V}{dx^3} \right|_{x_{in}} + \frac{h^4}{24} \left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{in}}^+ \quad (\text{III-54})$$

$$V(x_{in} - h) = V(x_{in}) - h \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_{in}} + \frac{h^2}{2} \mathbf{r}^-(x_{in}) - \frac{h^3}{6} \left. \frac{d^3V}{dx^3} \right|_{x_{in}} + \frac{h^4}{24} \left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{in}}^- \quad (\text{III-55})$$

Tel que ρ^+ (ρ^-) est la densité de charge calculée dans la région dopée N (non dopée I).

La sommation des équations (III-54), (III-55) nous donne :

$$\begin{aligned} V(x_{in} + h) - 2V(x_{in}) + V(x_{in} - h) &= \frac{h^2}{2} [\mathbf{r}^+(x_{in}) + \mathbf{r}^-(x_{in})] + \\ &+ \frac{h^4}{24} \left[\left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{in}}^+ + \left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{in}}^- \right] \end{aligned} \quad (\text{III-56})$$

Pour l'interface **P-I**, en suivant le même cheminement nous trouvons :

$$\begin{aligned} V(x_{ip} + h) - 2V(x_{ip}) + V(x_{ip} - h) &= \frac{h^2}{2} [\mathbf{r}^+(x_{ip}) + \mathbf{r}^-(x_{ip})] + \\ &+ \frac{h^4}{24} \left[\left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{ip}}^+ + \left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{ip}}^- \right] \end{aligned} \quad (\text{III-57})$$

En posant :

$$\mathbf{r}(x_{in}) = \frac{1}{2} [\mathbf{r}^+(x_{in}) + \mathbf{r}^-(x_{in})], \quad \text{et} \quad \mathbf{r}(x_{ip}) = \frac{1}{2} [\mathbf{r}^+(x_{ip}) + \mathbf{r}^-(x_{ip})] \quad (\text{III-58})$$

$$\left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{in}} = \frac{1}{2} \left[\left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{in}}^+ + \left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{in}}^- \right], \quad \text{et} \quad \left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{ip}} = \frac{1}{2} \left[\left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{ip}}^+ + \left. \frac{d^2 \mathbf{r}}{dx^2} \right|_{x_{ip}}^- \right] \quad (\text{III-59})$$

nous retrouvons l'équation (III-41). Les coefficients de la matrice (M) au rang i_n , et au rang i_p s'écrivent donc de la même manière que ceux de la zone continue.

C. Conditions aux limites en $x = 0$ et en $x = L$

Nous résolvons l'équation $\mathbf{r}(0) = 0$. La valeur de $V(0)$ que nous trouvons est introduite comme solution à la limite $x = 0$. Le potentiel à la limite $x = L$ est prise égal à zéro : $V(L) = 0$.

III.3.6 Ecriture matricielle de l'équation de continuité des électrons

Nous exprimons, dans ce qui suit, les coefficients de la matrice (M_n) résultat de la discrétisation (au second ordre) et de la linéarisation de l'équation de continuité des électrons (système III-15).

A. Région continue $\left[0 < i < i_p, i_p < i < i_n, i_n < i < N \right]$

$$A_n(i) = 1 + \frac{1}{4kT} [-2V_{no}(i+1) + 2V_{no}(i-1) - V_o(i-1) + V_o(i+1)] \quad (\text{III-60})$$

$$B_n(i) = 2 - \frac{h^2}{i_n} \frac{1}{kT} \frac{1}{n(i)} \left(kT \left. \frac{dU_n}{dV_n} \right|_i + U_n(i) - G(i) \right) \quad (\text{III-61})$$

$$C_n(i) = 1 + \frac{1}{4kT} [-2V_{no}(i-1) + 2V_{no}(i+1) + V_o(i-1) - V_o(i+1)] \quad (\text{III-62})$$

$$\begin{aligned} D_n(i) = & -[V_{no}(i+1) + V_{no}(i-1) - 2V_{no}(i)] + \\ & + \frac{1}{4kT} [-V_{no}(i-1) + V_{no}(i+1)] [V_{no}(i+1) - V_{no}(i-1) - V_o(i+1) + V_o(i-1)] - \\ & - \frac{h^2}{i_n} \frac{1}{n(i)} [U_n(i) - G(i)] \end{aligned} \quad (\text{III-63})$$

B. Conditions aux limites

B.1 $x = 0$ ($i = 0$)

La densité de courant de recombinaison des électrons est donnée par l'expression :

$$J_{ns1}(0) = q s_{n1} [n(0) - n_0(0)] \quad (\text{III-64})$$

où S_{n1} : vitesse de recombinaison des électrons sur la surface avant de la PIN.

La condition du contact ohmique s'exprime par l'égalité :

$$J_n(0) = J_{ns1}(0) \quad (\text{III-65})$$

$$\Rightarrow -q n(0) \dot{\imath}_n \left. \frac{dV_n}{dx} \right|_0 = -q s_{n1} [n(0) - n_0(0)] \quad (\text{III-66})$$

$$\Rightarrow \left. \frac{dV_n}{dx} \right|_0 = \frac{q s_{n1} [n(0) - n_0(0)]}{q n(0) \dot{\imath}_n} \quad (\text{III-67})$$

D'autre part, nous avons le développement au second ordre de V_n :

$$V_n(1) = V_n(0) + h \left. \frac{dV_n}{dx} \right|_0 + \frac{h^2}{2} \left. \frac{d^2V_n}{dx^2} \right|_0 \Rightarrow \left. \frac{d^2V_n}{dx^2} \right|_0 = \frac{2}{h^2} \left[V_n(1) - V_n(0) - h \left. \frac{dV_n}{dx} \right|_0 \right] \quad (\text{III-68})$$

En remplaçant dans l'équation de continuité des électrons exprimée dans le système (III-15) nous aurons discrétisé l'équation. au rang $i=0$. Après linéarisation, les coefficients de la matrice (M_n), au rang 0, s'écrivent comme suit :

$$A_n(0) = 1 \quad (\text{III-69})$$

$$B_n(0) = 1 + \frac{h s_{n1} n_0(0)}{\dot{\imath}_n kT n_0(N)} \exp\left[\frac{V_{no}(0) - V_o(0)}{kT}\right] - \frac{h^2}{2 \dot{\imath}_n kT n(0)} \left[U_n(0) - G(0) + kT \left. \frac{dU_n}{dV_n} \right|_0 \right] \quad (\text{III-70})$$

$$C_n(0) = 0 \quad (\text{III-71})$$

$$D_n(0) = V_{no}(0) - V_{no}(1) - \frac{h}{q \dot{\imath}_n n(0)} J_{ns1}(0) - \frac{h^2}{2 \dot{\imath}_n n(0)} [U_n(0) - G(0)] \quad (\text{III-72})$$

Pour l'équation à la limite $i=N$ nous suivons le même cheminement, de même pour les conditions aux limites dans le cas de l'équation de continuité des trous.

B.2 $x = L (i = N)$

La densité de courant de recombinaison des électrons est donnée par l'expression :

$$J_{ns2}(N) = -q s_{n2} [n(N) - n_0(N)] \quad (\text{III-73})$$

S_{n2} : vitesse de recombinaison des électrons sur la surface arrière de la PIN.

Les coefficients de la matrice (M_n) au rang $i = N$ sont données par :

$$A_n(N) = 0 \quad (\text{III-74})$$

$$B_n(N) = 1 + \frac{h}{\hbar_n} \frac{s_{n2}}{kT} \exp\left[\frac{(V_{no}(N) - V_o(N))}{kT}\right] \\ \frac{h^2}{2\hbar_n} \frac{1}{kT} \frac{1}{n(N)} \left[U_n(N) - G(N) + kT \left. \frac{dU_n}{dV_n} \right|_N \right] \quad (\text{III-75})$$

$$C_n(N) = 1 \quad (\text{III-76})$$

$$D_n(N) = V_{no}(N) - V_{no}(N-1) + \frac{h}{q\hbar_n} \frac{1}{n(N)} J_{ns2}(N) - \\ \frac{h^2}{2\hbar_n} \frac{1}{n(N)} [U_n(N) - G(N)] \quad (\text{III-77})$$

III.3.7 Ecriture matricielle de l'équation de continuité des trous

Nous exprimons, dans ce qui suit, les coefficients de la matrice (M_p) résultat de la discrétisation (au second ordre) et de la linéarisation de l'équation de continuité des trous (système III-15).

A. Région continue $\mathbf{p} < i < i_p, i_p < i < i_n, i_n < i < N$

$$A_p(i) = 1 + \frac{1}{4kT} [2V_{po}(i+1) - 2V_{po}(i-1) + V_o(i-1) - V_o(i+1)] \quad (\text{III-78})$$

$$B_p(i) = 2 + h^2 \frac{1}{\hbar_p} \frac{1}{kT} \frac{1}{p(i)} \left[kT \left. \frac{dU}{dV_p} \right|_i - U(i) + G(i) \right] \quad (\text{III-79})$$

$$C_p(i) = 1 + \frac{1}{4kT} \{ 2[V_{po}(i-1) - 2V_{po}(i+1)] - [V(i-1) - V(i+1)] \} \quad (\text{III-80})$$

$$D_p(i) = -V_{po}(i+1) - V_{po}(i-1) + 2V_{po}(i) + \\ + \frac{1}{4kT} [V_{po}(i-1) - V_{po}(i+1)] [V_{po}(i+1) - V_{po}(i-1) - V_o(i+1) + V_o(i-1)] + \\ + \frac{h^2}{\mathbf{m}} \frac{1}{p(i)} [U(i) - G(i)] \quad (\text{III-81})$$

B. Conditions aux limites

B.1 $x = 0$ ($i = 0$)

La densité de courant de recombinaison des trous s'exprime par :

$$J_{psi}(0) = -q s_{p1} [p(0) - p_0(0)] \quad (\text{III-82})$$

S_{p1} : vitesse de recombinaison des trous sur la surface avant de la PIN.

Les coefficients de la matrice (M_p) au rang $i = 0$ sont :

$$A_p(0) = 1 \quad (\text{III-83})$$

$$B_p(0) = 1 + h S_{p1} \frac{1}{kT} \frac{1}{p} \frac{p_0(0)}{p_0(N)} \exp\left[\frac{V_0(0) - V_{p0}(0)}{kT}\right] - \frac{h^2}{2} \frac{1}{p(0)} \frac{1}{m_p} \frac{1}{kT} \left[U(0) - G(0) - kT \frac{dU}{dV_p} \Big|_0 \right] \quad (\text{III-84})$$

$$C_p(0) = 0 \quad (\text{III-85})$$

$$D_p(0) = V_{p0}(0) - V_{p0}(1) - h \frac{1}{q} \frac{1}{m_p} \frac{J_{ps1}(0)}{p(0)} + \frac{h^2}{2} \frac{1}{p(0)} \frac{1}{m_p} [U(0) - G(0)] \quad (\text{III-86})$$

B.2 $x = L$ ($i = N$)

La densité de courant de recombinaison des trous s'exprime par :

$$J_{ps}(N) = q S_{p2} [p(N) - p_0(N)] \quad (\text{III-87})$$

S_{p2} : vitesse de recombinaison des trous sur la surface arrière de la PIN.

Les coefficients de la matrice (M_p) au rang $i = N$ sont :

$$A_p(N) = 0 \quad (\text{III-88})$$

$$B_p(N) = 1 + h \frac{S_{p2}}{m_p} \frac{1}{kT} \exp\left[\frac{V_0(N) - V_{p0}(N)}{kT}\right] - \frac{h^2}{2} \frac{1}{kT} \frac{1}{m_p} \frac{1}{p(N)} \left[U(N) - G(N) - kT \frac{dU}{dV_p} \Big|_N \right] \quad (\text{III-89})$$

$$C_p(N) = 1 \quad (\text{III-90})$$

$$D_p(N) = V_{p0}(N) - V_{p0}(N-1) + h \frac{1}{m_p} \frac{1}{q} \frac{1}{p(N)} J_{ps2}(N) + \frac{h^2}{2} \frac{1}{m_p} \frac{1}{p(N)} [U(N) - G(N)] \quad (\text{III-91})$$

Ainsi nous avons développé les expressions de tout les éléments de chacune des matrices (M), (M_p) et (M_n) dans le cas d'une homostructure PIN. La résolution du système d'équations revient à rechercher les incréments v , v_n et v_p en suivant l'organigramme de calcul donné sur la *Figure III.2*.

III.4 Résolution du système d'équations de transport dans le cas d'une hétérostructure PI_1I_2N

L'hétérostructure PI_1I_2N (Figure III.4) est formée de quatre couches juxtaposées. Les interfaces $P-I_1$ et I_2-N sont des homojonctions. Tandis que l'interface I_1-I_2 est une hétérojonction.

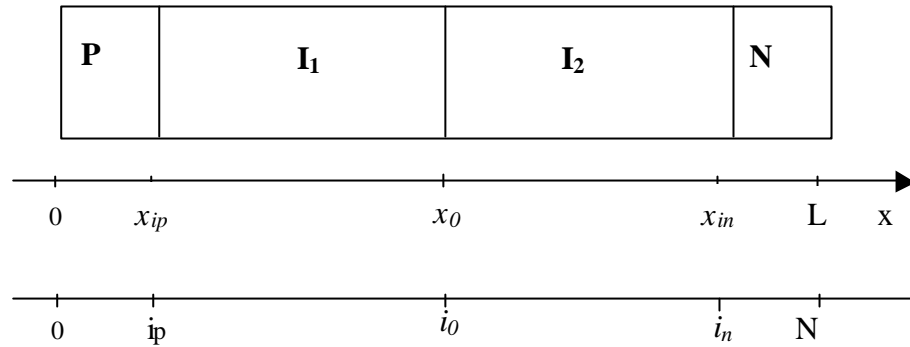


Figure.III.4 Schéma représentatif de l'hétérostructure PI_1I_2N

Nous nous basons sur la procédure de calcul utilisée lors de la résolution des équations de transport dans le cas de l'homostructure PIN (paragraphe III.3).

Dans le cas de l'hétérostructure PI_1I_2N , les coefficients des matrices (M) , (M_n) , (M_p) et des vecteurs (D) , (D_n) , (D_p) , dans les zones continues, au niveau des homojonctions et des contacts ohmiques, ont les mêmes expressions que dans le cas de l'homostructure PIN.

Nous exposons, dans ce paragraphe, les hypothèses, les conditions de passage ainsi que le calcul des coefficients des matrices (M) , (M_n) , (M_p) et des vecteurs (D) , (D_n) , (D_p) , à l'hétérojonction située à l'interface I_1-I_2 .

Au niveau de l'hétéroface, les quasi-niveaux de Fermi peuvent être discontinus.

Plusieurs travaux ont été consacrés aux conditions de passage dans l'hétérostructure [35, 36, 37, 38]. On trouve alors des modèles de courant basés sur l'émission thermoélectronique. En effet, la barrière de potentiel à l'hétéroface constitue un obstacle au passage des électrons d'un matériau dans l'autre. A la température du zéro degré absolu, aucun électron ne peut franchir la barrière. Lorsque la température est différente de zéro, l'énergie thermique permet à certains électrons de franchir la barrière, créant ainsi le courant d'émission thermoélectronique.

Les conditions sont imposées par la continuité du courant à travers l'hétéroface. La continuité s'exprime par l'égalité entre le courant de conduction-diffusion à la limite du matériau et le courant de l'émission thermoélectronique.

Pour l'équation de Poisson, la continuité du vecteur déplacement assure le passage de I_1 à I_2 .

III.4.1 Condition de passage à l'hétéroface pour l'équation de Poisson

Le développement du potentiel V en série Taylor au second ordre aux rangs $i_0 - 1, i_0 + 1$ donne :

$$V(i_0 + 1) = V(i_0^+) + h \left. \frac{dV}{dx} \right|_{i_0^+} + \frac{h^2}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{i_0^+}$$

$$V(i_0 - 1) = V(i_0^-) - h \left. \frac{dV}{dx} \right|_{i_0^-} + \frac{h^2}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{i_0^-}$$

où

i_0^- : limite de l'hétéroface du côté de la couche I_1 .

i_0^+ : limite de l'hétéroface du côté de la couche I_2 .

Sur une hétéroface, le potentiel électrique est continu, d'où : $V(i_0^-) = V(i_0^+) = V(i_0)$

La somme des deux expressions aboutie à :

$$V(i_0 + 1) - 2V(i_0) + V(i_0 - 1) = h \left[\left. \frac{dV}{dx} \right|_{i_0^+} - \left. \frac{dV}{dx} \right|_{i_0^-} \right] + \frac{h^2}{2} \left[\left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{i_0^+} - \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{i_0^-} \right] \quad (\text{III-92})$$

$$\text{D'où : } V(i_0 + 1) - 2V(i_0) + V(i_0 - 1) = -h [\mathbf{x}(i_0^+) - \mathbf{x}(i_0^-)] - \frac{h^2}{2} \left[\frac{\mathbf{r}(i_0^+)}{\mathbf{e}^+} - \frac{\mathbf{r}(i_0^-)}{\mathbf{e}^-} \right] \quad (\text{III-93})$$

\mathbf{e}^- , \mathbf{e}^+ : permittivité de la région I_1 et permittivité de la région I_2 , respectivement.

Le développement du champ électrique \mathbf{x} au premier ordre, aux points $(i - 1), (i + 1)$

donne :

$$\mathbf{x}(i_0 + 1) = \mathbf{x}(i_0^+) + h \left. \frac{d\mathbf{x}}{dx} \right|_{i_0^+} \Rightarrow \mathbf{x}(i_0^+) = \mathbf{x}(i_0 + 1) + h \frac{\mathbf{r}(i_0^+)}{\mathbf{e}^+} \quad (\text{III-94})$$

$$\mathbf{x}(i_0 - 1) = \mathbf{x}(i_0^-) - h \left. \frac{d\mathbf{x}}{dx} \right|_{i_0^-} \Rightarrow \mathbf{x}(i_0^-) = \mathbf{x}(i_0 - 1) - h \frac{\mathbf{r}(i_0^-)}{\mathbf{e}^-} \quad (\text{III-95})$$

La sommation des deux expressions nous permet d'écrire :

$$\mathbf{x}(i_0^+) - \mathbf{x}(i_0^-) = (\mathbf{x}(i_0 + 1) - \mathbf{x}(i_0 - 1)) - h \left(\frac{\mathbf{r}(i_0^+)}{\mathbf{e}^+} + \frac{\mathbf{r}(i_0^-)}{\mathbf{e}^-} \right) \quad (\text{III-96})$$

En remplaçant dans (III.93) nous trouvons :

$$V(i_0 + 1) - 2V(i_0) + V(i_0 - 1) = -h(\mathbf{x}(i_0 + 1) - \mathbf{x}(i_0 - 1)) + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\mathbf{r}(i_0^+)}{\mathbf{e}^+} - \frac{\mathbf{r}(i_0^-)}{\mathbf{e}^-} \right) \quad (\text{III-97})$$

Après la linéarisation, les coefficients de la matrice (M) et du vecteur (D) au rang i_0 s'écrivent ainsi :

$$A(i_0) = 1 - \frac{h^2}{\mathbf{e}^+} \left. \frac{d\mathbf{r}}{dV} \right|_{i_0^+} \quad (\text{III-98})$$

$$B(i_0) = 2 - \frac{h^2}{2} \left(\left. \frac{1}{\mathbf{e}^+} \frac{d\mathbf{r}}{dV} \right|_{i_0^+} + \left. \frac{1}{\mathbf{e}^-} \frac{d\mathbf{r}}{dV} \right|_{i_0^-} \right) \quad (\text{III-99})$$

$$C(i_0) = 1 - \frac{h^2}{\mathbf{e}^-} \left. \frac{d\mathbf{r}}{dV} \right|_{i_0^-} \quad (\text{III-100})$$

$$D(i_0) = -[V_0(i_0 + 1) - 2V_0(i_0) + V_0(i_0 - 1)] - h(E_{ph} - E_{mh}) + h^2 \left[\frac{\mathbf{r}(i_0 + 1)}{\mathbf{e}^+} + \frac{\mathbf{r}(i_0 - 1)}{\mathbf{e}^-} \right] - \frac{h^2}{2} \left[\frac{\mathbf{r}(i_0^+)}{\mathbf{e}^+} + \frac{\mathbf{r}(i_0^-)}{\mathbf{e}^-} \right] \quad (\text{III-101})$$

$$\text{où } E_{ph} = -\frac{1}{2h} [V_0(i_0 + 2) - V_0(i_0)] \quad , \quad E_{mh} = -\frac{1}{2h} [V_0(i_0) - V_0(i_0 - 2)] \quad (\text{III-102})$$

III.4.2 Condition de passage à l'hétéroface pour l'équation de continuité des trous

Rappelons que :

i_0^- : limite de l'hétéroface du côté de la couche I_1 .

i_0^+ : limite de l'hétéroface du côté de la couche I_2 .

A. $i = i_0^-$

Au rang i_0^- , nous écrivons que le courant d'émission thermoélectronique (J_{pet}) est égale au courant de conduction – diffusion (J_{pcd}):

$$J_{pcd}(i_0^-) = J_{pet} \quad (\text{III-103})$$

Le courant d'émission thermoélectronique est donné par l'expression suivante

$$J_{pet} = A_{pp} [p(i_0^-) - p(i_0^+)] \quad \text{tel que} \quad A_{pp} = q \sqrt{\frac{2pkT}{m_{0p}}} \quad (\text{III-104})$$

m_{0p} : masse effective du trou supposé identique dans I_1 et I_2 .

$$-q p(i_0^-) \mathbf{m}_p \left. \frac{dV_p}{dx} \right|_{i_0^-} = A_{pp} [p(i_0^-) - p(i_0^+)] \quad (\text{III-105})$$

D'où :

$$\left. \frac{dV_p}{dx} \right|_{i_0^-} = -\frac{A_{pp}}{q \mathbf{m}_p} + \frac{A_{pp}}{q \mathbf{m}_p} \frac{p(i_0^+)}{p(i_0^-)} \quad (\text{III-106})$$

En remplaçant dans l'équation de continuité des trous (équations III-15) on trouve:

$$D_p(i_0^-) = \frac{1}{q} \left. \frac{dV_p}{dx} \right|_{i_0^-} \left[\left. \frac{dV}{dx} \right|_{i_0^-} - \left. \frac{dV_p}{dx} \right|_{i_0^-} \right] + \frac{U(i_0^-) - G(i_0^-)}{\mathbf{m}_p p(i_0^-)} \quad (\text{III-107})$$

Après linéarisation les coefficients de la matrice (M_p) et du vecteur (D_p)

$$A_p(i_0^-) = \frac{A_{bb}}{kT} \frac{p(i_0^+)}{p(i_0^-)} + \frac{h^2}{(kT)^2} \left(\frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} \right)^2 \left[\frac{p(i_0^+)}{p(i_0^-)} \right]^2 \quad (\text{III-108})$$

$$B_p(i_0^-) = 1 + \frac{A_{bb}}{kT} \frac{p(i_0^+)}{p(i_0^-)} + \frac{h^2}{(kT)^2} \left(\frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} \right)^2 \left[\frac{p(i_0^+)}{p(i_0^-)} \right] + \frac{h^2}{2} \frac{1}{\mathbf{m}_p} \left. \frac{d}{dV_p} \left(\frac{U - G}{p} \right) \right|_{i_0^-} \quad (\text{III-109})$$

$$C_p(i_0) = 1 \quad (\text{III-110})$$

$$D_p(i_0^-) = - \left(-h + \frac{h^2}{2kT} \left. \frac{dV}{dx} \right|_{i_0^-} \right) \left(\frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} \right) - \frac{h^2}{2kT} \left(\frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} \right)^2 - A_{bb} \frac{p(i_0^+)}{p(i_0^-)} - \frac{h^2}{2kT} \left(\frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} \right)^2 \left[\frac{p(i_0^+)}{p(i_0^-)} \right]^2$$

$$+ \frac{h^2}{2} \frac{1}{\mathbf{m}_p} \left[\frac{U(i_0^-) - G(i_0^-)}{p(i_0^-)} \right] - [V_{p0}(i_0^- - 1) - V_{p0}(i_0^-)] \quad (\text{III-111})$$

$$A_{bb} = - \left[-h + \frac{h^2}{2kT} \cdot \nabla V(i_0^-) \right] \frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} - \frac{h^2}{kT} \frac{A_{pp}^2}{\mathbf{m}_p^2} \quad (\text{III-112})$$

B. $i = i_0^+$

Au rang i_0^+ , la continuité s'écrit alors :

$$J_{pet} = -q p(i_0^+) \mathbf{m}_p \left. \frac{dV_p}{dx} \right|_{i_0^+} \quad (\text{III-113})$$

La condition de passage exprimée dans (III-113) donne :

$$\left. \frac{dV_p}{dx} \right|_{i_0^+} = - \frac{A_{pp}}{q \mathbf{m}_p} \frac{p(i_0^-)}{p(i_0^+)} - \frac{A_{pp}}{q \mathbf{m}_p} \quad (\text{III-114})$$

Par substitution dans l'équation de continuité, nous obtenons:

$$\left. \frac{d^2 V_p}{dx^2} \right|_{i_0^+} = \frac{1}{q} \left. \frac{dV_p}{dx} \right|_{i_0^+} \left[\left. \frac{dV}{dx} \right|_{i_0^+} - \left. \frac{dV_p}{dx} \right|_{i_0^+} \right] + \frac{U(i_0^+) - G(i_0^+)}{\mathbf{m}_p p(i_0^+)} \quad (\text{III-115})$$

La linéarisation de l'équation précédente aboutit aux coefficients de la matrice (M_p) et du vecteur (D_p) au rang i_0^+ :

$$A_p(i_0^+) = I \quad (\text{III-116})$$

$$B_p(i_0^+) = I + \frac{A_{bb}}{kT} \frac{p(i_0^-)}{p(i_0^+)} + \left(\frac{h}{kT} \right)^2 \left(\frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} \right)^2 \left[\frac{p(i_0^-)}{p(i_0^+)} \right]^2 + \frac{h^2}{2} \frac{d}{dV_p} \left(\frac{U - G}{\mathbf{m}_p P} \right) \Big|_{i_0^+} \quad (\text{III-117})$$

$$C_p(i_0^+) = \frac{A_{bb}}{kT} \frac{p(i_0^-)}{p(i_0^+)} + \left(\frac{h}{kT} \right)^2 \left(\frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} \right)^2 \left[\frac{p(i_0^-)}{p(i_0^+)} \right]^2 \quad (\text{III-118})$$

$$D_p(i_0^+) = - \left[h + \frac{h^2}{2kT} \left. \frac{dV}{dx} \right|_{i_0^+} \right] \left(\frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} \right) - \frac{h^2}{2kT} \left(\frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} \right)^2 - A_{bb} \frac{p(i_0^-)}{p(i_0^+)} - \frac{h^2}{2kT} \left(\frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} \right)^2 \left[\frac{p(i_0^-)}{p(i_0^+)} \right]^2$$

$$+ \frac{h^2}{2} \frac{1}{\mathbf{m}_p} \left[\frac{U(i_0^+) - G(i_0^+)}{p(i_0^+)} \right] - [V_{p0}(i_0 + I) - V_{p0}(i_0^+)] \quad (\text{III-119})$$

$$\text{où } A_{bb} = \left[h + \frac{h^2}{2kT} \frac{dV}{dx} \Big|_{i_0^+} \right] \frac{A_{pp}}{\mathbf{m}_p} + \frac{h^2}{kT} \frac{A_{pp}^2}{\mathbf{m}_p^2} \quad (\text{III-120})$$

III.4.3 Condition de passage à l'hétéroface pour l'équation de continuité des électrons

Le courant d'émission thermoélectronique pour les électrons s'exprime par:

$$J_{net} = A_{nn} [n(i_0^-) - n(i_0^+)] \quad \text{tel que} \quad A_{nn} = q \sqrt{\frac{2pkT}{m_{0n}}} \quad (\text{III-123})$$

m_{0n} : est la masse effective de l'électron.

Le développement de calcul des coefficients de la matrice (M_n) et du vecteur (D_n) au niveau de l'hétéroface se fait de la même manière que pour l'équation de continuité des trous détaillée dans le *paragraphe III.4.2*.

Nous avons développé deux programmes de simulation. Le premier programme est adapté à l'homostucture PIN, il est appelé « programme homostucture ». Le deuxième programme de calcul est adapté à l'hétérostructure PI_1I_2N , il est appelé « programme hétérostructure ».

Les données du programme de calcul sont :

- Les paramètres du modèle de la DOS.
- Les paramètres de la structure : les dopages des parties P et N, les paramètres géométriques (les épaisseurs) et les vitesses de recombinaison en surface sur les contacts ohmiques.
- Les paramètres liés aux conditions externes à la structure : la polarisation, le flux de lumière, la longueur d'onde et la température.

Chacun des deux programmes est effectué pour donner les principales caractéristiques de la structure : la caractéristique courant- tension et la réponse spectrale courant. Le même programme permet de tracer la distribution spatiale de la densité de charge, du champ électrique, du taux de recombinaison, de la densité de courant, ainsi que le profil des bandes d'énergie.

Nous consacrons la première partie de ce chapitre à l'étude de l'homostucture PIN. Nous discutons les différents profils. Nous étudions l'effet de la variation de quelques paramètres externes, des paramètres de la structure et de quelques paramètres de la DOS sur le comportement de la structure.

Dans le but de valider la condition de passage au niveau de l'hétéroface I_1-I_2 dans PI_1I_2N , nous effectuons, dans la deuxième partie, une comparaison entre le résultat de calcul obtenu par le « programme homo » et le résultat de calcul obtenu par le « programme hétéro ». Cette comparaison est menée sur une homostucture PI_1I_1N ayant les mêmes paramètres que l'homostucture PIN.

Dans la troisième partie, nous étudions l'hétérostructure PI_1I_2N composée d'une première partie (PI_1) en a-Si:H et d'une deuxième partie (I_2N) en a-SiGe:H.

IV.1 Paramètres du modèle de la DOS du a-Si:H

Comme paramètres de simulation nous adoptons les valeurs citées fréquemment dans la littérature. Nous les appelons les paramètres du modèle.

Paramètre	Symbole	valeur	Unité
Permittivité relative	ϵ_r	14	(Sans unité)
Largeur du gap du a-Si:H	E_g	1.8	eV
Mobilité des électrons	m_n	10	$cm^2.V^{-1}.s^{-1}$
Mobilité des électrons	m_p	1	$cm^2.V^{-1}.s^{-1}$
Masse effective des électrons	m_{0n}	(0,8)*9,1.10 ⁻³¹	kg
Masse effective des trous	m_{0p}	(2)*9,1.10 ⁻³¹	kg

Les paramètres de la queue de bande de conduction

Densité d'états effective	N_{ct}^0	10 ²¹	$cm^{-3}.eV^{-1}$
Température caractéristique de la queue de bande de conduction	T_c	464	K
Coefficients de capture	C_n^{ct}	10 ⁻⁸	$cm^{-3}.eV^{-1}$
	C_p^{ct}	10 ⁻⁸	$cm^{-3}.eV^{-1}$

Les paramètres de la queue de bande de valence

Densité d'états effective	N_{vt}^0	10 ²¹	$cm^{-3}.eV^{-1}$
Température caractéristique de la queue de bande de conduction	T_v	696	K
Coefficients de capture	C_n^{vt}	10 ⁻⁸	$cm^{-3}.eV^{-1}$
	C_p^{vt}	10 ⁻⁸	$cm^{-3}.eV^{-1}$

Les paramètres des états profonds

Concentration des liaisons pendantes	N_{db}	5.10 ¹⁵	cm^{-3}
Énergie de corrélation	U	0.4	eV
Position de l'état D^-	$E_{db} - E_v$	0.85	eV
Coefficients de capture	C_n^0	3.10 ⁻⁸	$cm^3.s^{-1}$
	C_p^0	3.10 ⁻⁸	$cm^3.s^{-1}$
	C_n^+	15.10 ⁻⁷	$cm^3.s^{-1}$
	C_p^-	15.10 ⁻⁷	$cm^3.s^{-1}$

Tableau.IV.1 Paramètres utilisés dans la simulation.

IV.2 Homostructure PIN

Sur la *Figure.IV.1*, nous présentons la structure PIN. Elle est éclairée uniformément sur la face du côté P (Nous l'appelons : surface avant), elle est soumise à un flux de lumière (F_0) monochromatique de longueur d'onde λ ($I(\text{Å}) = 12400 / h\nu$ (eV)). La structure PIN est également sous une polarisation V_a .

Les paramètres standards du modèle sont donnés dans le *Tableau IV.1*. Les paramètres de géométrie et de dopage sont cités dans le *Tableau.IV.2*, ces valeurs sont proches de ce qu'on rencontre dans la littérature. La vitesse de recombinaison des électrons et la vitesse de recombinaison des trous sur les deux contacts sont données sur le *Tableau IV.3*.

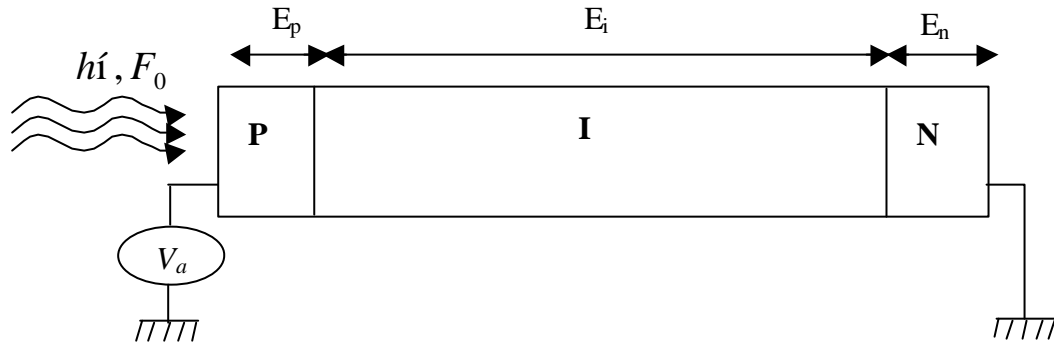


Figure.IV.1 Structure PIN polarisée par une tension V_a et sous une lumière monochromatique de flux de photons incidents F_0 , et d'énergie de photon $h\nu$

	Couche (P)	Couche (I)	Couche (N)
Epaisseur (Å)	200 = E_p	8000 = E_i	200 = E_n
Dopage (cm^{-3})	$10^{17} = N_{ap}$	0	$5.10^{16} = N_{dn}$

Tableau.IV.2 Paramètres standards de la structure PIN

	Surface avant	Surface arrière
Vitesse de recombinaison des électrons (S_n)	10^6 cm/s	10^6 cm/s
Vitesse de recombinaison des trous (S_p)	10^5 cm/s	10^5 cm/s

Tableau.IV.3 Vitesses de recombinaison

IV.2.1 Profils des bandes et distribution des charges électriques

La structure est supposée polarisée à $V_a = -1$ volt. Nous présentons ici, le résultat de calcul, à l'obscurité et sous lumière, des profils :

- bandes d'énergie.
- densité de charge.
- champ électrique.
- potentiel électrostatique.
- densité de courant.
- taux de recombinaison.

A. A l'obscurité

Sur les *Figure.IV.2-a* et *Figure.IV.3*, nous avons représenté la répartition spatiale de la densité de charge (\mathbf{r}) ainsi que les composantes : densité de charge dans la queue de bande de conduction (Q_{ct}), la densité de charge dans la queue de bande de valence (Q_{vt}) et la densité de charge dans les liaisons pendantes (Q_{db}).

Dans la région dopée P, c'est la densité des dopants ' N_{ap} ' et la concentration des trous de la queue de bande de valence ' Q_{vt} ' qui déterminent la densité de charge. Dans la région dopée N, c'est la densité des dopants ' N_{dn} ' et la concentration des électrons de la queue de bande de conduction Q_{ct} qui déterminent la densité de charge. La région non dopée peut être divisée en cinq différentes régions de charge d'espaces [39]. La densité de charge dans la première zone de charge d'espaces (région (I)) est dominée par la charge dans la queue de bande de valence. Elle est suivie par la région (II) dominée par la charge sur les liaisons pendantes. Dans la partie opposée (région (V)), c'est la queue de bande de conduction qui détermine la densité de charge. Les liaisons pendantes déterminent la charge dans la région (IV). La région centrale (région (III)) de la PIN est électriquement quasi neutre.

Le Profil du champ électrique, présenté sur la *Figure IV.2-b*, est caractérisé par une région où la variation est très faible. Cette région correspond à la région quasi neutre (III). La zone frontale et la zone arrière sont caractérisées par de fortes variations du champ électrique.

Sur la *Figure.IV.4*, nous montrons le profil des bandes. La variation des quasi niveaux de Fermi forment deux plateaux dans les régions (1) et (2) et une variation quasi linéaire dans la région (3).

Le profil de la densité de courant est reporté sur la *Figure IV.5-a*. La densité de courant totale est très faible. La contribution des électrons (J_n) est prédominante dans la région arrière. Tandis que le courant dû aux trous est prédominant dans la région frontale.

Sur les *Figures IV.5-b* et *IV.6*, nous avons représenté le taux net de recombinaison et ses composantes U_{ct} , U_{vt} et U_{db} . Nous remarquons que le taux de recombinaison dû aux liaisons pendantes U_{db} est prédominant. D'autre part, le taux de recombinaison est de signe négatif, ceci est dû à ce qu'on appelle : « génération thermique » [40,41].

B. Sous lumière

La structure est éclairée sur la face P, par un flux de photons $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, avec un coefficient d'absorption $\alpha = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$.

Comme nous le remarquons sur la *Figure IV.7*, les quasi niveaux de Fermi sont séparés sous lumière.

Dans toute la région frontale, la charge sur la queue de bande de valence détermine la densité de charge totale (*Figure IV.9*).

Dans la région non dopée (I), la lumière crée des paires électrons- trous qui sont tout de suite séparés par le champ électrique. Les charges sont drainées par le champ électrique : l'électron vers la région de type N et le trou vers la région de type P. Les électrons photogénérés proche de P doivent faire tout le parcours de la zone frontale jusqu'au contact arrière. Par contre, les trous sont collectés dans la région frontale proche de la zone de génération. Le courant des trous prédomine dans la zone frontale uniquement, tandis que le courant des électrons est prédominant dans le reste de la structure (*Figure IV.10-a*).

Près des interfaces **P-I** et **I-N**, le taux de recombinaison présente un maximum (*Figure IV.11*)[39, 42]

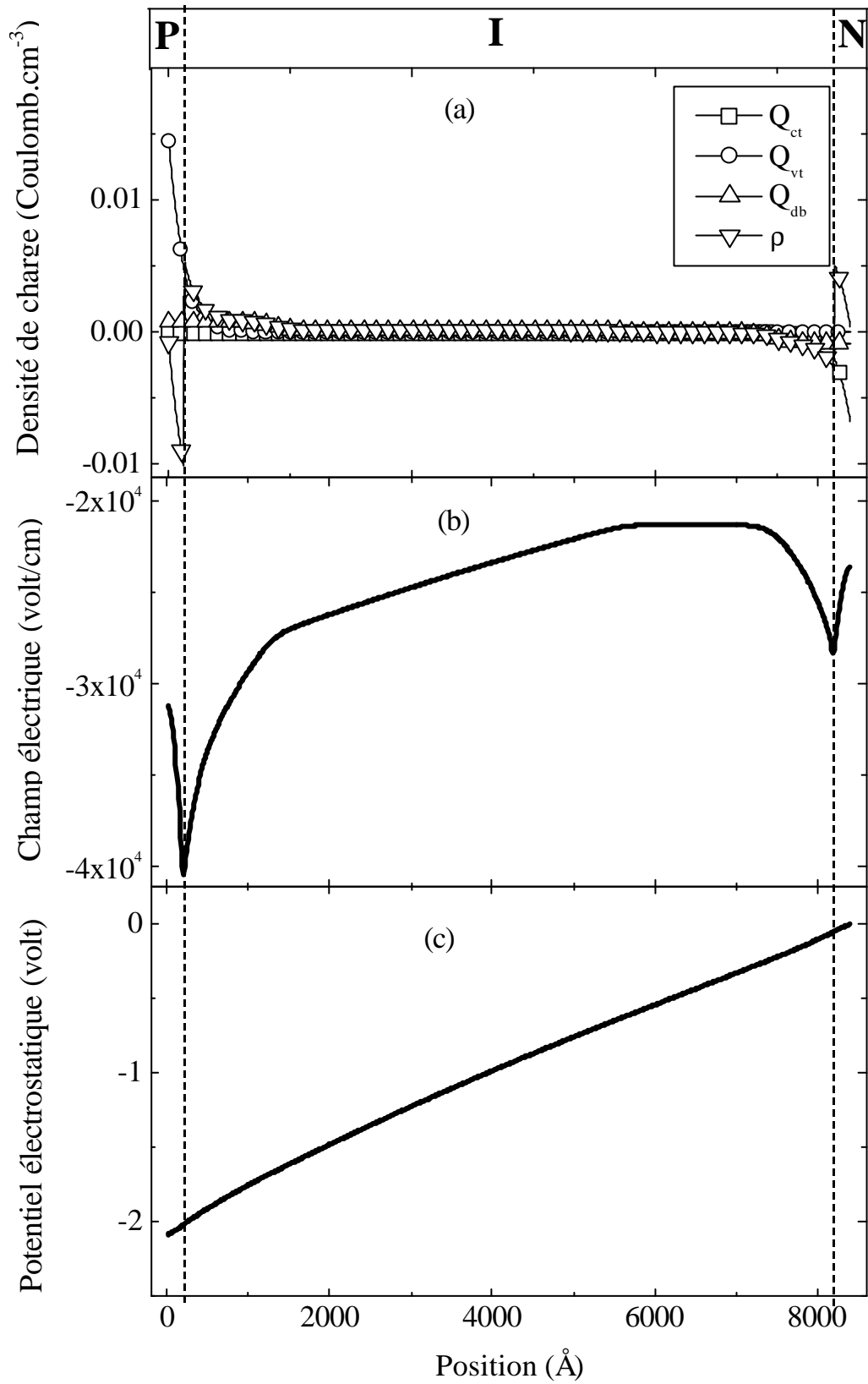


Figure.IV.2 Le profil de la densité de charge, du champ électrique et du potentiel électrostatique, à l'obscurité et pour $V_a = -1$ volt

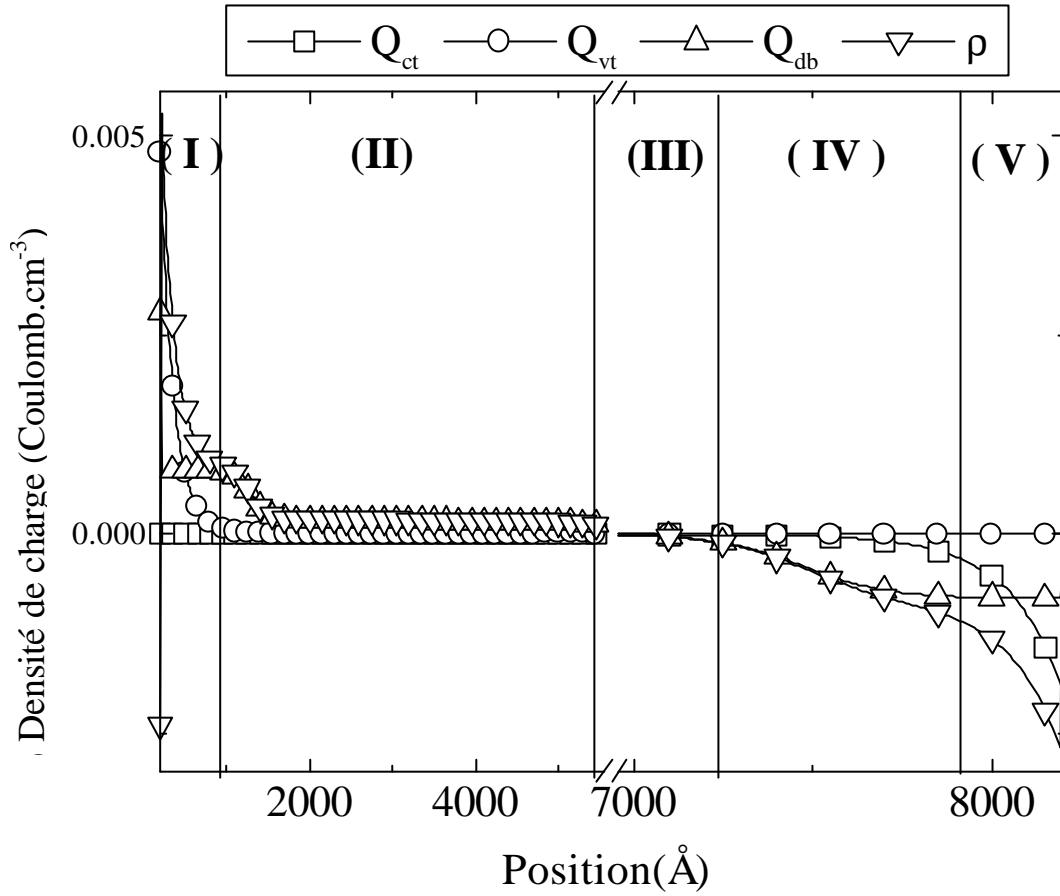


Figure.IV.3 Le profil de la densité de charge dans la région non dopée à l'obscurité, pour $V_a = -1$ volt.

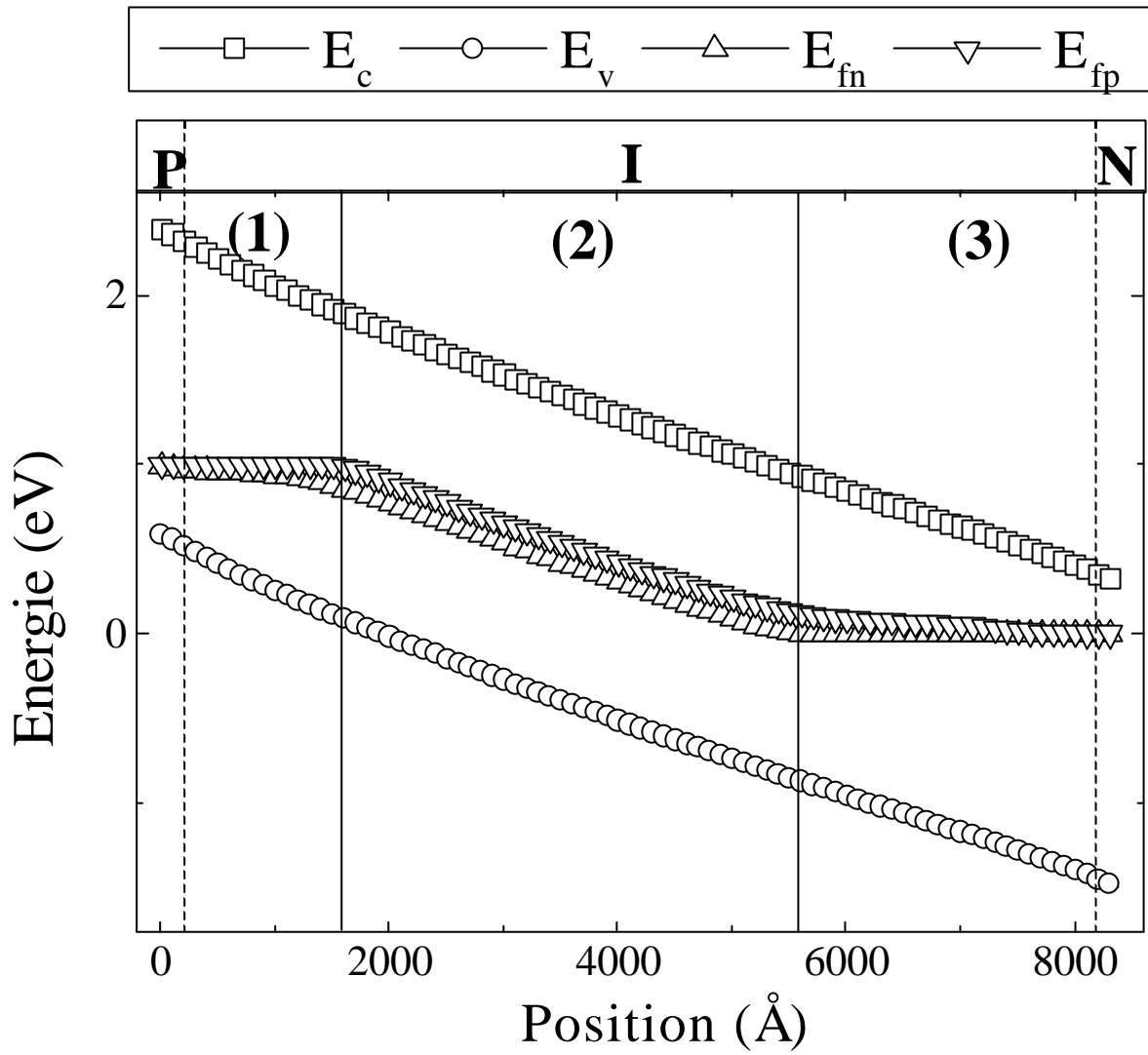


Figure.IV.4 Le profil des bandes énergétiques à l'obscurité, pour $V_a = -1$ volt.

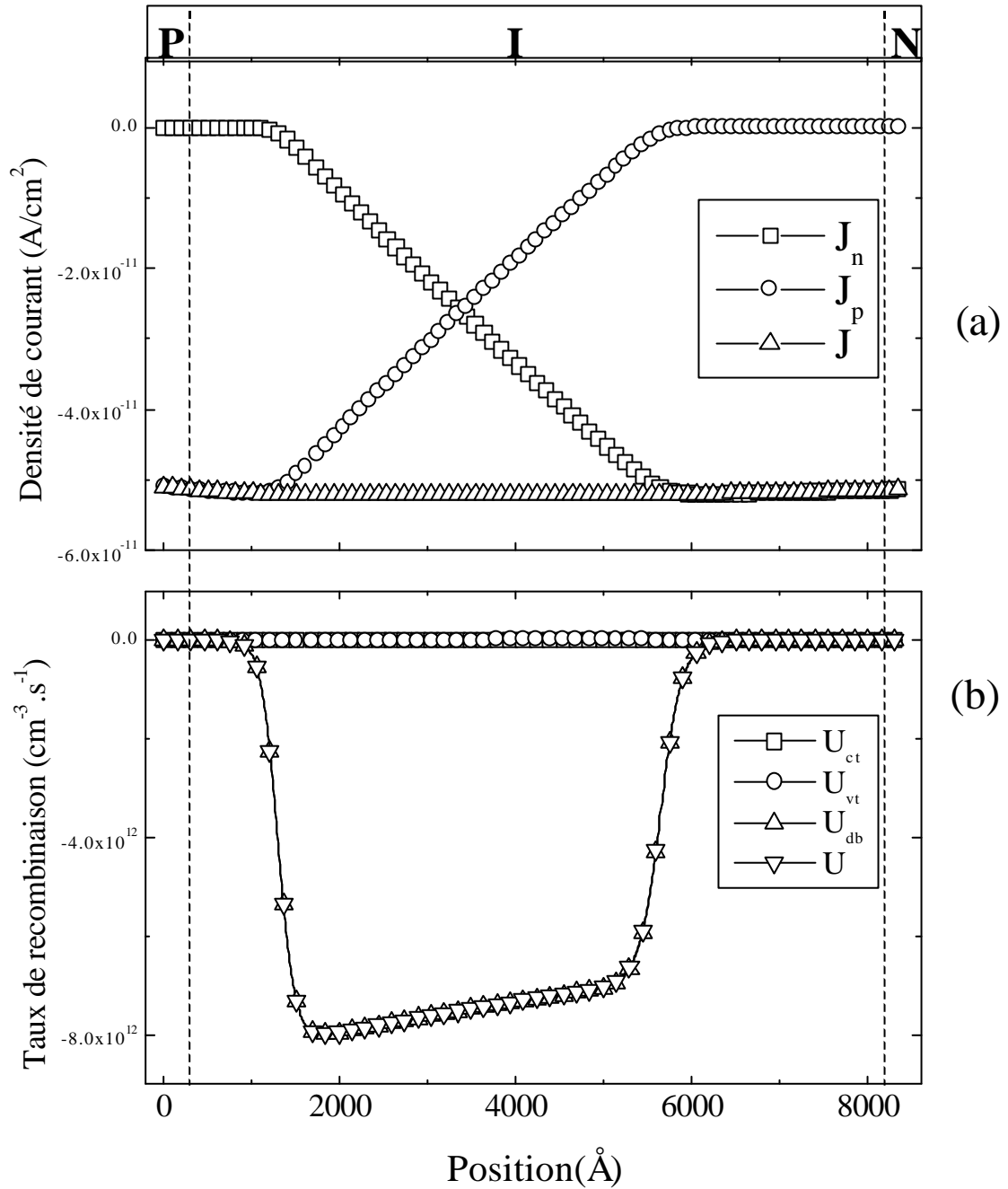


Figure.IV.5 Le profil de la densité de courant et du taux de recombinaison (présenté en échelle linéaire), à l'obscurité, pour $V_a = -1$ volt.

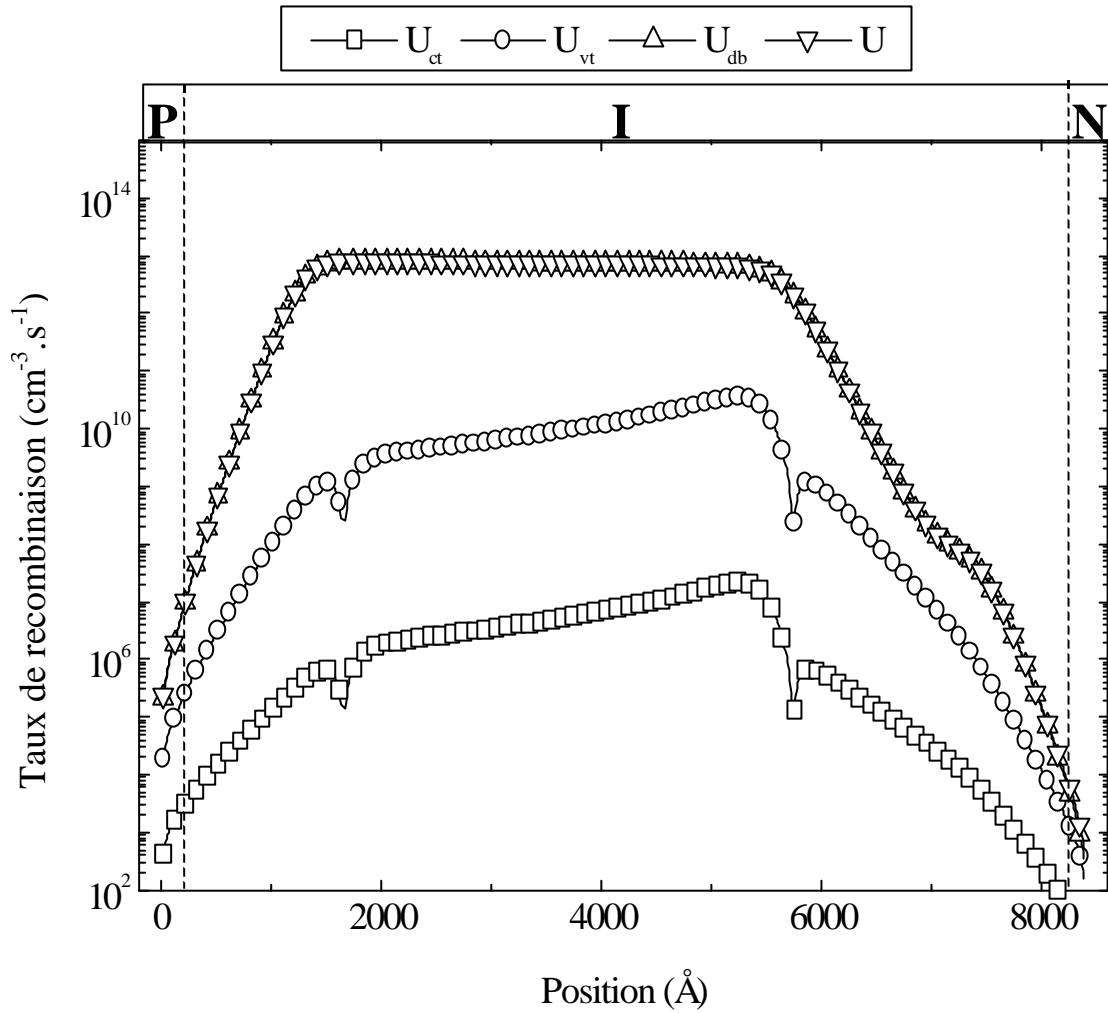


Figure.IV.6 Le profil du taux de recombinaison (présenté en échelle logarithmique), à l'obscurité, pour $V_a = -1$ volt.

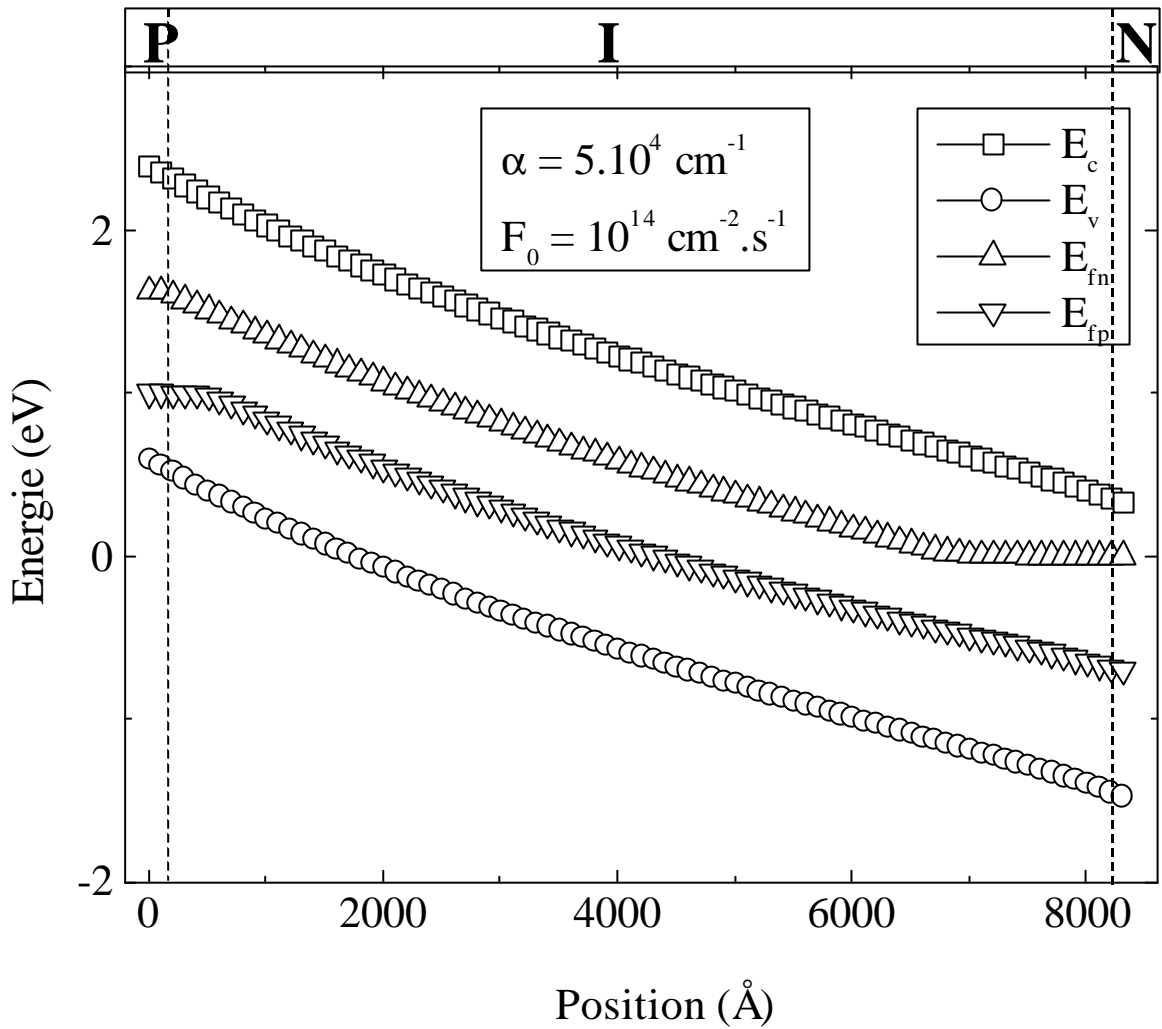


Figure.IV.7 Le profil des bandes d'énergie énergétiques à une polarisation $V_a = -1$ volt et sous lumière $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\alpha = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$.

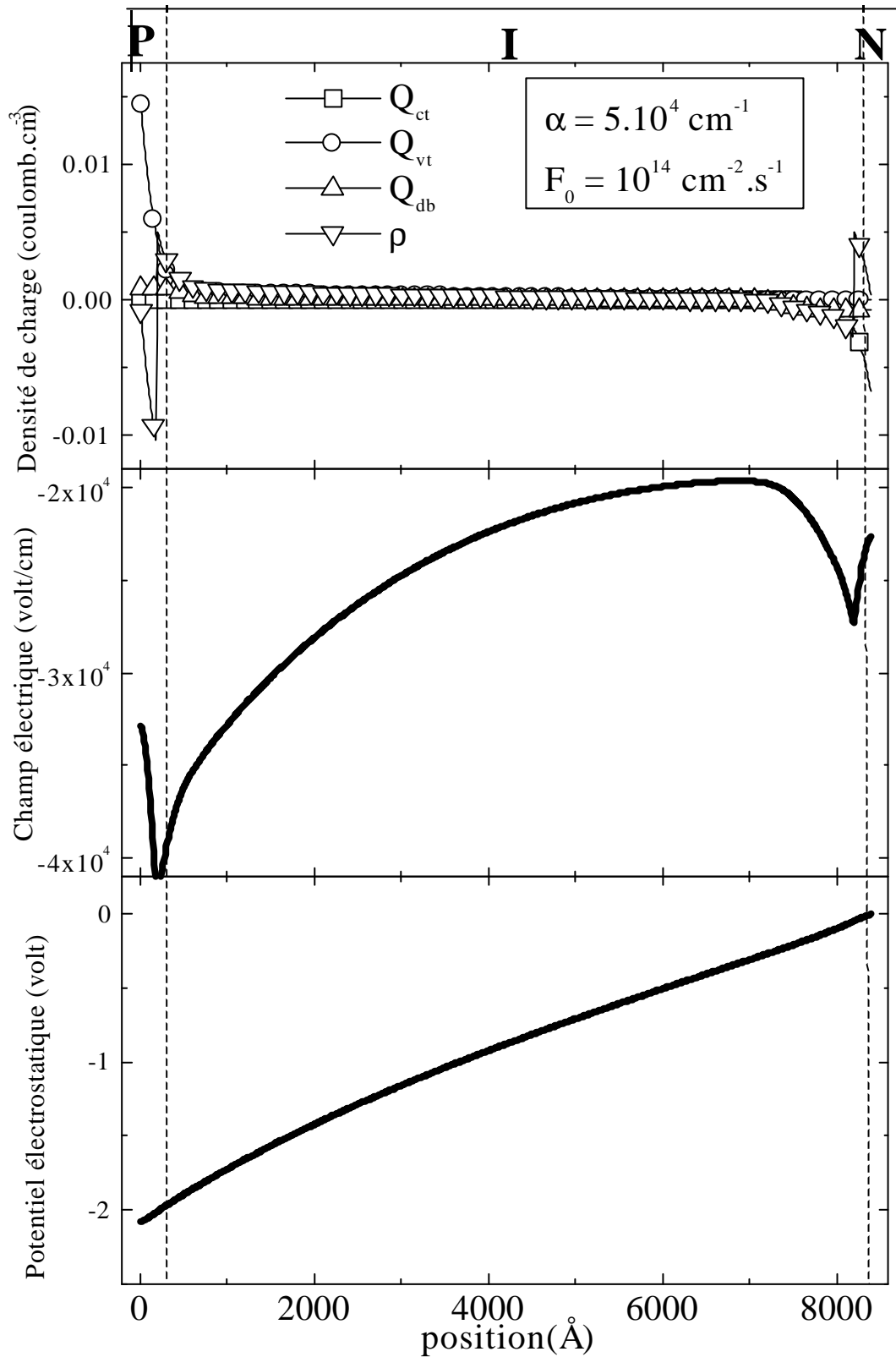


Figure.IV.8 Le profil de la densité de charge, du champ électrique, du potentiel électrostatique à une polarisation $V_a = -1$ volt et sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\alpha = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$).

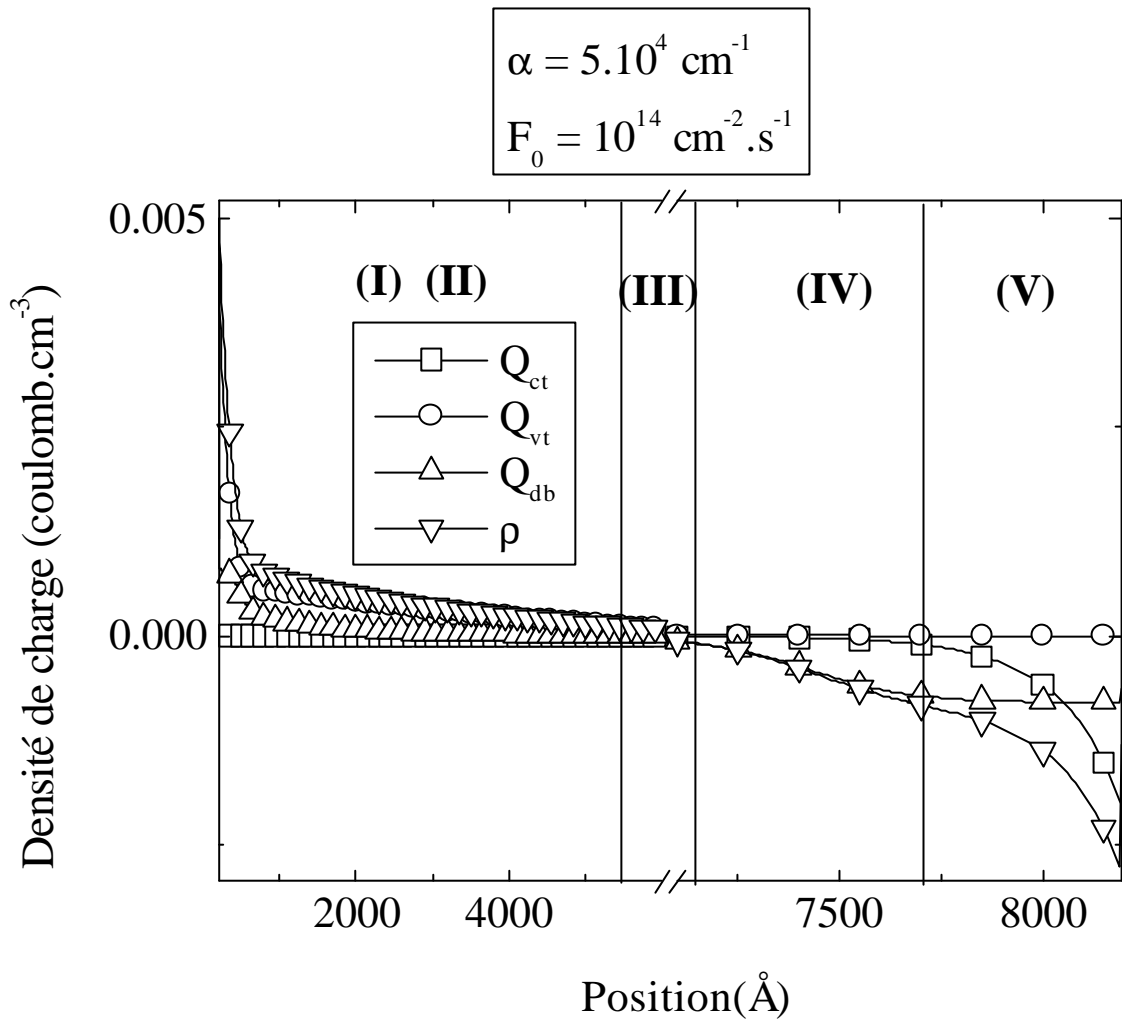


Figure.IV.9 Le profil de la densité de charge, dans la région non dopée, à une polarisation $V_a = -1$ volt et sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\alpha = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$).

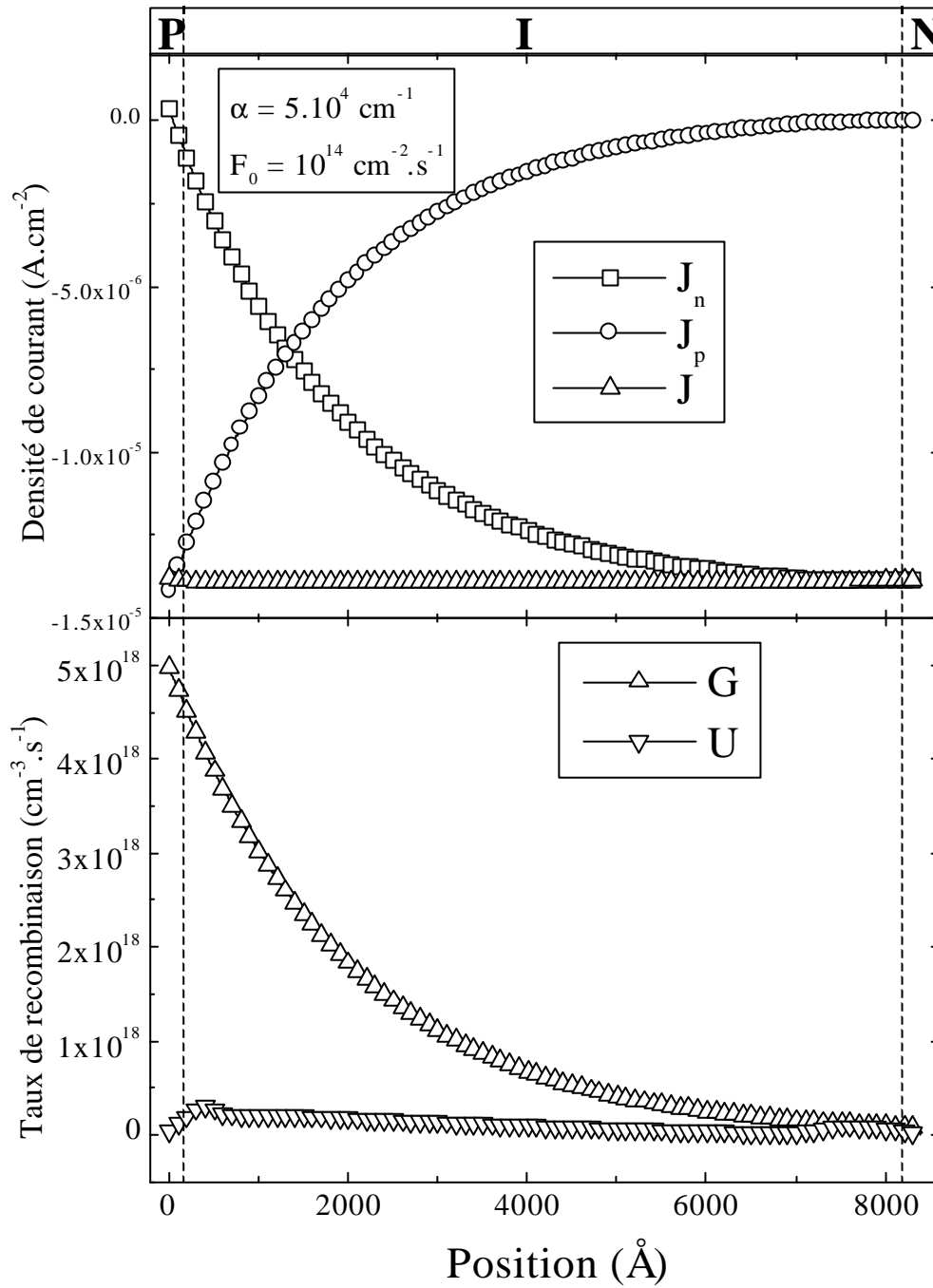


Figure.IV.10 Le profil de la densité de courant et du taux de recombinaison à une polarisation $V_a = -1$ volt et sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\alpha = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$).

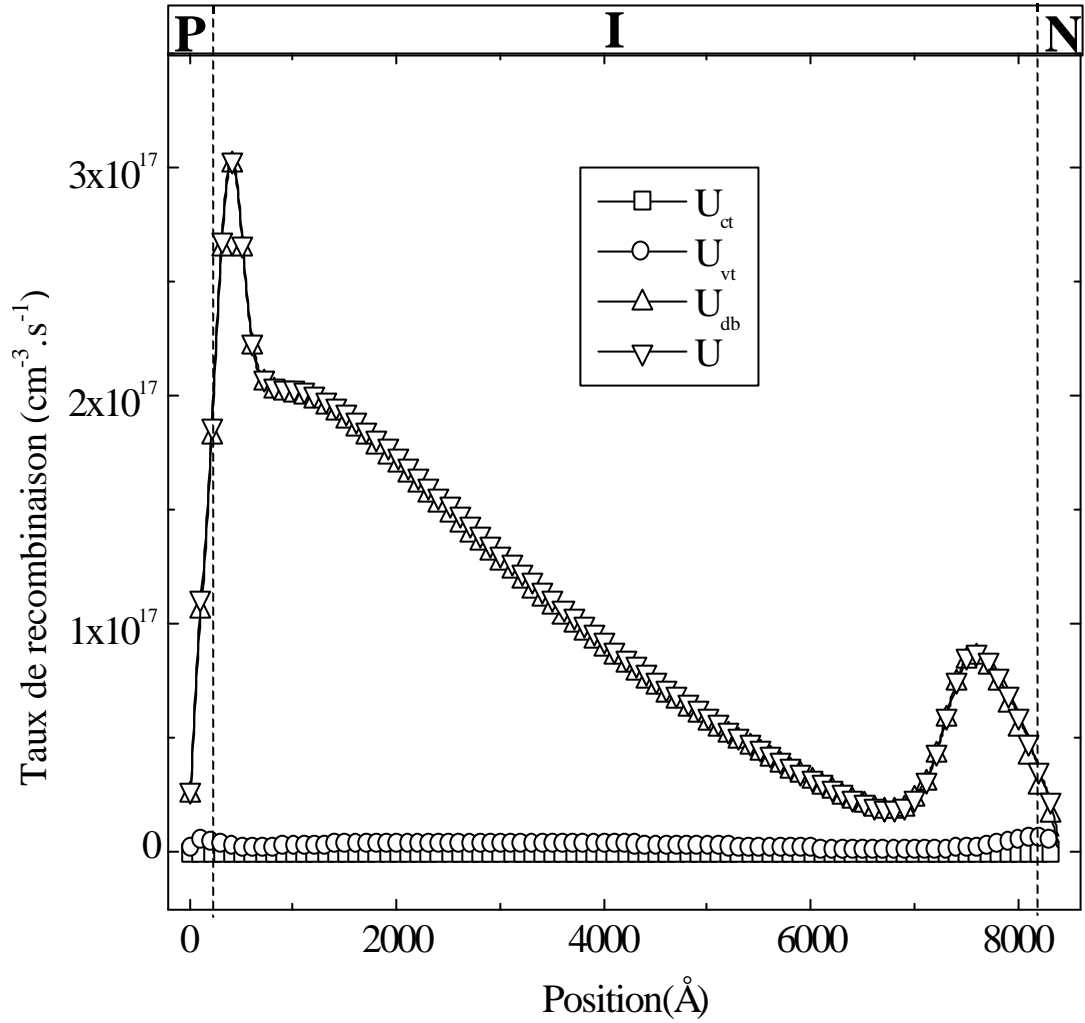


Figure.IV.11 Le profil du taux de recombinaison et ses composantes à une polarisation $V_a = -1$ volt et sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$).

IV.2.2 Effet de la polarisation

Dans le but d'étudier la PIN sous différentes conditions de polarisation, nous avons représenté le profil de la densité de charge, du champ électrique et du potentiel électrostatique. Les *Figures IV.12* et *Figure IV.13* montrent le profil du champ électrique et le profil de la densité de charge, respectivement.

Nous retrouvons les variations habituelles du champ électrique et de la densité de charge. En effet, lorsque la polarisation augmente algébriquement, l'intensité du champ électrique interne diminue. Cet effet s'accompagne du rétrécissement de la zone quasi neutre. Nous pouvons le voir sur le profile de la densité de charge.

Le potentiel électrostatique est reporté sur la *Figure IV.14*. A l'obscurité et sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 510^4 \text{ cm}^{-1}$), le potentiel électrostatique augmente avec la polarisation sur tout le profil.

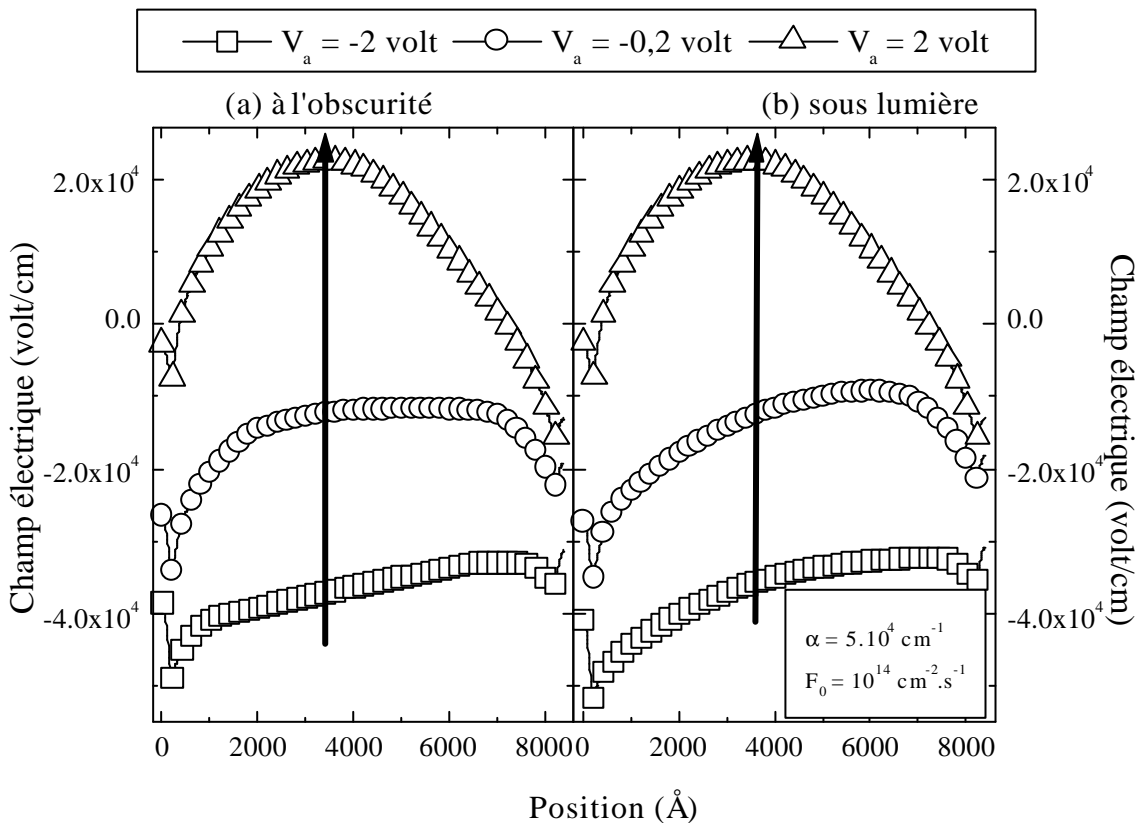


Figure.IV.12 Le profil du champ électrique pour différentes valeurs de polarisations, à l'obscurité (a) et sous une lumière de $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 510^4 \text{ cm}^{-1}$ (b).

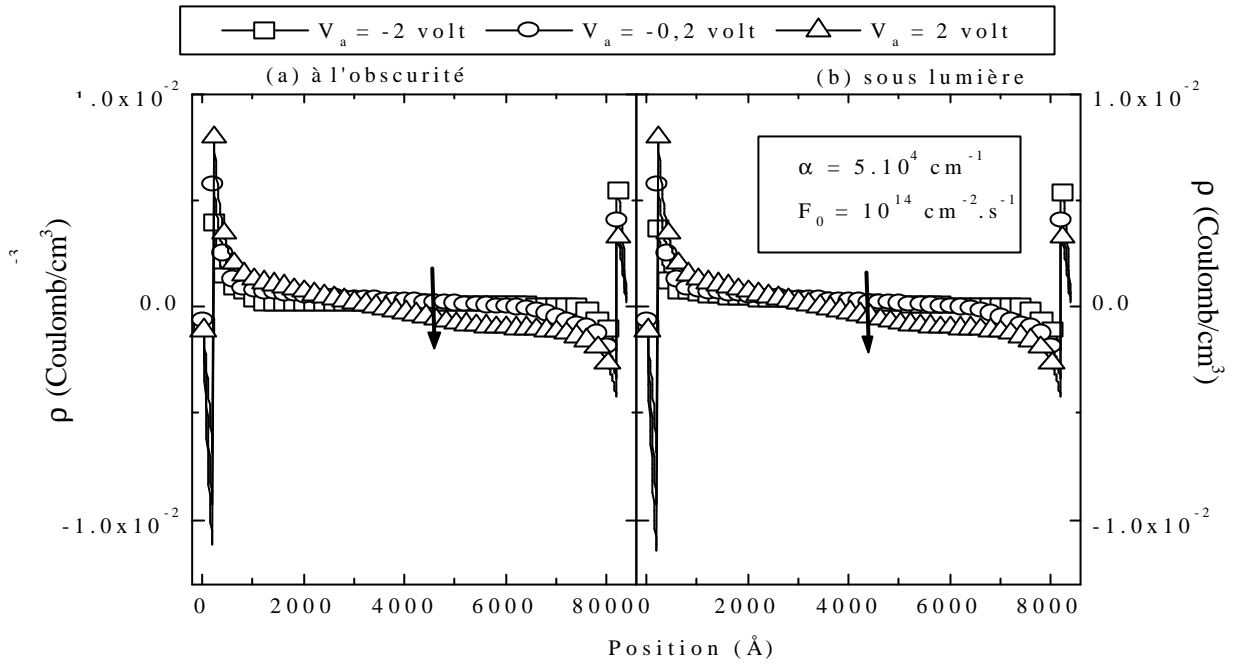


Figure.IV.13 Le profil de la densité de charges pour différentes valeurs de polarisations, à l'obscurité (a) et sous une lumière de $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 510^4 \text{ cm}^{-1}$ (b).

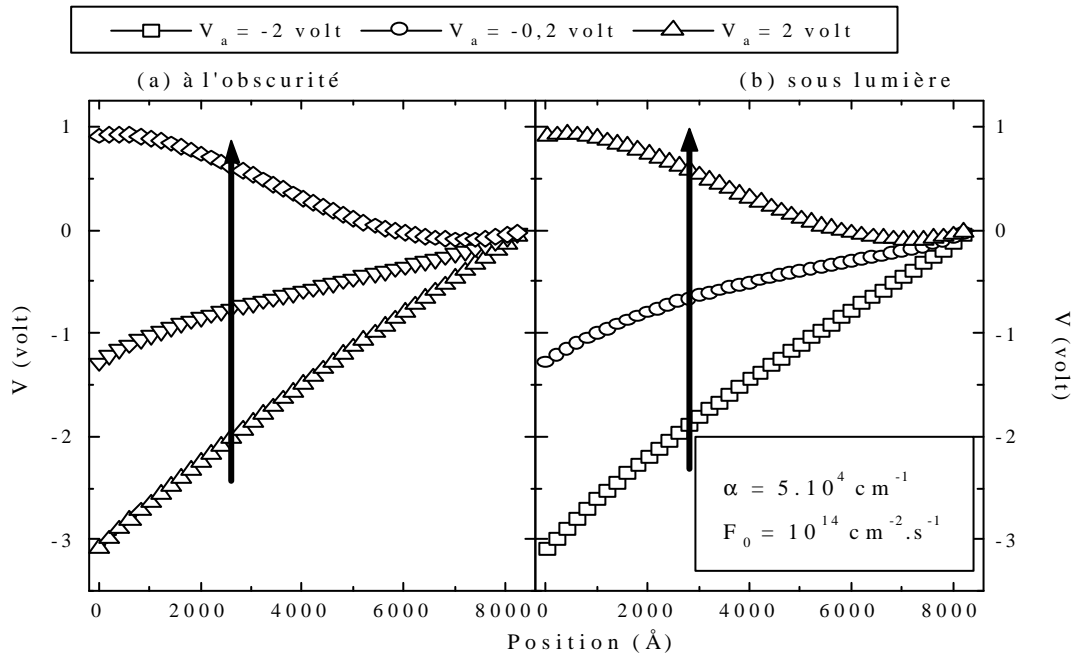


Figure.IV.14 Le profil du potentiel électrostatique pour différentes valeurs de polarisations, à l'obscurité (a) et sous une lumière de $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 510^4 \text{ cm}^{-1}$ (b)

IV.2.3 Effet de la modification des paramètres de la lumière

Les performances d'un dispositif optoélectronique sont, essentiellement, jugées à partir de la variation de sa réponse pour différentes conditions d'illumination. En se mettant dans le cas d'une excitation monochromatique, nous étudions l'effet du flux de photons F_0 et de la longueur d'onde. La correspondance entre la longueur d'onde et \mathbf{a} est unique. L'étude en fonction du coefficient d'absorption \mathbf{a} est, alors, équivalente à l'étude de la réponse spectrale.

Nous représentons, sur la *Figure IV.15*, la caractéristique courant-tension pour plusieurs valeurs de F_0 comprises entre 0 et $10^{16} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ en fixant \mathbf{a} à la valeur $5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$.

Nous remarquons que la variation de F_0 a l'influence directe sur la valeur du courant sous polarisation négative. Sous polarisation positive, l'effet de la lumière n'apparaît qu'à partir de $F_0 = 10^{16} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

A une polarisation $V_a = -2$ volt nous avons représenté la variation de la densité de courant avec l'augmentation de F_0 sur la *figure IV.16*. Nous remarquons que la densité de courant varie linéairement avec F_0 .

Sur la *Figure IV.17*, nous avons représenté le profil du taux de recombinaison pour trois valeurs du coefficients d'absorption \mathbf{a} , faible ($\mathbf{a} = 7 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$), moyenne ($\mathbf{a} = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$) et grande ($\mathbf{a} = 5 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$). Nous remarquons que le pic près de l'interface P-I augmente avec \mathbf{a} , tandis que le pic près de l'interface I-N baisse avec l'augmentation de \mathbf{a} . Nous pouvons donc conclure que la recombinaison s'effectue essentiellement près de l'interface P-I quand l'énergie de photons est grande, et s'effectue près de l'interface I-N quand l'énergie de photons est faible [42]. Cela correspond bien à la pénétration de la lumière de faible coefficient d'absorption.

Sur les *Figures IV.18* et *IV.19*, nous avons représenté la caractéristique courant-tension pour plusieurs valeurs de \mathbf{a} . Nous avons fixé le flux de photons incidents F_0 à $10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

Nous notons que la variation de \mathbf{a} n'a pas d'effet sur le courant en polarisation positive, tandis qu'en polarisation négative la variation du courant avec \mathbf{a} n'est pas monotone, elle présente un pic comme nous le montrons sur la *Figure IV.20* pour plusieurs polarisations négatives. La diminution de la densité de courant pour les forts

coefficients d'absorption est due au fait que la lumière est absorbée en surface d'où la difficulté de la collection des porteurs à la surface arrière. Nous notons que la position du pic ne change pas avec la polarisation, mais l'intensité du maximum augmente avec la valeur absolue de la polarisation.

La variation de la densité de courant en court circuit (J_{cc}) en fonction du flux de photons incidents F_0 est portée sur la *Figure IV.21-b*. Nous constatons que J_{cc} est presque stationnaire dans les cas des faibles flux F_0 , mais dans le cas des forts flux F_0 , le J_{cc} varie d'une façon importante.

Sur la *Figure IV.21-a*, nous avons porté la variation de la tension en circuit ouvert V_{oc} en fonction du flux de photons incidents F_0 . Nous notons que le V_{oc} augmente avec la croissance de F_0 . Nous remarquons que pour les faibles valeurs de F_0 la valeur de V_{oc} atteint un maximum puis diminue en augmentant le coefficient α , le maximum dépend de la valeur de F_0 . Pour les grandes valeurs de F_0 , V_{oc} augmente avec α

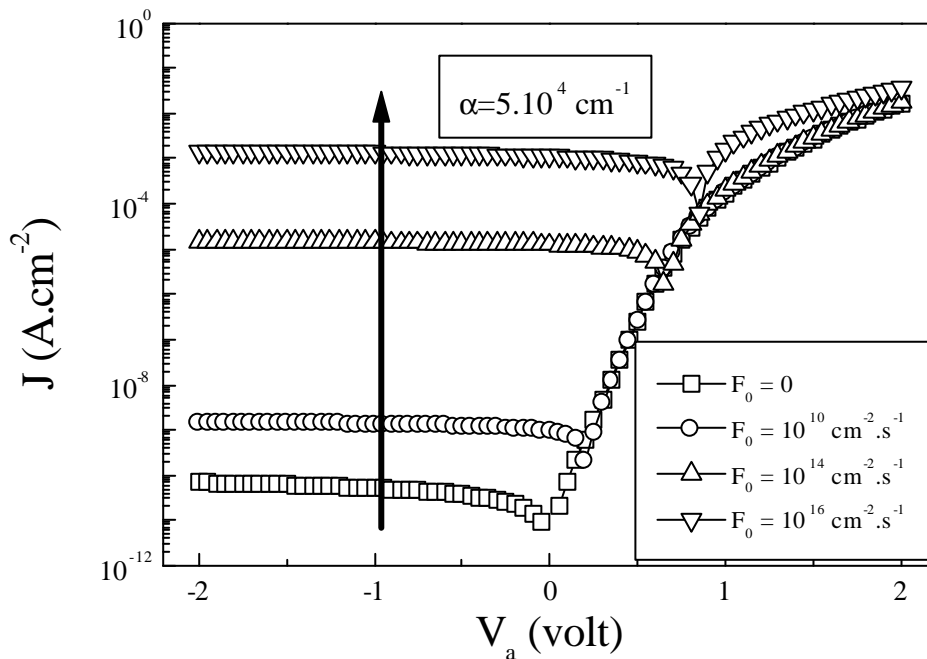


Figure.IV.15 Caractéristiques courant-tension pour plusieurs valeurs du flux de photons incidents F_0 avec $\alpha = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$.

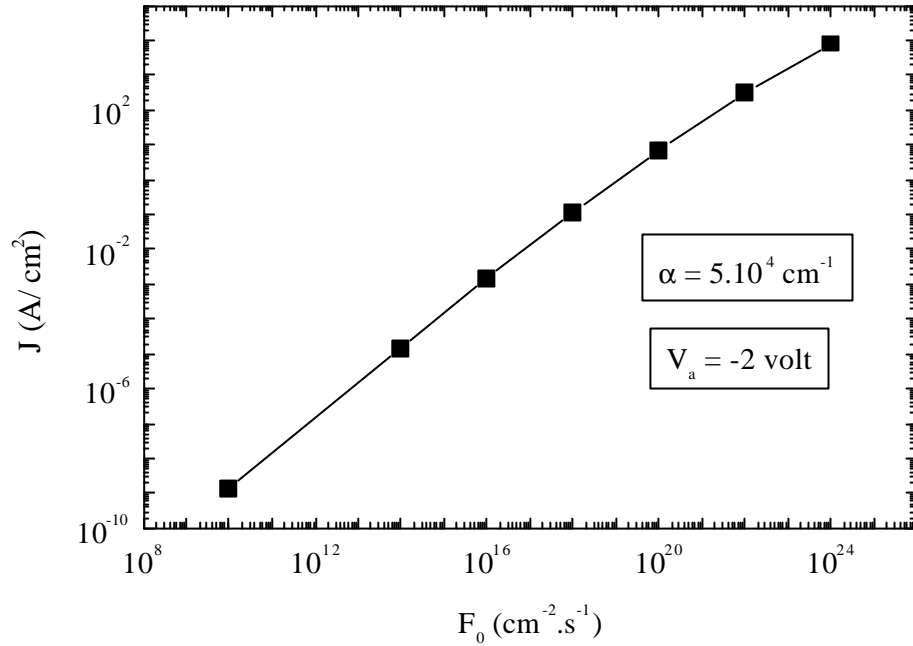


Figure.IV.16 La densité de courant en fonction du flux de photons sous la polarisation $V_a = -2$ volt avec $\alpha = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$

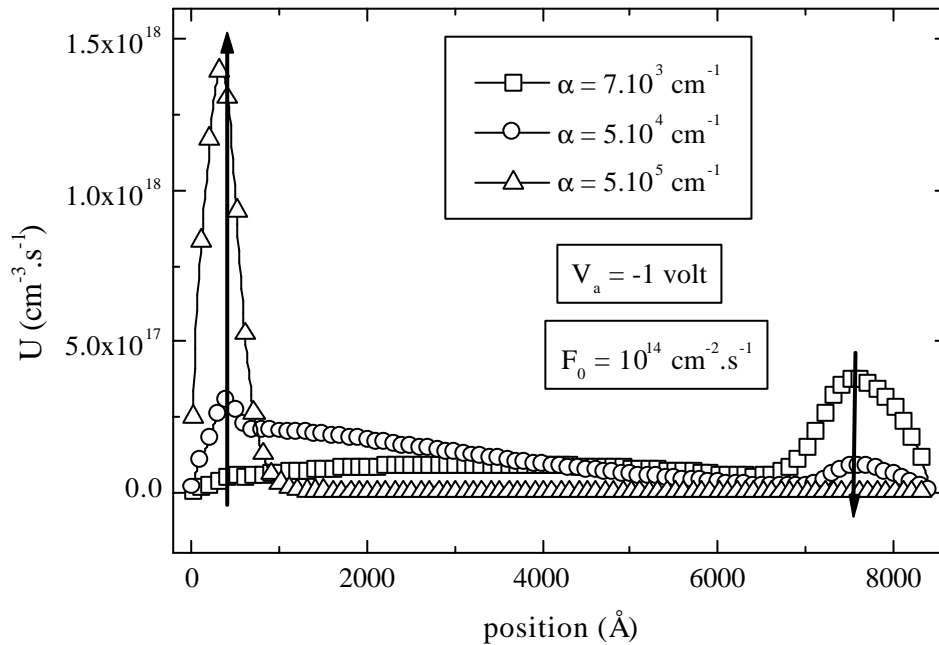


Figure.IV.17 Le profil du taux de recombinaison pour plusieurs valeurs du coefficient d'absorption avec un flux de photons $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ et une polarisation $V_a = -1$ volt.

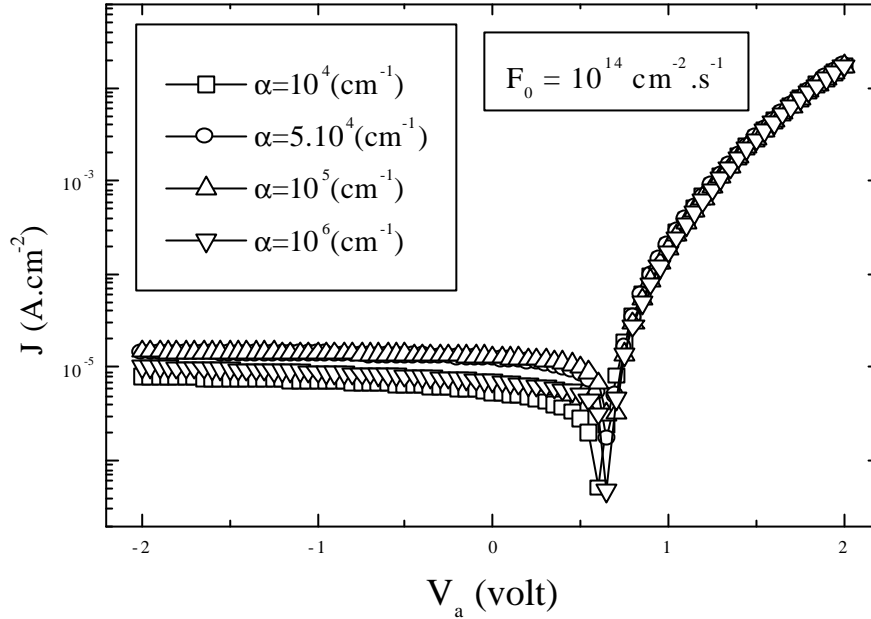


Figure.IV.18 Caractéristique courant-tension sous lumière pour plusieurs valeurs du coefficient d'absorption α avec un flux de photons $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

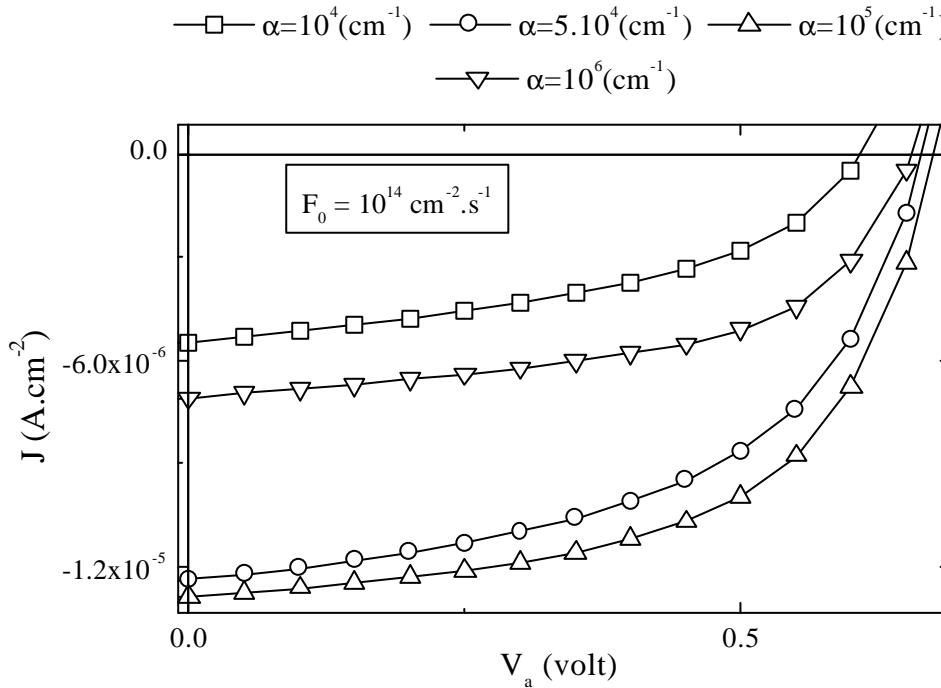


Figure.IV.19 Caractéristique courant-tension sous lumière pour plusieurs valeurs du coefficient d'absorption α avec un flux de photons $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

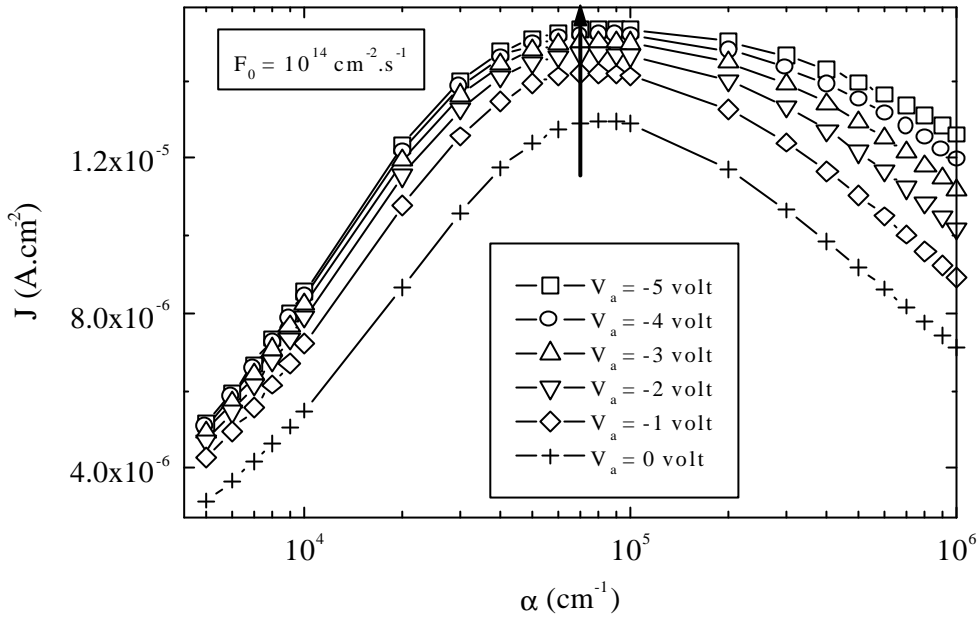


Figure.IV.20 Caractéristique $J(\alpha)$ pour plusieurs valeurs de la polarisation avec un flux de photons de $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

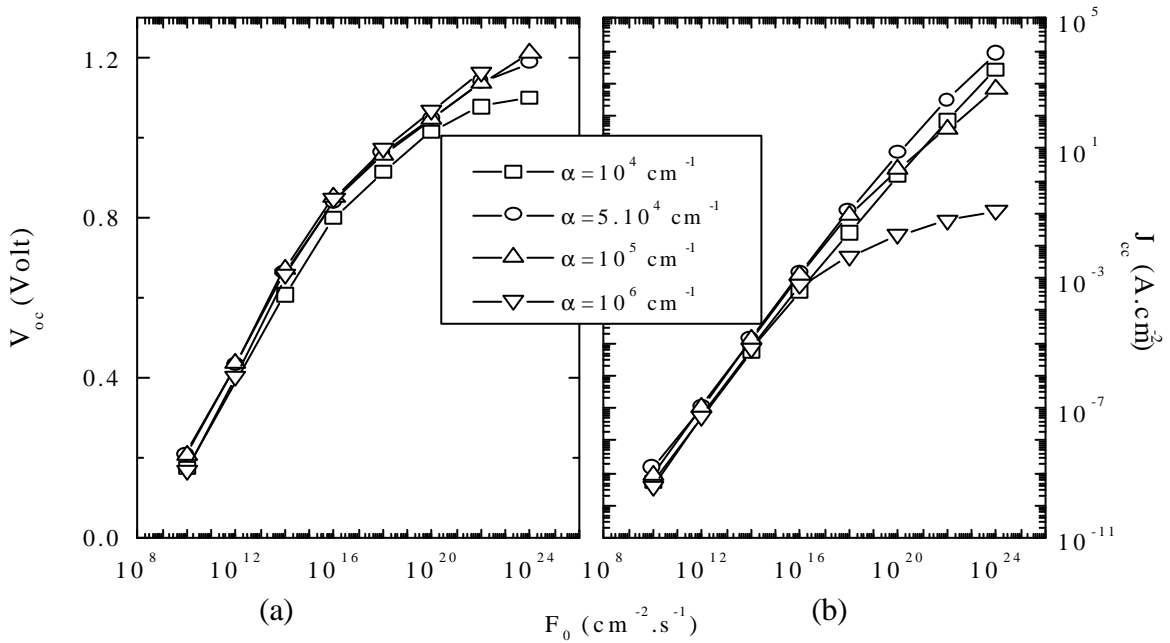


Figure.IV.21 (a) Le potentiel en circuit ouvert en fonction du flux de photons incident pour plusieurs valeurs du coefficient d'absorption α . (b) Le courant en court circuit en fonction du flux de photons incident pour plusieurs valeurs du coefficient d'absorption α .

IV.2.4 Effet de la température

Nous montrons, sur la *Figure IV.22*, la caractéristique courant-tension (en échelle logarithmique) pour trois valeurs de la température (300 K, 350 K, 400 K) ; à l'obscurité (*Figure IV.22-a*) et sous lumière (*Figure IV.22-b*). Pour mieux voir les variations, nous avons représenté les mêmes courbes en échelle linéaire sur *Figure IV.23*.

La *Figure IV.24*.montre la variation de la densité de courant, dans le cas d'une polarisation négative et à l'obscurité, en fonction de la température [43].

Sur la *Figure IV.25*, nous présentons les variations de la tension en circuit ouvert (V_{oc}) et le courant en court circuit (J_{cc}) sous lumière.

La tension dans les conditions du circuit ouvert (V_{oc}) et le courant en court circuit (J_{cc}) varient inversement et proportionnellement à la température.

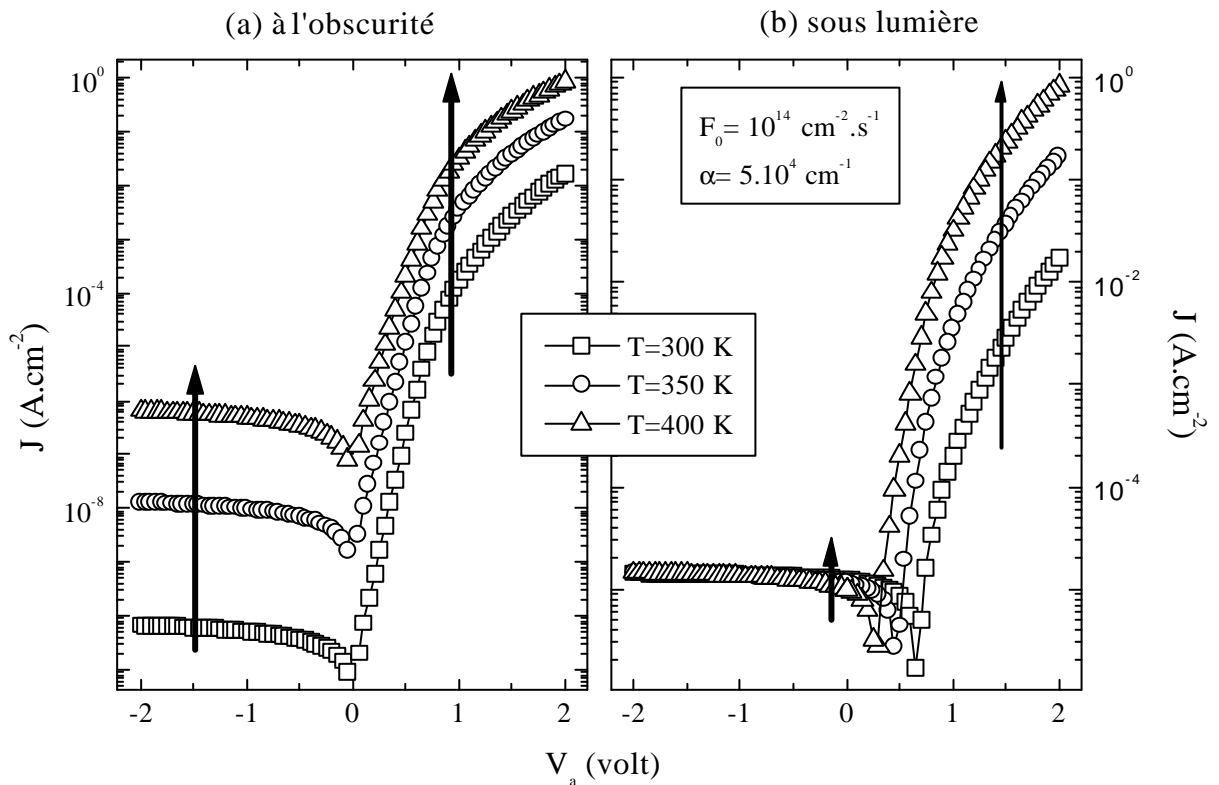


Figure.IV.22 Caractéristiques courant-tension pour plusieurs valeurs de la température à l'obscurité (a) et sous lumière ($\alpha = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$, $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} .\text{s}^{-1}$) (b).

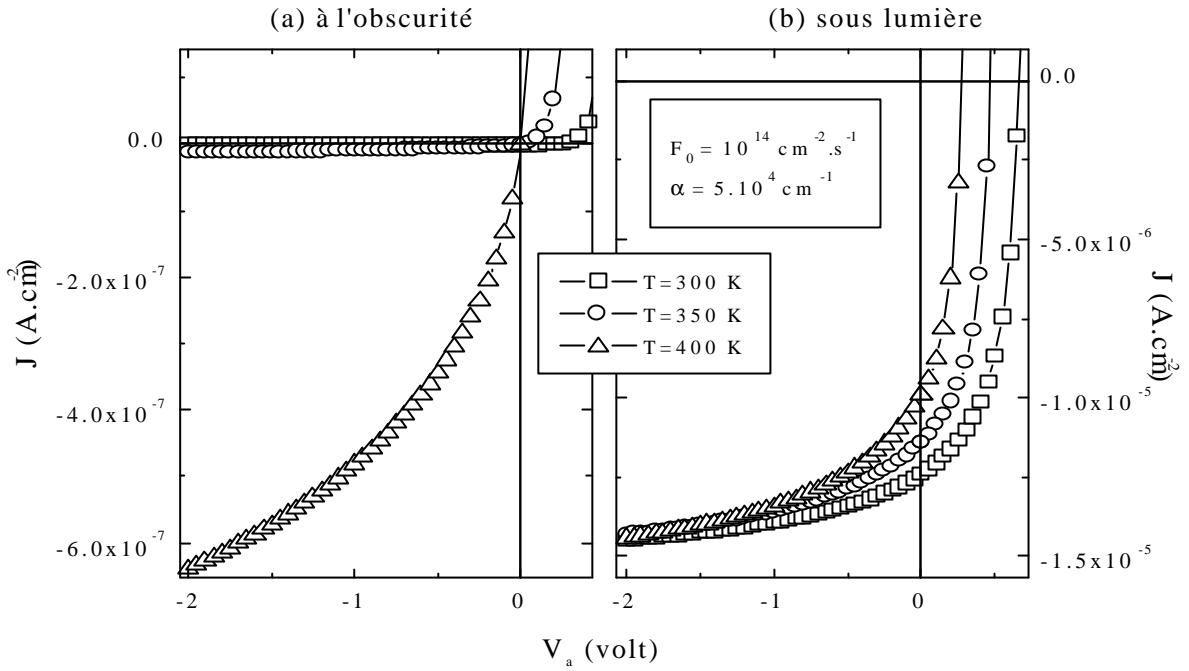


Figure.IV.23 Caractéristique courant-tension pour plusieurs valeurs de la température à l'obscurité (a) et sous lumière $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$, $\alpha = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ (b).

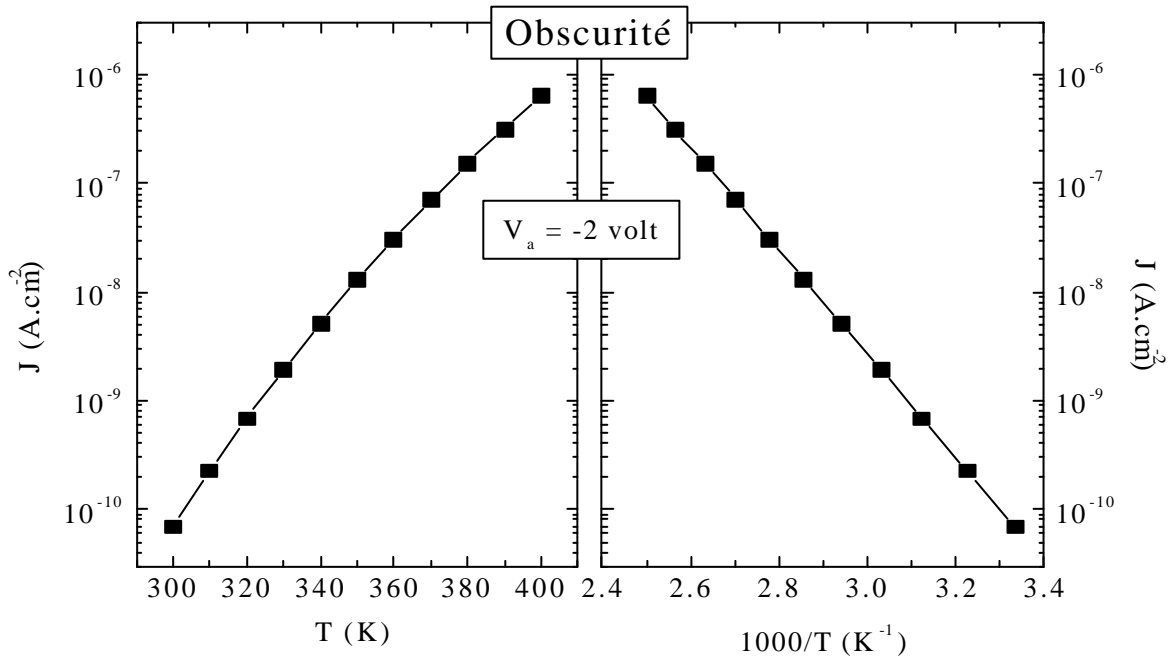


Figure.IV.24 Densité de courant à l'obscurité et à une polarisation de -2 volt en fonction de la température

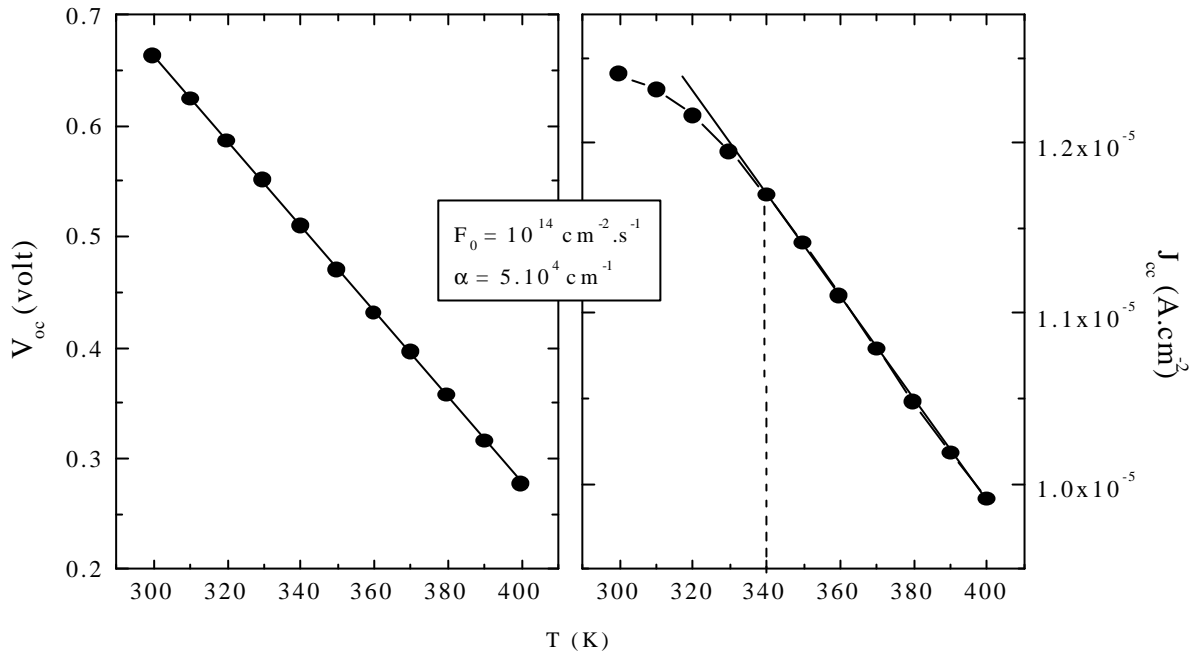


Figure.IV.25 La tension en circuit ouvert et la densité de courant en court circuit en fonction de la température sous une lumière de $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\alpha = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$.

IV.2.5 Effet de quelques paramètres du modèle de la DOS

Dans cette partie, nous étudions l'effet de la variation des paramètres suivants :

- La concentration des liaisons pendantes (N_{db}) ;
- La température caractéristique de la queue de bande de conduction (T_c)
- La température caractéristique de la queue de bande de valence (T_v) ;

Pour chaque paramètre, nous avons représenté la caractéristique $J(V)$ à l'obscurité et sous lumière.

A. Effet de la concentration des liaisons pendantes N_{db}

Sur la *figure IV.26*, nous avons tracé les profils du taux de recombinaison en variant la concentration des liaisons pendantes, dans quatre conditions différentes de polarisation et de lumière.

Nous notons qu'à l'obscurité et à une polarisation négative le taux de recombinaison est de signe négatif (génération thermique). Dans toutes les autres conditions le taux de recombinaison est de signe positif. En polarisation négative, la

valeur absolue du taux de recombinaison augmente avec la croissance de la concentration des liaisons pendantes (N_{db}). Tandis qu'en polarisation positive le taux de recombinaison diminue en augmentant N_{db} .

La *Figure IV.27* montre que dans le cas d'une concentration N_{db} forte, la principale contribution à la densité de charges électriques est la contribution des liaisons pendantes.

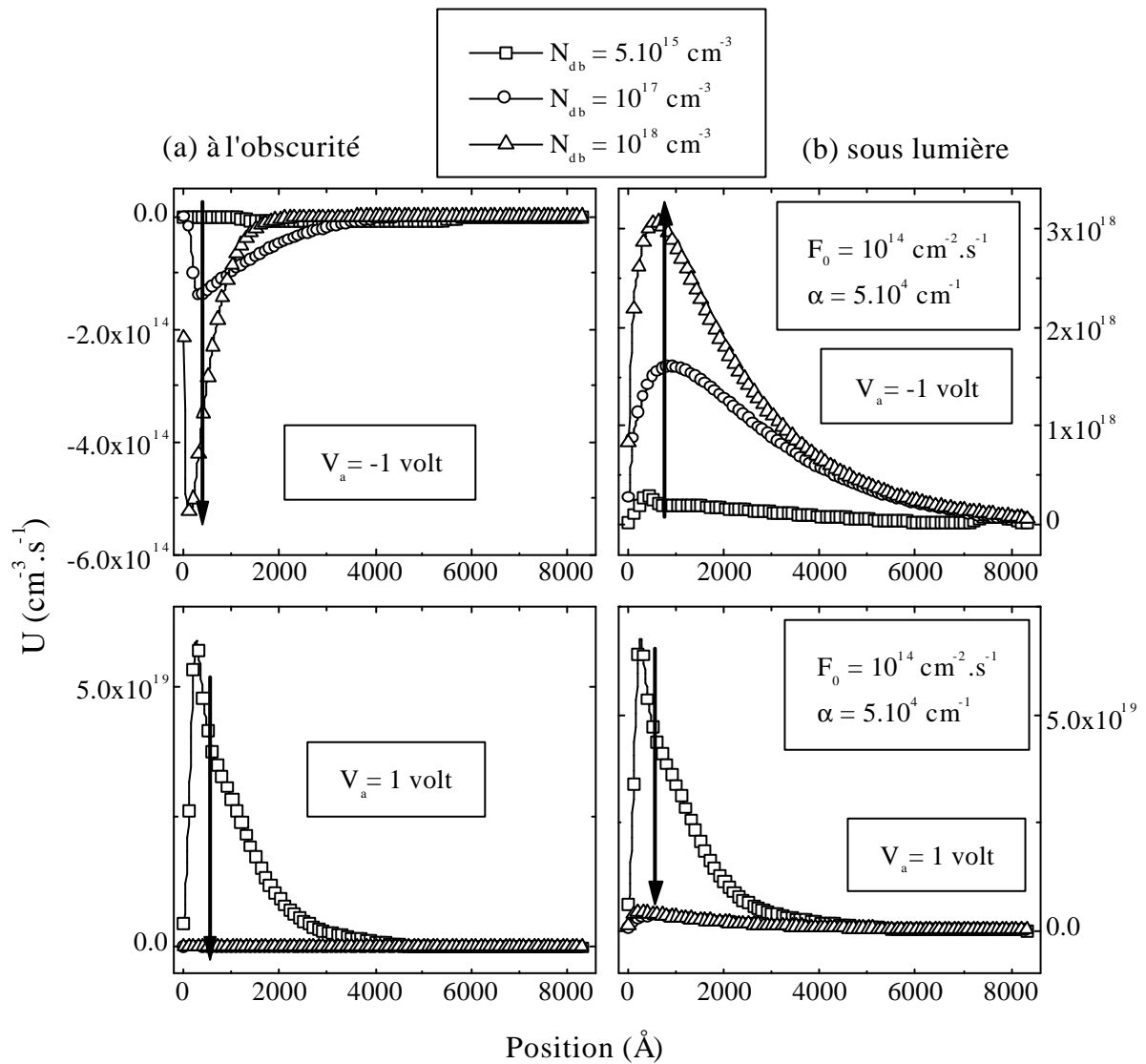


Figure IV.26 Le profil du taux de recombinaison pour plusieurs valeurs de la concentration des liaisons pendantes N_{db}

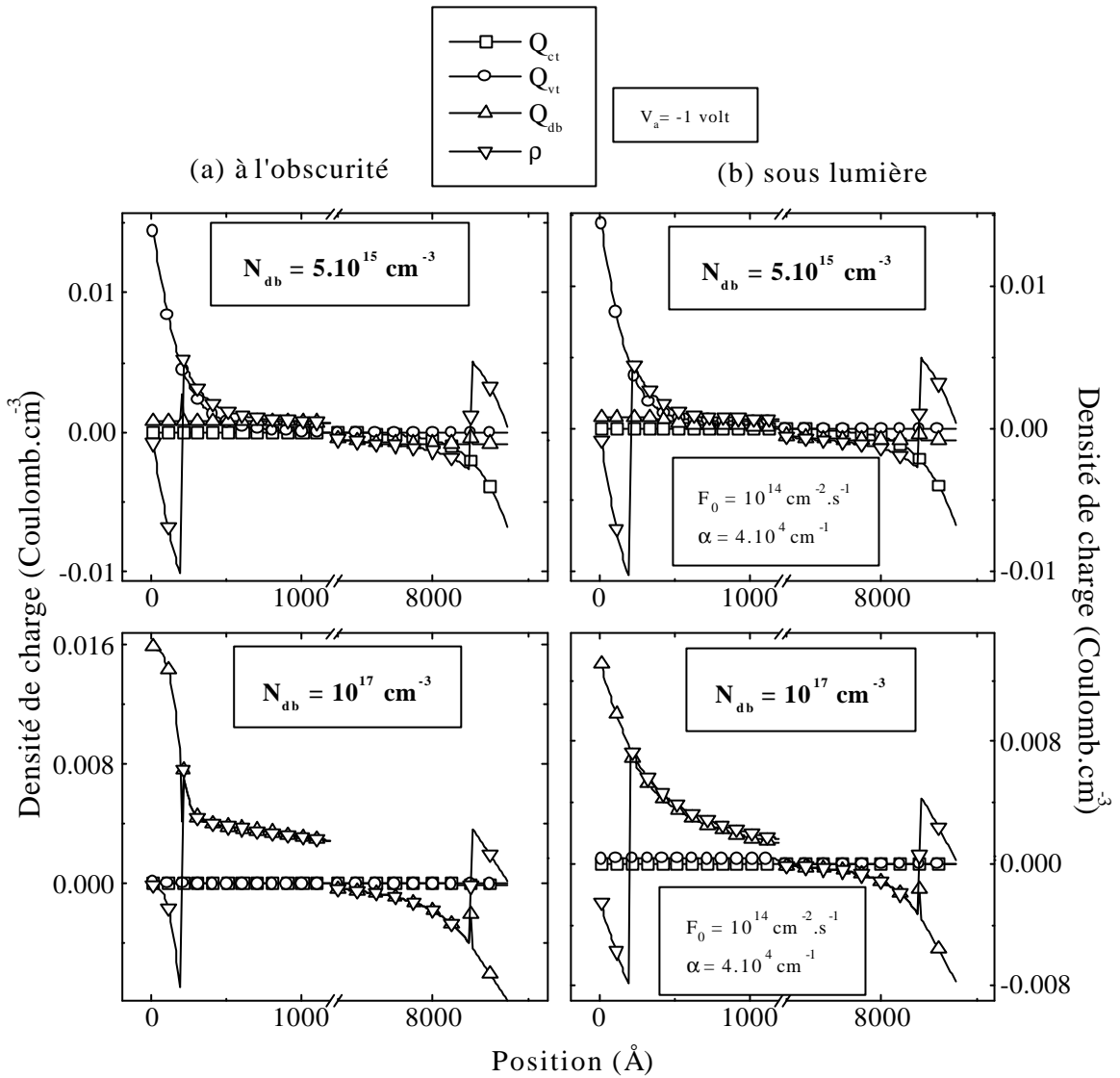


Figure.IV.27 Profil de la densité de charge totale \mathbf{r} et les composantes Q_{ct}, Q_{vt}, Q_{db} pour plusieurs valeurs de la concentration des liaisons pendantes N_{db} à $V_a = -1 \text{ volt}$ à l'obscurité (a) et sous lumière $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$ (b).

A l'obscurité

Sur la Figure IV.28-a, nous avons porté la caractéristique courant-tension, à l'obscurité, pour trois valeurs de N_{db} (5.10^{15} , 10^{17} , 10^{18} cm^{-3}). Nous remarquons que de $V_a = 0.5 \text{ volt}$ à $V_a = 2 \text{ volt}$ la densité de courant diminue avec l'augmentation de N_{db} tandis que de $V_a = -2 \text{ volt}$ à $V_a = 0,5 \text{ volt}$ la densité de courant croît avec la croissance de N_{db} .

Sous lumière

Sous lumière, le comportement de la caractéristique courant-tension vis-à-vis de la concentration des liaisons pendantes (*Figure IV.28 -b*) diffère de celui à l'obscurité. Sur tout l'intervalle de -2 volt à 2 volt, la densité de courant diminue avec l'augmentation de N_{db} . Nous notons aussi qu'à $N_{db} = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ le comportement de $J(V_a)$ de la PIN s'approche du comportement ohmique (caractéristique presque linéaire).

Par ailleurs, la tension en circuit ouvert (V_{oc}) et le courant en court circuit (J_{cc}) diminuent lorsque la concentration N_{db} augmente.

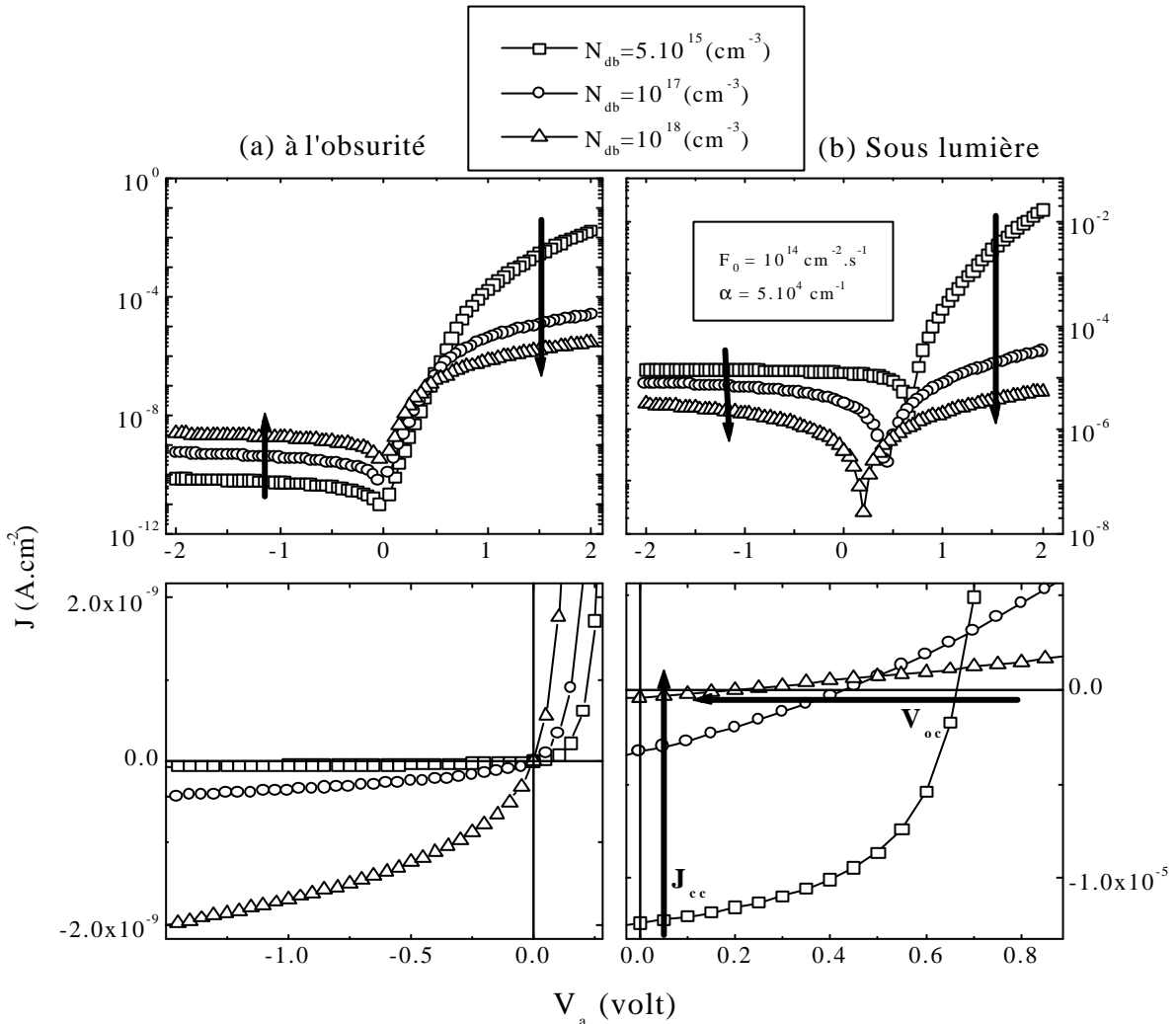


Figure.IV.28 Caractéristiques courant-tension pour différentes valeurs de la concentration des liaisons pendantes N_{db} à l'obscurité (a) et sous une lumière de flux de photons incident $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ et de coefficient d'absorption $\alpha = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$

B. Effet de la température caractéristique de la queue de bande de conduction T_c

D'une façon globale, la variation de la température caractéristique de la queue de bande de conduction T_c n'influe pas beaucoup sur la densité de courant, le seul effet qu'on peut constater est le fait qu'à des polarisations positives élevées la densité de courant diminue avec l'augmentation de T_c .

La tension en circuit ouvert (V_{oc}) et le courant en court circuit (J_{cc}) sont peu affectés par la variation de T_c .

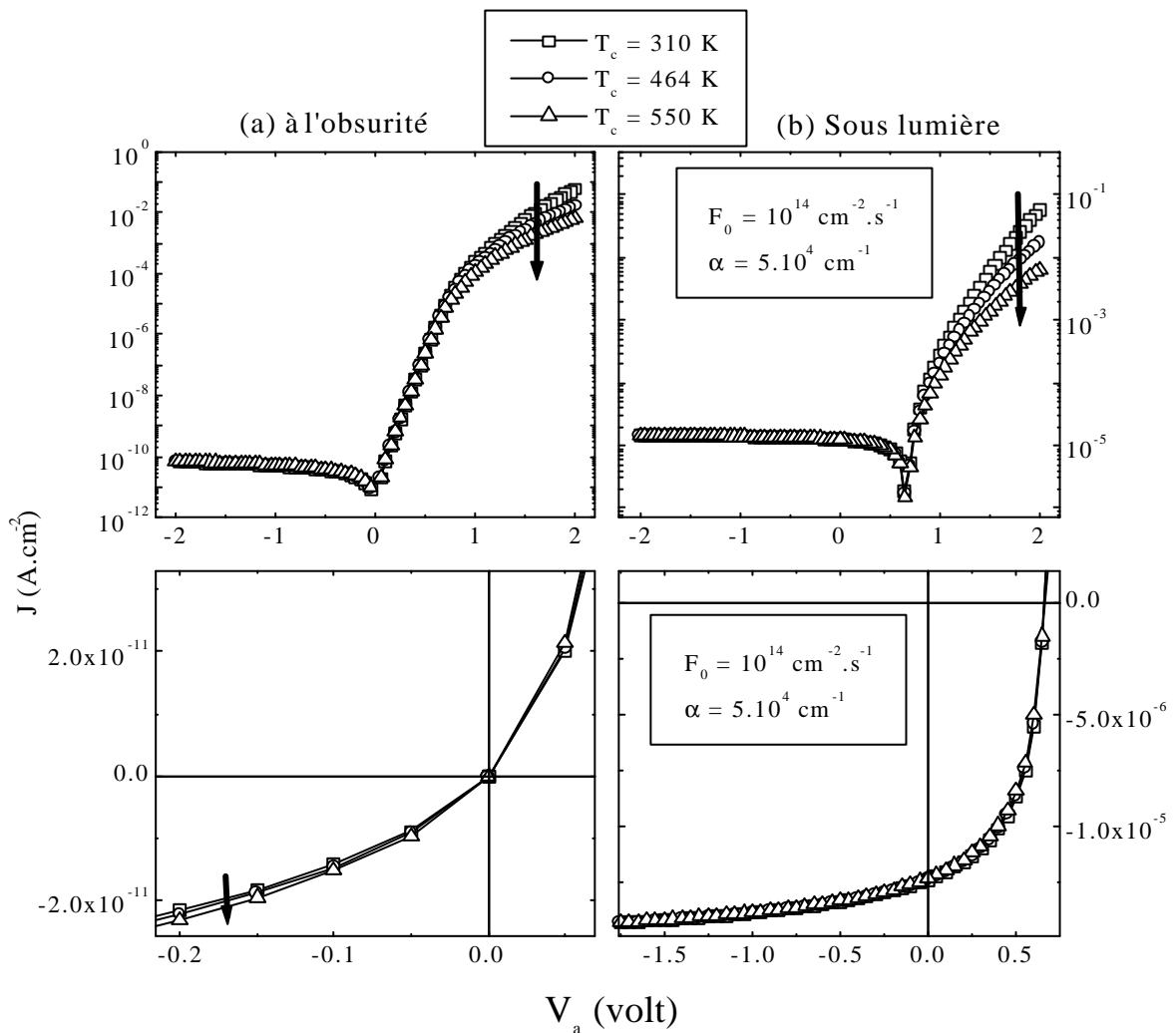


Figure.IV.29 Caractéristiques courant-tension pour différentes valeurs de la température caractéristique de la queue de bande de conduction T_c , à l'obscurité (a) et sous une lumière de flux de photons incident $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ et de coefficient d'absorption $\alpha = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$

C. Effet de la température caractéristique de la queue de bande de valence T_v

Sur la *Figure IV.30*, nous avons représenté, en échelle logarithmique et en échelle linéaire, la caractéristique courant-tension à l'obscurité et sous lumière, pour trois valeurs de T_v : 696 K, 850 K et 920 K.

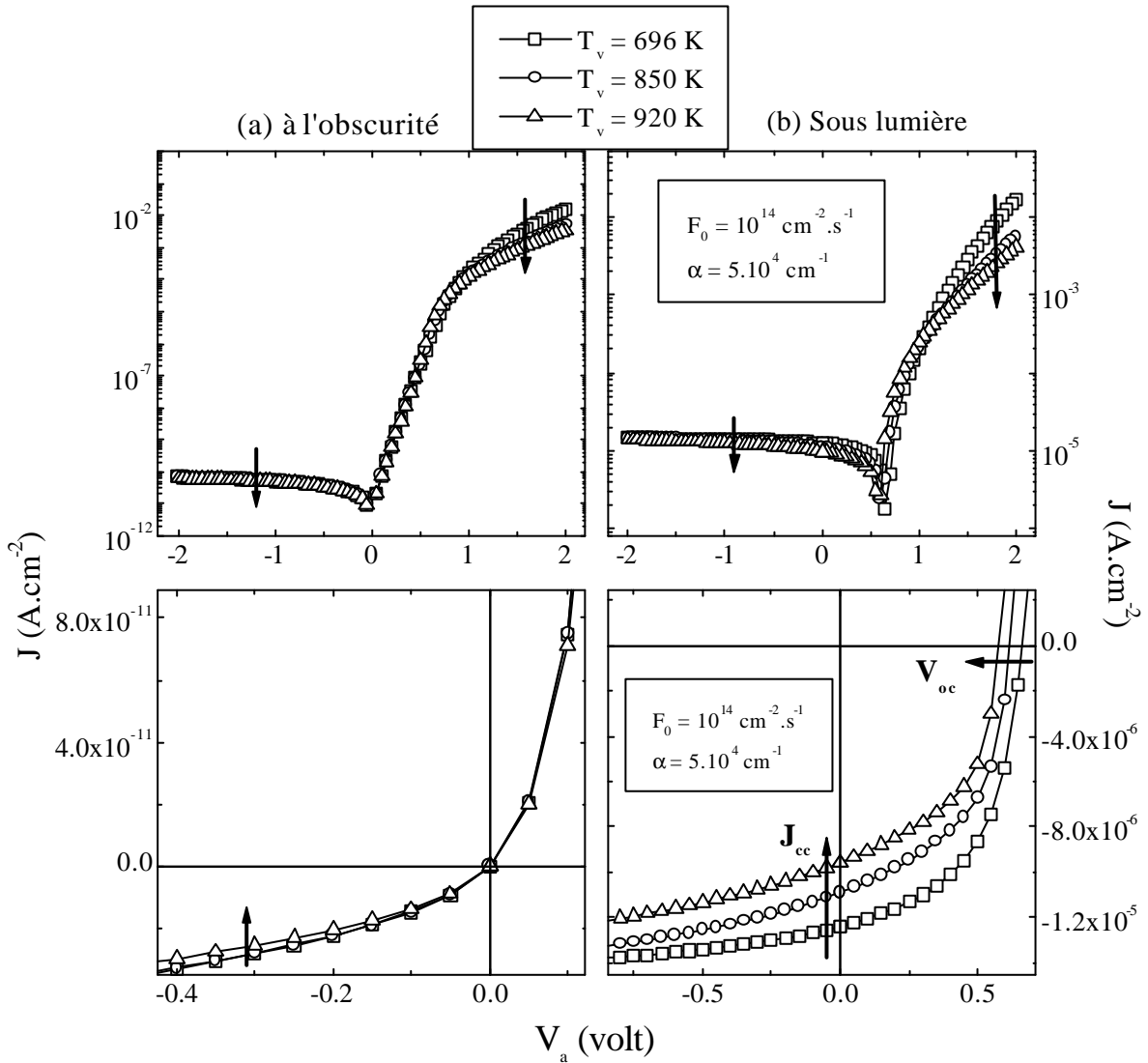


Figure.IV.30 Caractéristique courant-tension pour différentes valeurs de la température caractéristique la queue de bande de valence T_v , à l'obscurité (a) et sous une lumière de flux de photons incident $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ et de coefficient d'absorption $\alpha = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$

À l'obscurité, la variation de T_v modifie le comportement de la densité de courant sur tout l'intervalle de polarisation étudié. Pour les fortes polarisations positives, la densité de courant diminue franchement, alors que pour le reste de l'intervalle de tension la diminution est faible. Sous lumière, nous notons une diminution de la densité de courant avec l'augmentation de T_v .

La tension en circuit ouvert (V_{oc}) et la densité de courant en court circuit (J_{cc}) diminuent avec l'augmentation de T_v .

IV.2.6 Effet des paramètres de la structure : les paramètres géométriques, les dopages et les vitesses de recombinaison

Dans cette partie, nous étudions l'effet des épaisseurs, des dopages et des vitesses de recombinaison sur le comportement de l'homostucture PIN et en particulier sur la caractéristique courant-tension et la réponse $J(\hat{a})$. Pour les diverses caractéristiques courant-tension, nous avons choisi d'éclairer la face avant avec un flux de photons de $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ et un coefficient d'absorption du matériau de $\mathbf{a} = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$. Les caractéristiques $J(\hat{a})$ sont étudiées sous une polarisation $V_a = -2 \text{ volt}$ et $V_a = 0 \text{ volt}$ avec un flux de photons $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

A. Effet de l'épaisseur de la région I (E_i)

La *Figure VI-31* montre deux séries de courbes $J(\hat{a})$ correspondant à $V_a = 0 \text{ volt}$ et à $V_a = -2 \text{ volt}$, pour différentes valeurs de l'épaisseur E_i .

Le comportement des caractéristiques $J(\hat{a})$ vis-à-vis de E_i , à $V_a = 0 \text{ volt}$ et à $V_a = -2 \text{ volt}$, sont similaires. Pour les faibles coefficients d'absorption, le photocourant augmente avec E_i car l'augmentation du volume de la région I non dopée induit une croissance du nombre de photons absorbés d'où la création d'un nombre plus important de paires électrons- trous. Ce comportement s'inverse en passant aux grandes valeurs de \mathbf{a} où le photocourant diminue avec la croissance de E_i . L'absorption dans ce dernier cas se fait presque à la surface, donc l'augmentation de E_i ne fait donc que rallonger le parcours des porteurs, ce qui est à l'origine de la diminution du courant [42].

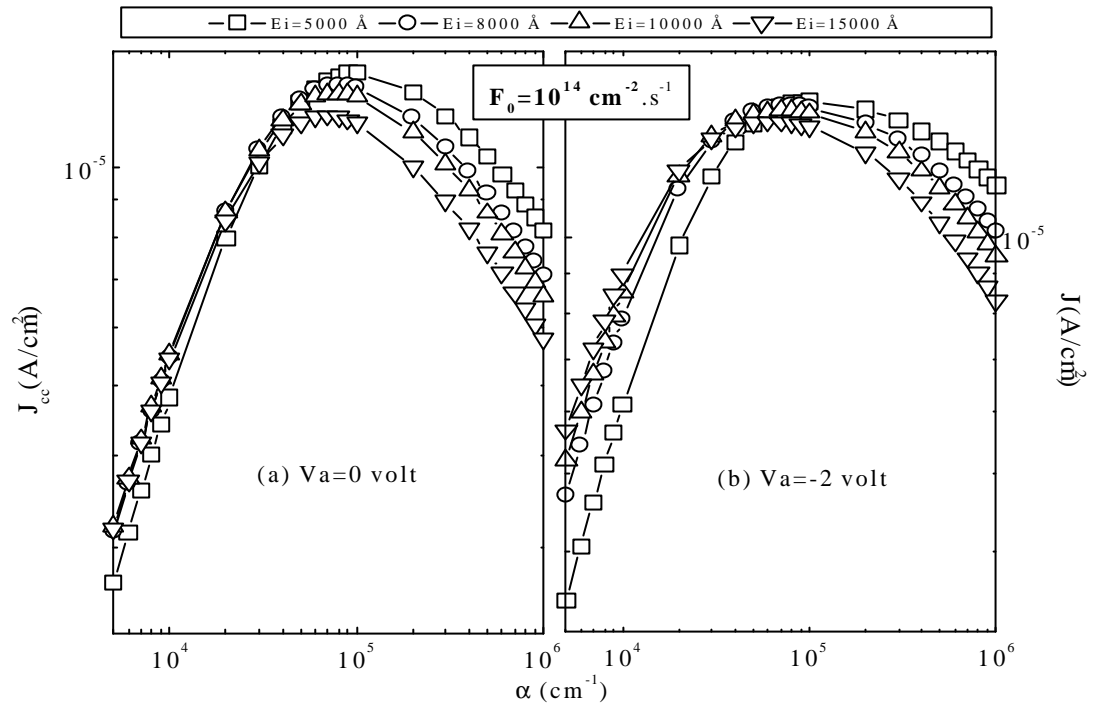


Figure.IV.31 Caractéristique $J(\alpha)$ pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la région I (E_i) sous une polarisation $V_a = 0$ volt (a), et sous une polarisation $V_a = -2$ volt (b)

L'effet de l'épaisseur E_i se manifeste également sur la position et l'intensité du maximum de $J(\alpha)$. Le pic se déplace vers les faibles α et son intensité diminue quand E_i augmente.

Sur la Figure VI.32, nous avons représenté la caractéristique courant-tension pour un ensemble de valeurs de l'épaisseur E_i . Nous constatons que la densité de courant sous polarisation positive diminue avec l'épaisseur E_i . Le potentiel en circuit ouvert (V_{oc}) varie peu avec l'épaisseur de la région I. Par contre la densité de courant (J_{cc}) diminue quand E_i augmente.

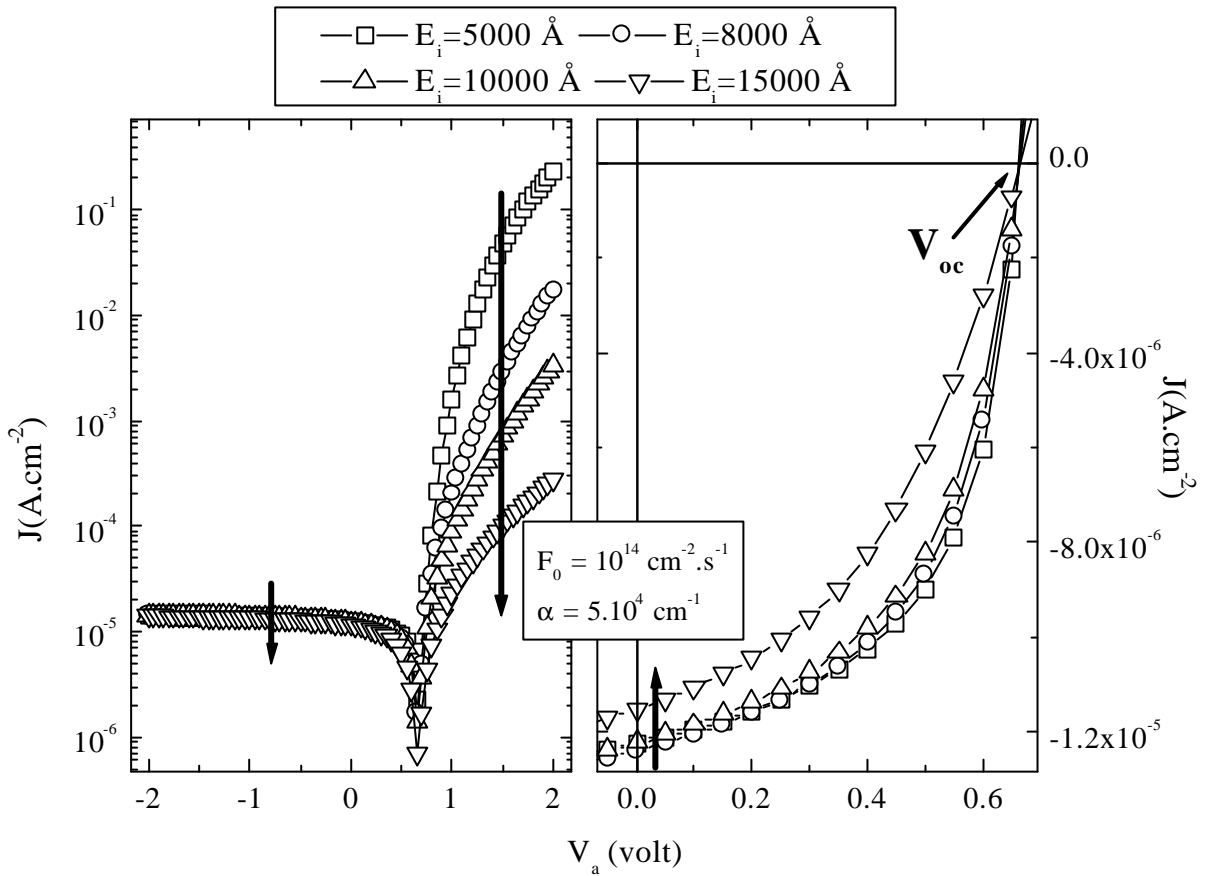


Figure IV.32 Caractéristique courant-tension pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la région I (E_i) sous lumière.

B. Effet de l'épaisseur de la région P (E_p)

Sur la Figure IV.33, nous avons représenté la caractéristique $J(\alpha)$ pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la région dopée P (E_p), sous une polarisation nulle sur Figure IV.33-a et sous une polarisation $V_a = -2$ volt sur Figure IV.33-b.

Le comportement de la caractéristique $J(\alpha)$ dans les deux cas de polarisation est similaire. Nous constatons que pour les grands α , la caractéristique $J(\alpha)$ est très affectée par l'épaisseur E_p tel que la densité de courant diminue considérablement quand l'épaisseur E_p augmente. Cependant pour les faibles α , la densité de courant reste peu sensible à la variation de E_p . Par ailleurs, le pic de la caractéristique $J(\alpha)$ dans les deux cas de polarisation se déplace vers les faibles α avec l'augmentation de l'épaisseur E_p .

Afin d'expliquer le comportement montré sur la Figure IV.33 et décrit ci-dessus, nous avons présenté sur la Figure IV.35 le profil du champ électrique. Nous avons

choisi une lumière de faible coefficient d'absorption ($\alpha = 7.10^3 \text{ cm}^{-1}$) (Figure IV.35-b) et une lumière de fort coefficient d'absorption ($\alpha = 5.10^6 \text{ cm}^{-1}$) (Figure IV.35-b). Le profil du champ électrique est représenté ici pour quatre épaisseurs E_p différentes. Dans les deux cas, l'augmentation de l'épaisseur E_p fait diminuer le champ électrique dans la région dopée P.

Sur la Figure IV.34, nous avons représenté le profil du taux de génération, l'allure de ce profil représente également l'allure du profil de l'absorption de la lumière à l'intérieur de la structure. Dans le cas des forts coefficients d'absorption, l'absorption se fait uniquement dans la couche P, d'où l'effet de la variation de l'épaisseur E_p est important.

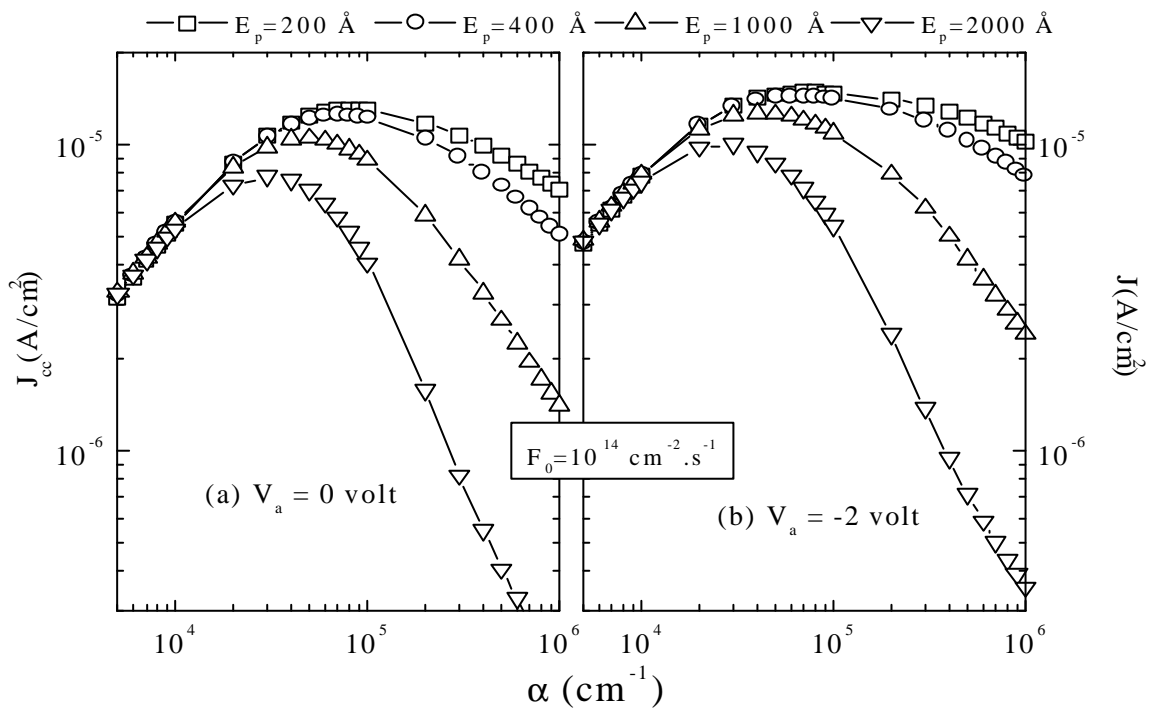


Figure.IV.33 Caractéristique $J(\alpha)$ pour plusieurs valeurs de L'épaisseur de la région P (E_p), Sous une polarisation $V_a = 0$ volt (a) et sous une polarisation de $V_a = -2$ volt (b)

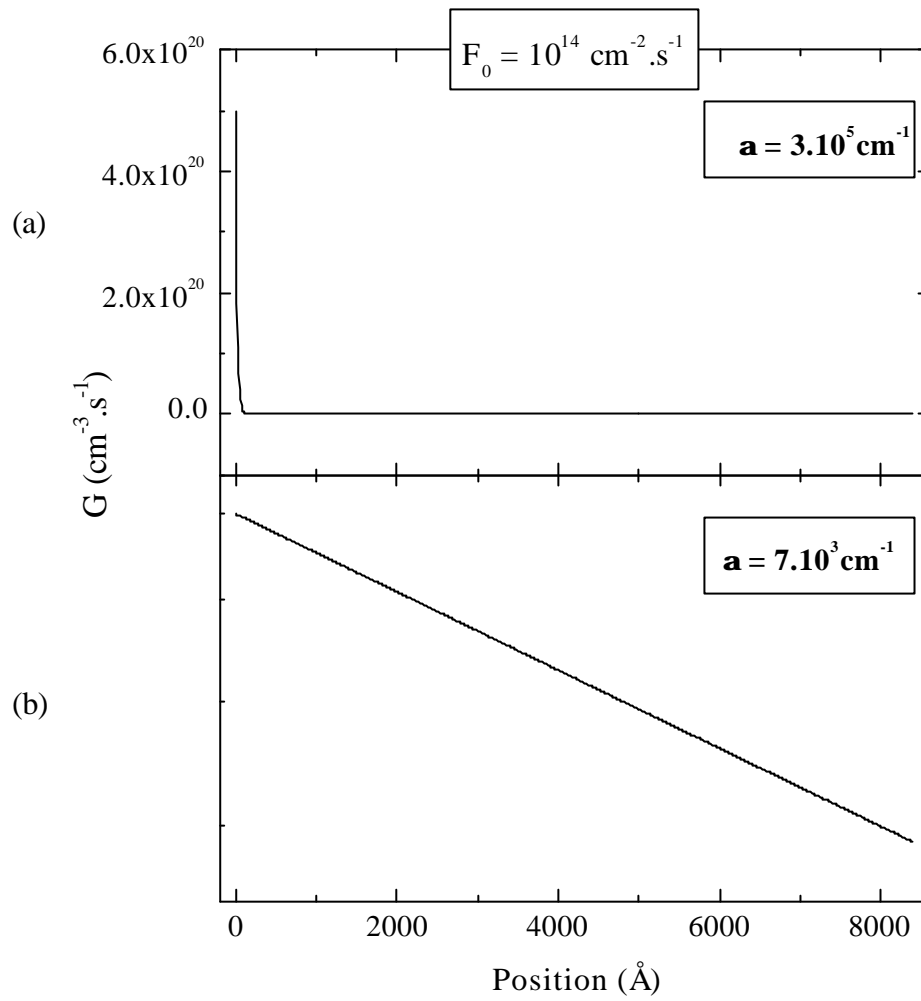


Figure.IV.34 Profil du taux de génération pour une lumière qui correspond à $\mathbf{a} = 3.10^5.cm^{-1}$ (a). $\mathbf{a} = 7.10^3.cm^{-1}$ (b)

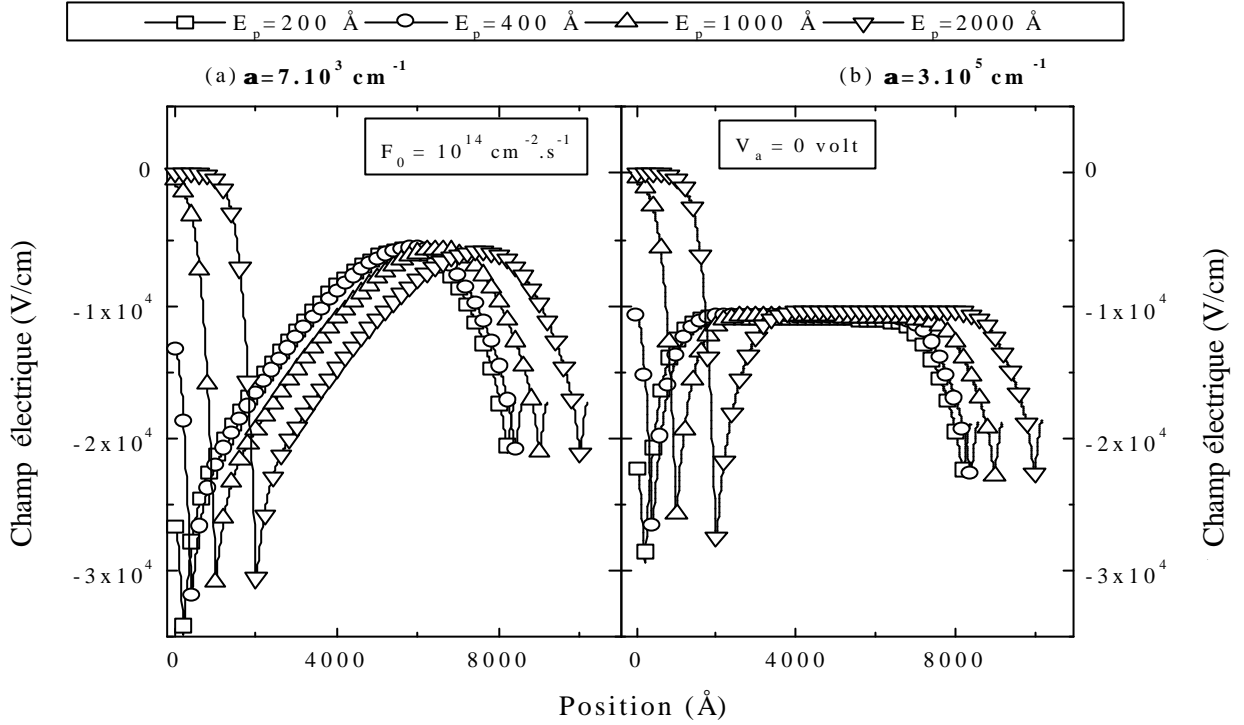


Figure.IV.35 (a) Profil du champ électrique sous une lumière de $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 7.10^3 \text{ cm}^{-1}$, et sous une polarisation $V_a = 0 \text{ volt}$, pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la région dopée P ' E_p '

(b) Profil du champ électrique sous une lumière de $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 3.10^5 \text{ cm}^{-1}$, et sans polarisation, pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la région dopée P ' E_p '

Sur la Figure IV.36, nous avons représenté $J(\mathbf{a})$ dans le cas où la couche P est transparente à la lumière ($\mathbf{a}(P) = 0$). La figure montre $J(\mathbf{a})$ pour plusieurs valeurs de E_p sous une polarisation $V_a = 0 \text{ volt}$ et $V_a = -2 \text{ volt}$. Nous remarquons une faible augmentation de la densité de courant pour les forts coefficients d'absorption.

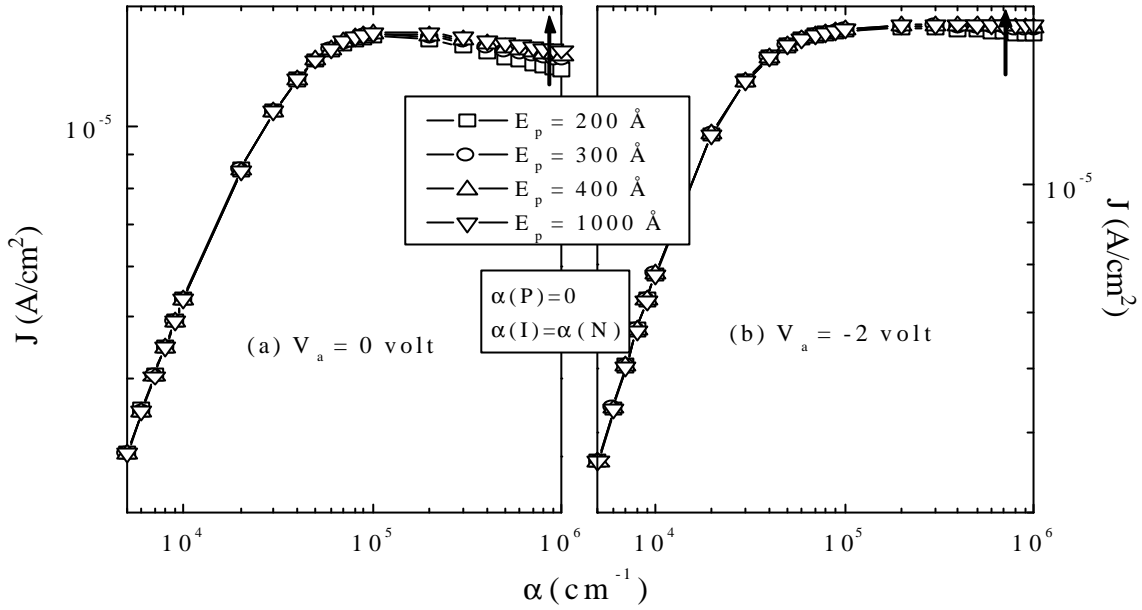


Figure.IV.36 Caractéristique $J(\alpha)$ pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la région P (E_p) avec $\mathbf{a}(P) = 0$, Sous une polarisation 0 volt (a) et sous une polarisation de -2 volt (b)

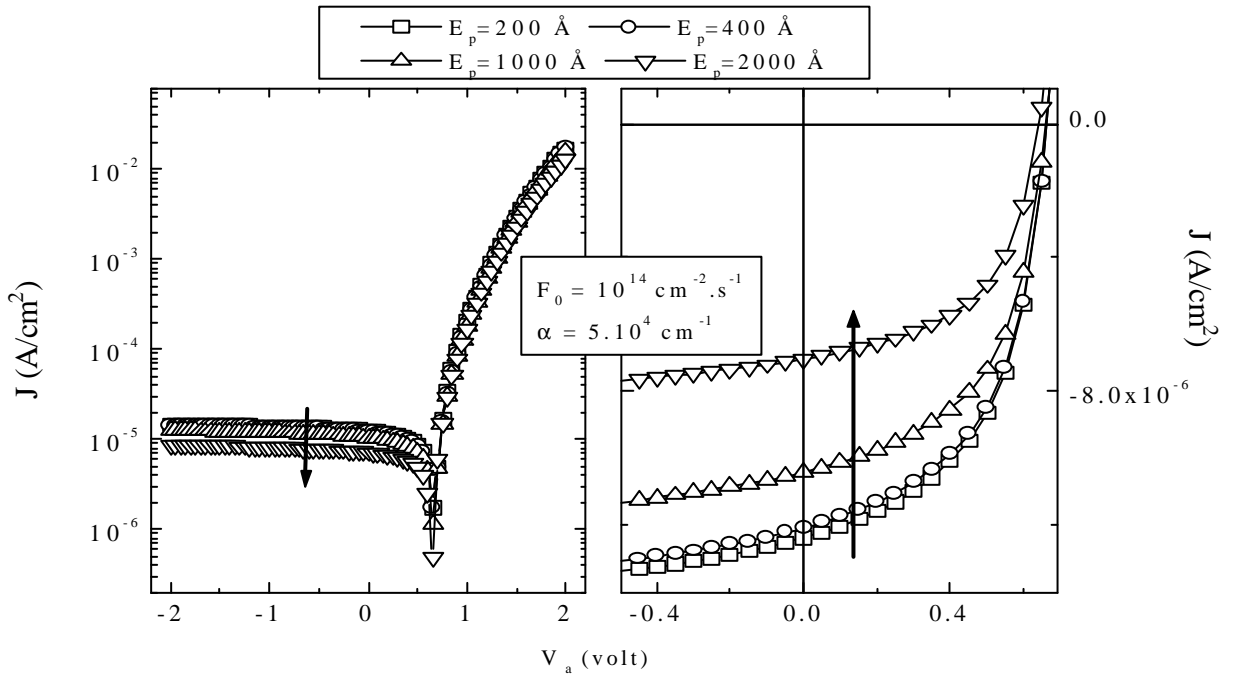


Figure.IV.37 Caractéristique courant-tension sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$) pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la région dopée P ' E_p '

Sur la *Figure VI-37*, nous avons représenté la caractéristique courant-tension pour un ensemble de valeurs de l'épaisseur de la région dopée P (E_p). Nous constatons que la densité de courant en polarisation positive n'est pas affectée par la variation de l'épaisseur de la région P. Le potentiel en circuit ouvert (V_{oc}) varie peu avec l'épaisseur de la région P. Le courant en court circuit (J_{cc}) diminue en augmentant l'épaisseur E_p .

C. Effet de l'épaisseur de la région N (E_n)

Sur la *Figure IV.38*, nous avons représenté la caractéristique $J(\hat{a})$ pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la région dopée N pour une polarisation $V_a = 0$ volt (*Figure IV.38-a*) et sous une polarisation $V_a = -2$ volt (*Figure IV.38-b*). Nous remarquons que la modification de E_n n'affecte pas la densité de courant.

Sur *Figure VI.39*, nous avons représenté la caractéristique courant-tension pour un ensemble de valeurs de l'épaisseur de la région dopée N ' E_n '. Nous constatons que la caractéristique courant-tension reste inchangée.

C'est le fait que la majeure partie de la lumière soit absorbée dans la couche P et la couche I, avant d'arriver à la région dopée N, qui peut expliquer le fait que le photocourant soit insensible à l'épaisseur E_n .

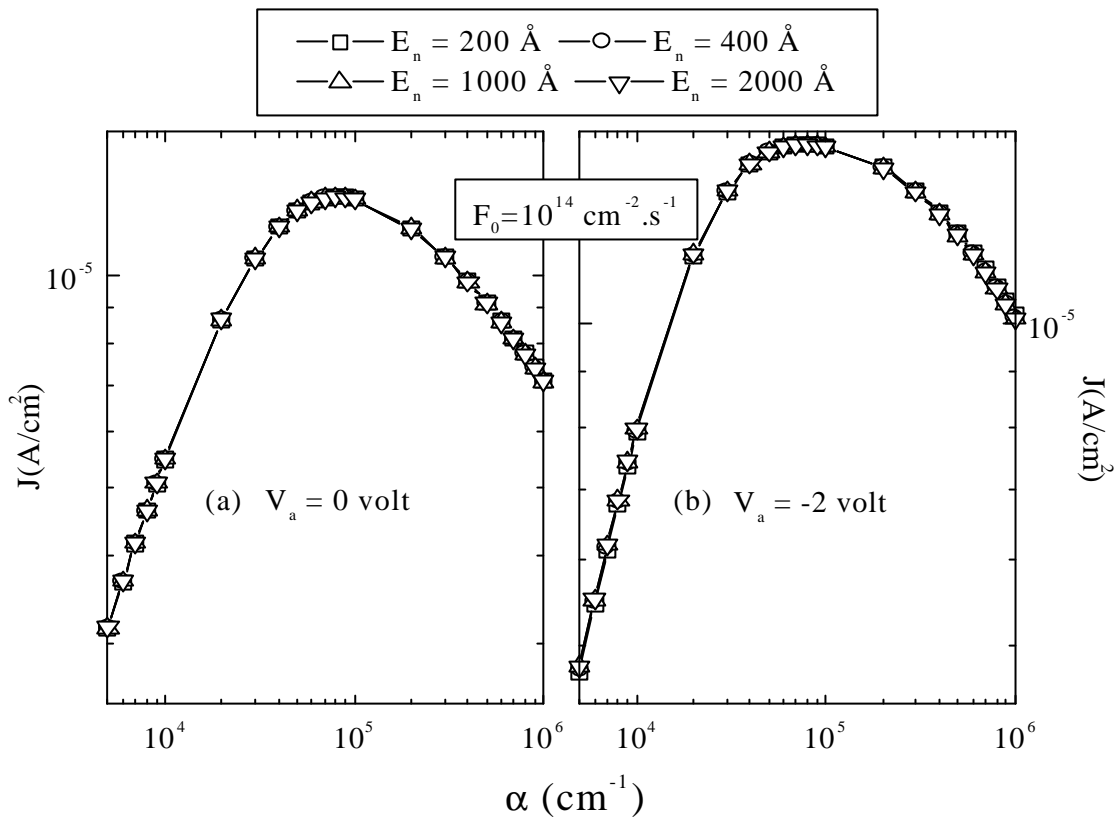


Figure.IV.38 Caractéristique $J(\alpha)$ pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la région dopée N , (a) sous une polarisation $V_a = 0 \text{ volt}$, (b) sous une polarisation $V_a = -2 \text{ volt}$ et un flux de photons $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

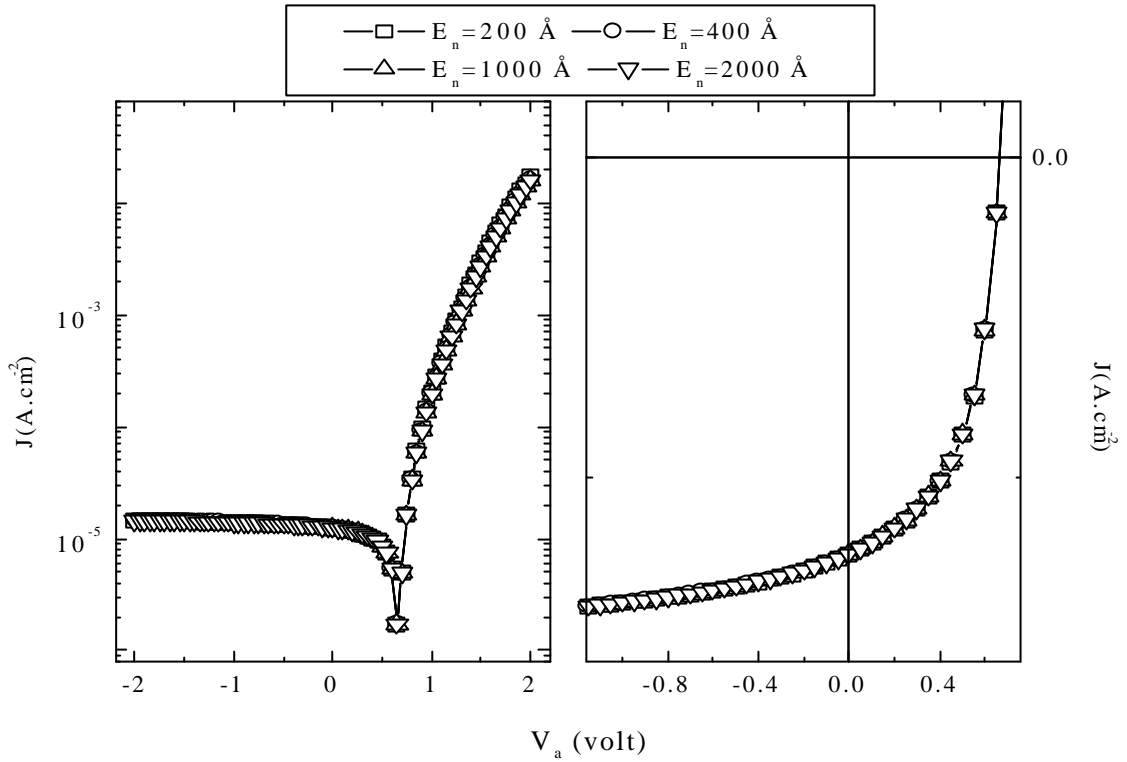


Figure IV.39 Caractéristique courant-tension sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$) pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la région dopée N

D. Effet du dopage de la région P (N_{ap})

Sur la Figure IV.40, nous montrons deux séries de courbes $J(\mathbf{a})$ correspondant à deux valeurs de polarisations différentes : 0 volt (Figure IV.40-a) et -2 volt (Figure IV.40-b). Chacune des courbes représentées correspond à une valeur du dopage N_{ap} .

Pour les faibles coefficients d'absorption, la variation du dopage N_{ap} n'affecte pas le photocourant. Pour les grandes valeurs du coefficient d'absorption, nous relevons une diminution du photocourant en passant d'un dopage $N_{ap} = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ à un dopage $5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

Le comportement des profils du taux de recombinaison et du champ électrique vis à vis de la variation du dopage N_{ap} , sont représenté sur la Figure IV.41 et la Figure IV.42, respectivement.

Pour les faibles valeurs de \mathbf{a} , le module du champ électrique et le taux de recombinaison, dans la région frontale, augmentent avec N_{ap} . Ces deux effets

compétitifs peuvent être utiliser ici pour expliquer l'insensibilité de $J(\alpha)$ à la variation de N_{ap} . L'intensité du taux de recombinaison augmente considérablement avec N_{ap} . Malgré la croissance du champ électrique, son effet n'arrive pas à compenser la recombinaison dans la région I.

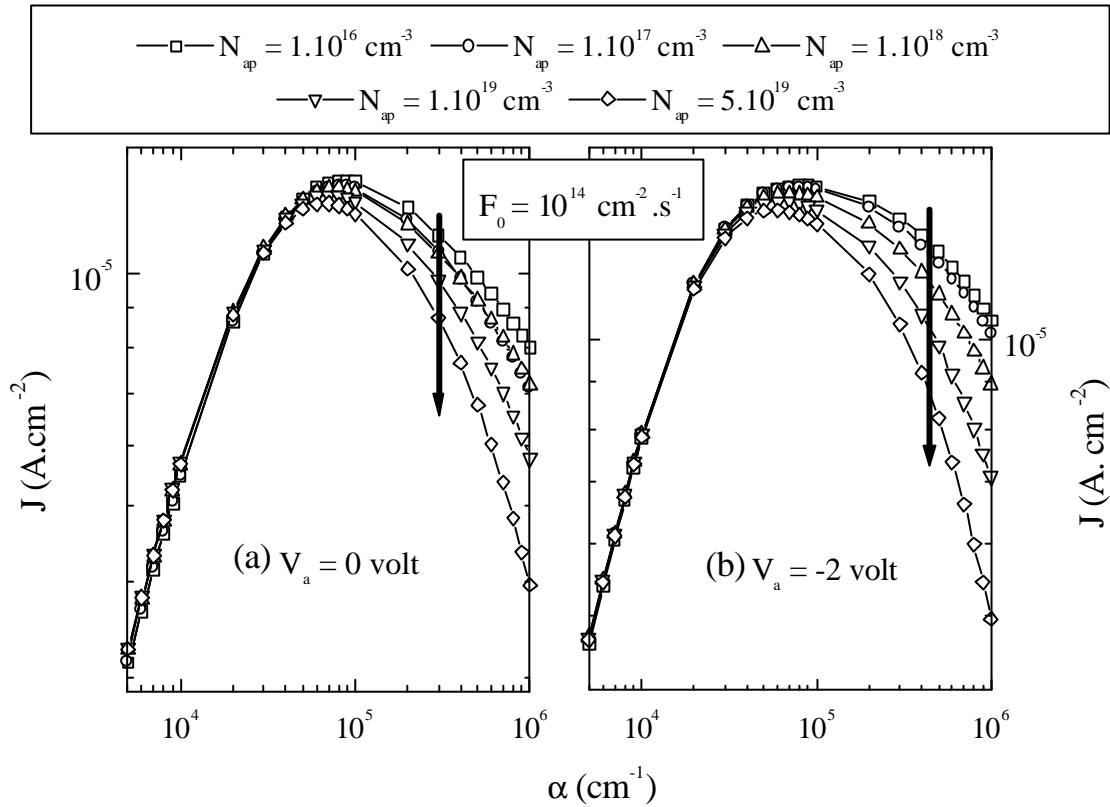


Figure.IV.40 Caractéristique $J(\alpha)$ pour plusieurs valeurs du dopage de la région dopée P (a) sous une polarisation $V_a = 0$ volt (b) sous une polarisation $V_a = -2$ volt.

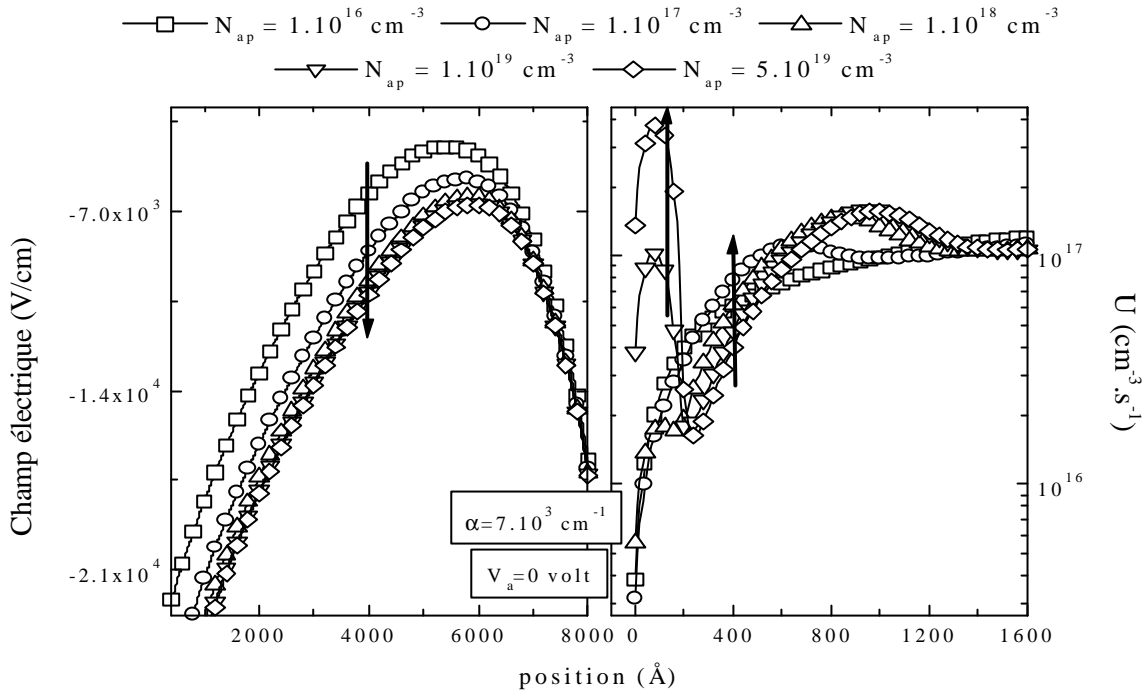


Figure.IV.41 Le profil du champ électrique et du taux de recombinaison

$$(F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}, \mathbf{a} = 7.10^3 \text{ cm}^{-1}, V_a = 0 \text{ volt})$$

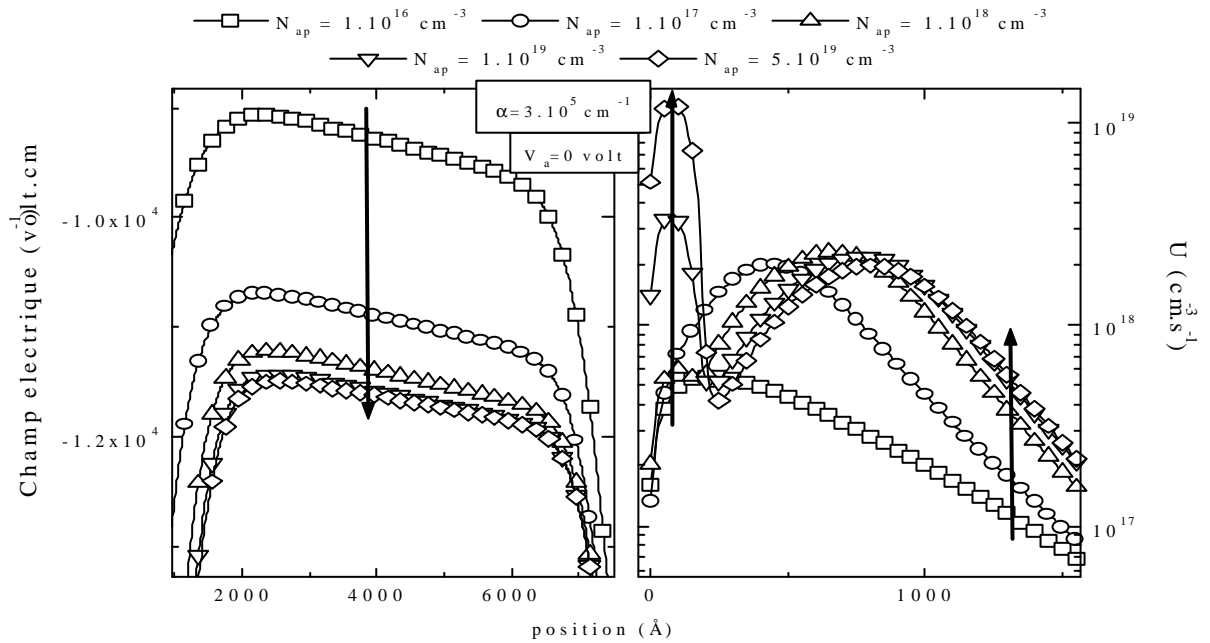


Figure.IV.42 Le profil du champ électrique et du taux de recombinaison

$$(F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}, \mathbf{a} = 3.10^5 \text{ cm}^{-1}, V_a = 0 \text{ volt})$$

La *Figure IV.43* montre la caractéristique courant-tension pour plusieurs valeurs de N_{ap} , en échelle logarithmique (*Figure IV.43-a*) et en échelle linéaire (*Figure IV.43-b*).

Le potentiel en circuit ouvert (V_{oc}) augmente avec N_{ap} et il sature à $N_{ap}=10^{17} \text{ cm}^{-3}$. La variation du courant en court circuit (J_{cc}) présente un extremum. De la valeur $N_{ap}=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ à $N_{ap}=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ le J_{cc} augmente tandis que de $N_{ap}=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ à $N_{ap}=5.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ le J_{cc} diminue.

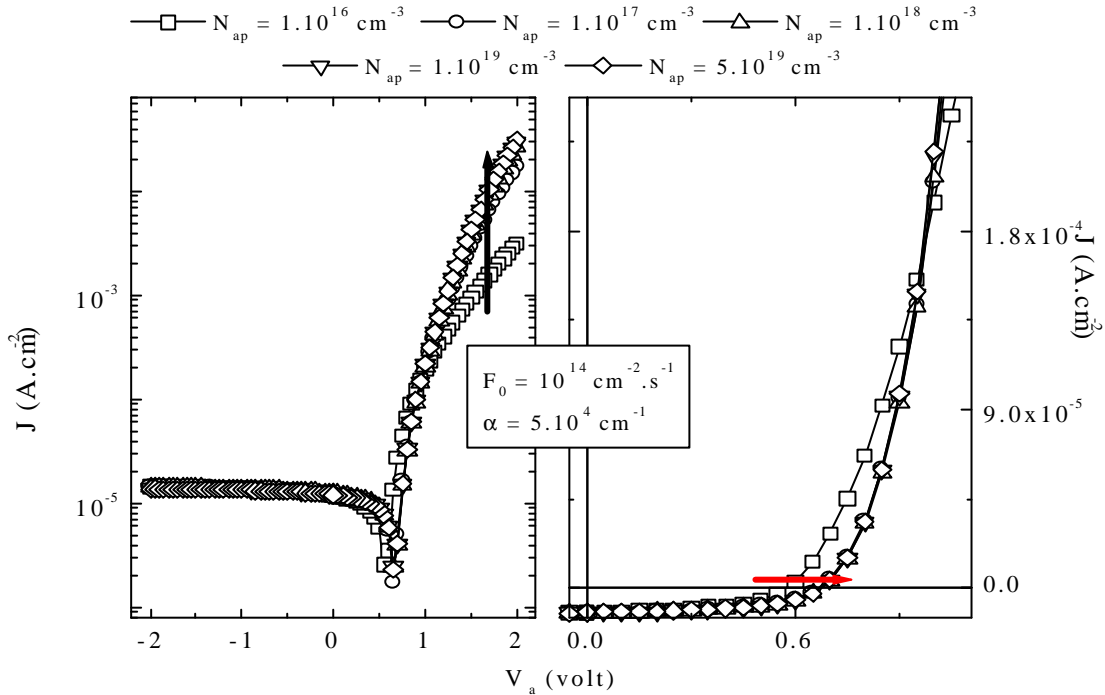


Figure.IV.43 Caractéristique courant-tension sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\alpha = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$) pour plusieurs valeurs du dopage de la région dopée P ' N_{ap} ' en représentation linéaire et logarithmique.

E. Effet du dopage de la région N (N_{dn})

La *Figure IV.44* représente $J(\mathbf{a})$ sous une polarisation $V_a=0$ volt et sous une polarisation $V_a=-2$ volt, pour plusieurs valeurs de N_{dn} . La caractéristique courant-tension pour différentes valeurs de N_{dn} est montrée sur la *Figure.IV.45*.

N_{dn} influe peu sur la densité de courant en polarisation négative mais en polarisation positive, la densité de courant augmente avec N_{dn} .

La tension V_{oc} reste invariante lorsqu'on change le dopage dans la région N. Par contre, le J_{cc} augmente légèrement avec N_{dn} .

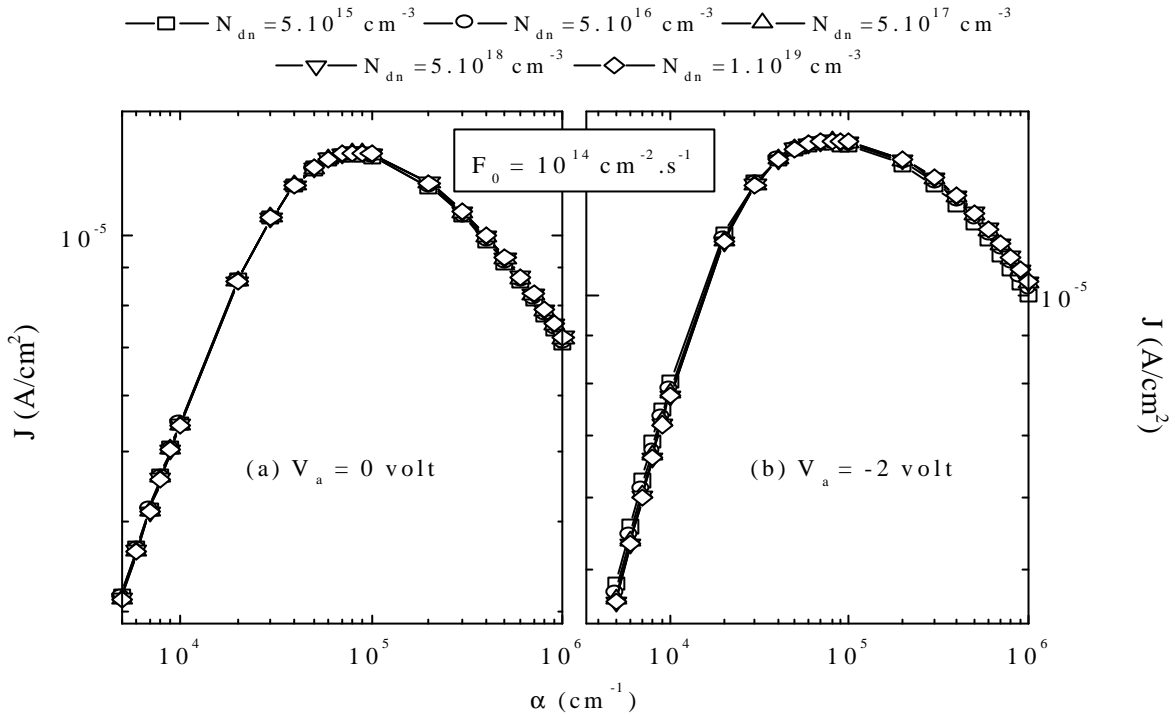


Figure.IV.44 Caractéristique $J(\alpha)$ pour plusieurs valeurs du dopage de la région dopée $N'N_{dn}$ (a) sous polarisation $V_a = 0$ volt (b) sous une polarisation $V_a = -2$ volt.

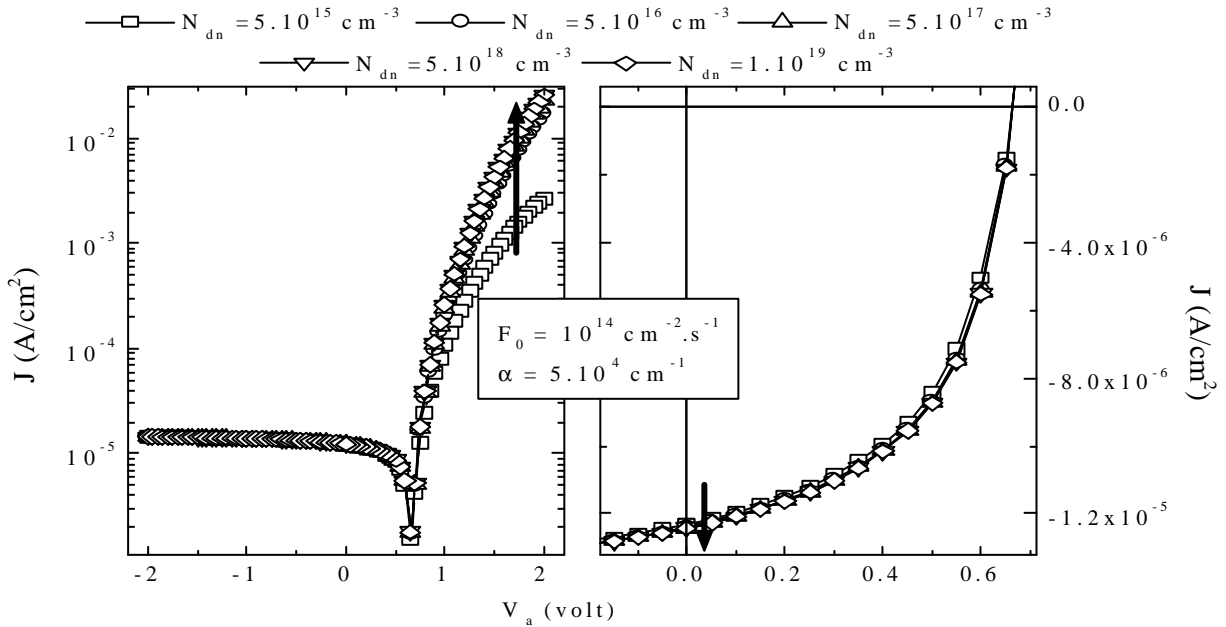


Figure.IV.45 Caractéristique courant-tension sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\alpha = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$) pour plusieurs valeurs du dopage de la région dopée $N'N_{dn}$ en représentation linéaire et logarithmique.

F. Effet des vitesses de recombinaison

F.1 Surface avant

Sur cette surface, la vitesse de recombinaison des électrons (S_{n1}) n'affecte pas la réponse de la PIN (Figure IV.46). La vitesse de recombinaison des trous (S_{p1}) influe sur la densité de courant à l'obscurité et sous lumière. Dans le domaine des fortes polarisations positives, la densité de courant augmente en augmentant S_{p1} jusqu'à atteindre une saturation à $S_{p1}=10^5$ cm/s (Figure IV.47).

F.2 Surface arrière

La vitesse de recombinaison des trous n'influe pas sur la densité de courant, que ça soit à l'obscurité ou sous lumière (Figure IV.49). La vitesse de recombinaison des électrons n'a d'effet visible qu'à des valeurs de S_n très faibles (10^2 cm/s), où la densité de courant chute pour les fortes polarisations positives (Figure IV.48).

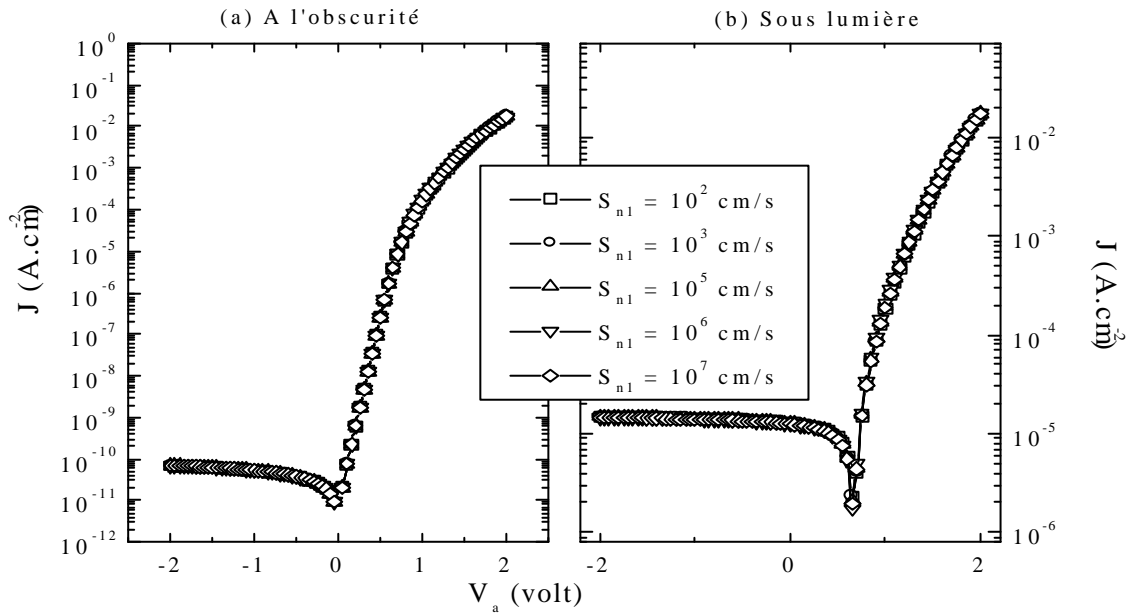


Figure.IV.46 La caractéristique courant-tension pour plusieurs valeurs de la vitesse de recombinaison des électrons sur la surface avant, à l'obscurité (a) et sous lumière $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ (b)

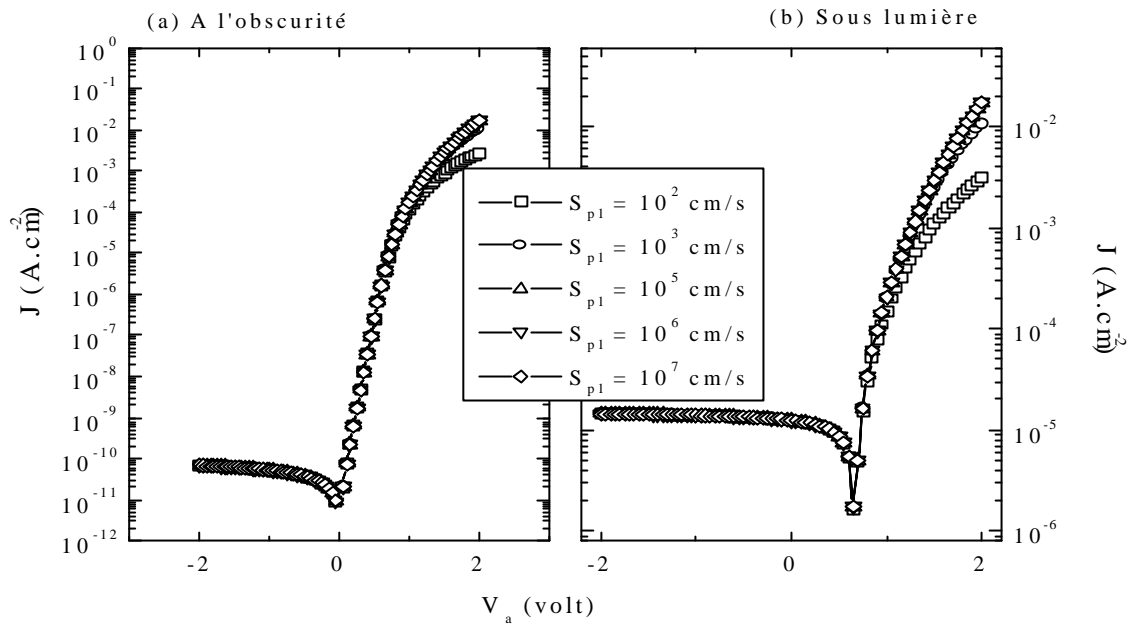


Figure.IV.47 La caractéristique courant-tension pour plusieurs valeurs de la vitesse de recombinaison des trous sur la surface avant, à l'obscurité (a) et sous lumière $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$ (b)

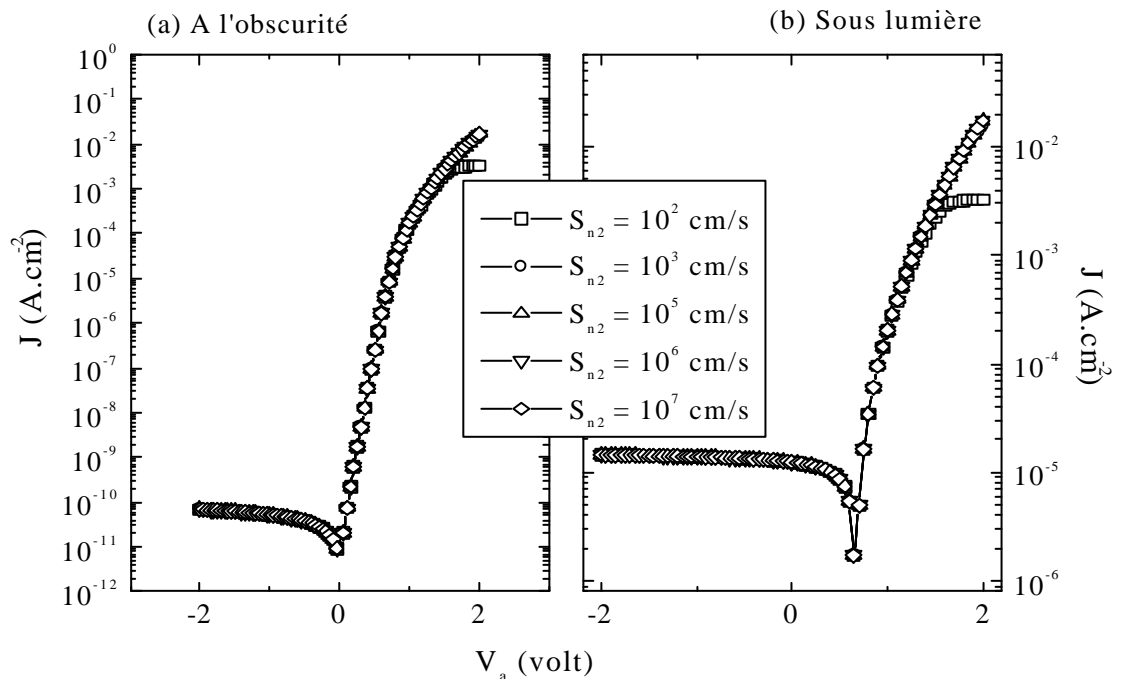


Figure.IV.48 La caractéristique courant-tension pour plusieurs valeurs de la vitesse de recombinaison des électrons sur la surface arrière, à l'obscurité (a) et sous lumière $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$ (b)

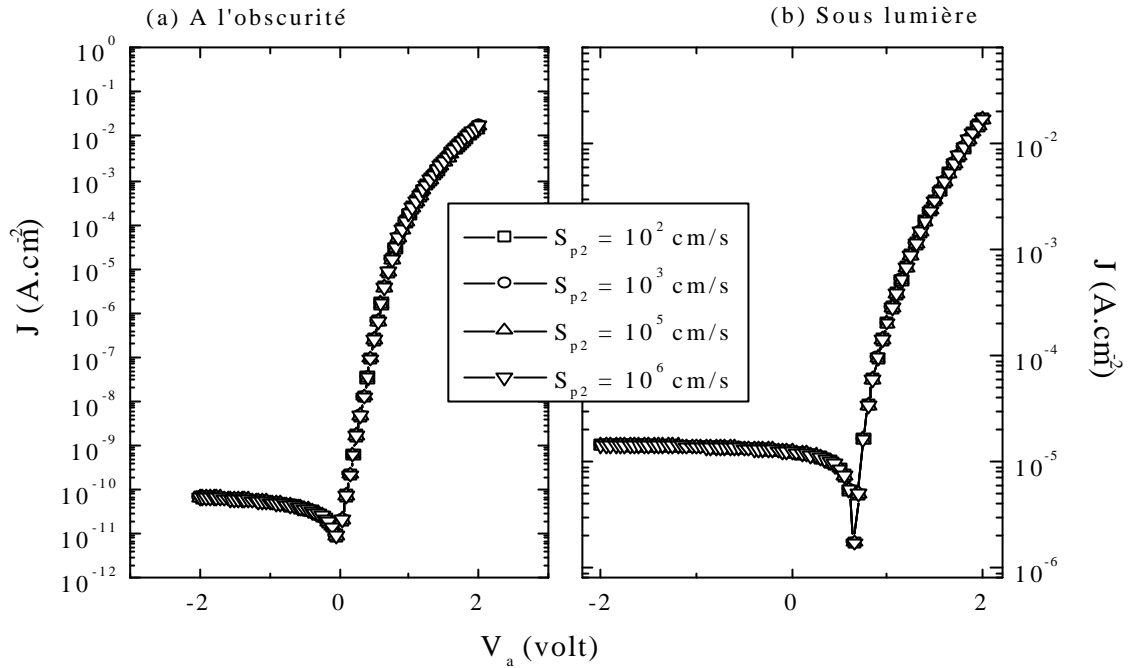


Figure IV.49 La caractéristique courant-tension pour plusieurs valeurs de la vitesse de recombinaison des trous sur la surface arrière, à l'obscurité (a) et sous lumière $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ (b)

IV.2.7 Comparaison entre les structures PIN et NIP

On distingue entre PIN : éclairage du côté P et NIP : éclairage du côté N. A l'obscurité il n'y a pas de différence entre les deux structures. Sous éclairage, la lumière pénètre à l'intérieur de la structure avec la décroissance de l'intensité conformément à la loi de Lambert.

Dans cette partie, nous comparons entre les réponses des deux structures. Les paramètres de simulation utilisés pour la PIN et la NIP sont ceux de la PIN standard.

Sur la Figure IV. 50, nous avons représenté la caractéristique $J(V)$ à l'obscurité (Figure IV.50-a) et sous lumière monochromatique avec $\mathbf{a} = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ et un flux $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ (Figure IV.50-b) pour les deux structures PIN et NIP.

Nous remarquons qu'à l'obscurité les deux courbes courant-tension sont identiques. Sous lumière et pour une forte polarisation positive, la densité de courant dans la NIP et celle dans la PIN sont identiques. Sous polarisation négative, le photocourant de la PIN est plus important que celui de la NIP, et ce jusqu'à une polarisation positive proche de V_{oc} .

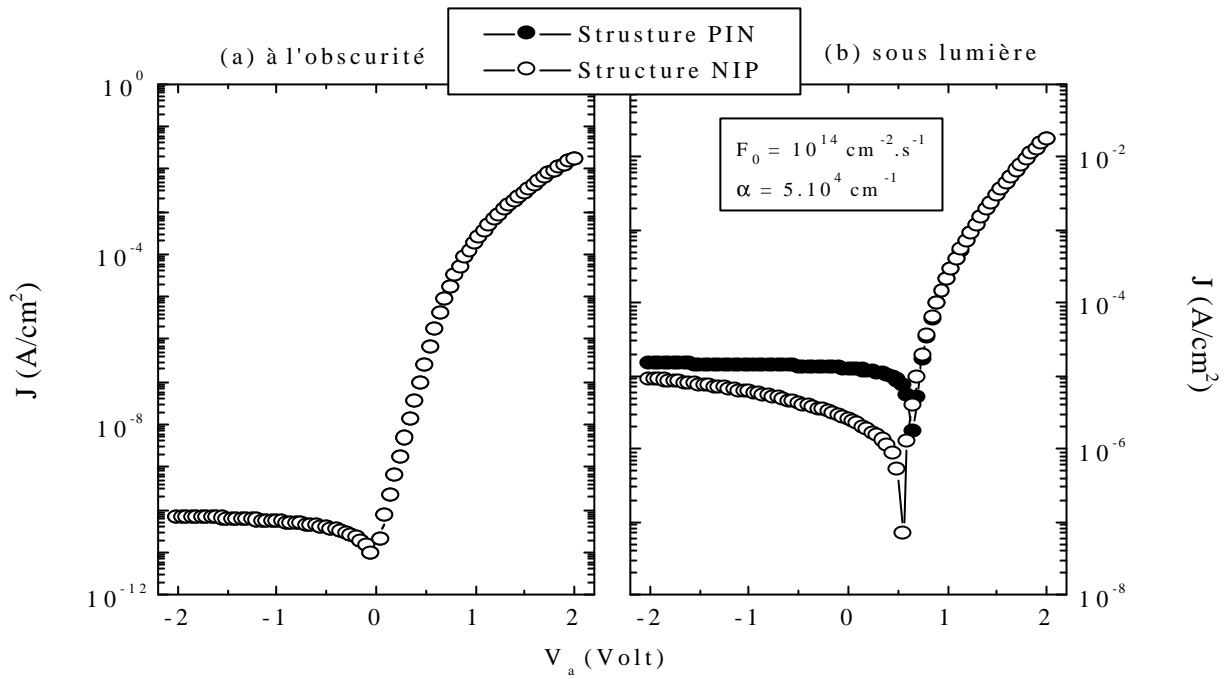


Figure.IV.50 Caractéristique courant-tension à l'obscurité (a) et sous lumière ($\alpha = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$, $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$) (b) pour la structure PIN et la structure NIP.

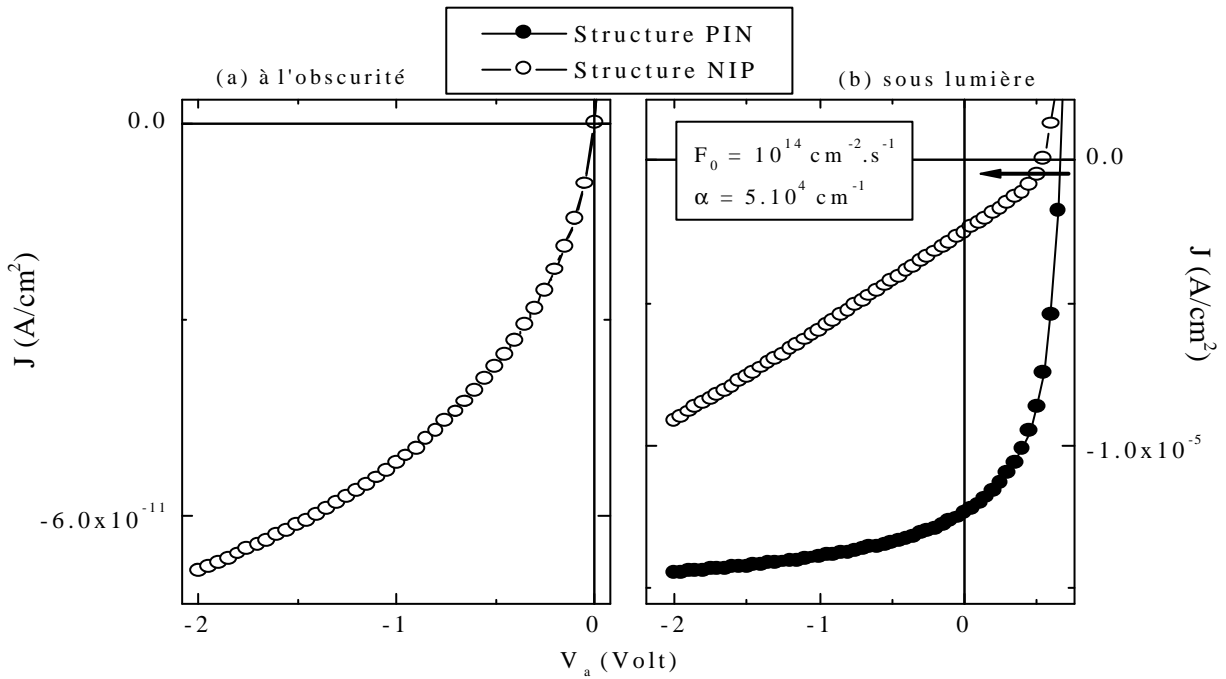


Figure.IV.51 Caractéristique courant-tension à l'obscurité (a) et sous lumière ($\alpha = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$, $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$) (b) pour la structure PIN et la structure NIP.

Sur la *Figure IV.52*, nous avons reporté la caractéristique $J(\mathbf{a})$ pour un flux de photons incident $F_0=10^{14} \text{ cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$, sous une polarisation $V_a=0$ volt et sous une polarisation $V_a=-2$ volt.

La densité de courant dans la PIN est toujours plus importante que celle dans la NIP. La différence entre les deux densités de courant augmente avec le coefficient d'absorption \mathbf{a} . Nous remarquons que le pic du courant dans la NIP est décalé vers les faibles \mathbf{a} . Ce résultat comparatif montre la meilleure performance de l'homojonction lorsqu'elle est éclairée du côté P. C'est un résultat qui trouve son explication par la longueur de dérive et la longueur de diffusion des porteurs ($L_{diff} = \sqrt{\mu\tau \cdot \frac{KT}{e}}$, $L_{derive} = \mu\tau \cdot \xi$). Avec les grands \mathbf{a} , la génération se fait près de la surface. Dans le cas de la PIN, les électrons doivent parvenir à l'autre extrémité. Dans le cas de la NIP, c'est les trous qui sont collectés sur le contact arrière. Par ailleurs, dans le a-Si:H, les électrons ont une mobilité supérieure à celle des trous. Les électrons arrivent donc plus facilement à la surface arrière.

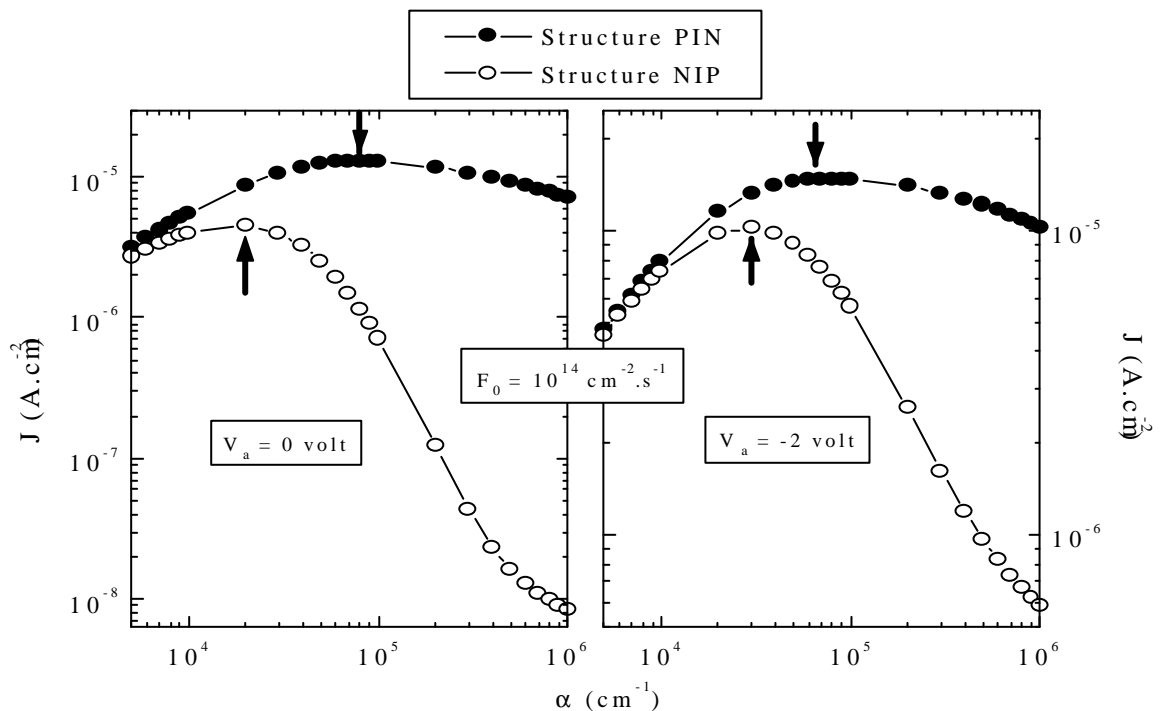


Figure.IV.52 Caractéristique $J(\mathbf{a})$ sous un flux de photons incidents sans polarisation (a) et sous une polarisation $V_a = -2$ volt, pour la structure PIN et la structure NIP.

IV.3 Vérification de la condition de passage au niveau de l'hétérojonction

Nous effectuons une comparaison entre les deux programmes de calcul dénommés « programme Homostructure » et « programme hétérostructure » afin de vérifier la condition de passage de l'hétérostructure.

Nous introduisons dans le « programme hétérostructure » les paramètres d'une homostructure PI_1I_2N en a-Si:H dont les paramètres du matériau sont cités dans le *Tableau.IV.1* et dont les paramètres de la structure sont décrits ci-dessous (*Figure.IV.53*).

Dans le « programme homostructure » nous utilisons les paramètres de la PIN décrites ci-dessous. Les paramètres du matériau sont donnés dans le *Tableau.IV.1*. Nous précisons que la vitesse de recombinaison des électrons et la vitesse de recombinaison des trous sont respectivement $S_n = 10^6 \text{ cm/s}$, $S_p = 10^5 \text{ cm/s}$ sur les deux contacts supposés ohmiques.

Epaisseur (Å)	200	8000		200
Dopage (cm^{-3})	10^{17}	0		$5 \cdot 10^{16}$
	P	I		N
	P	I₁	I₂	N
Epaisseur (Å)	200	4000	4000	200
Dopage (cm^{-3})	10^{17}	0	0	$5 \cdot 10^{16}$

Figure.IV.53 Paramètres standards de la structure PIN et de la structure PI_1I_2N .

Nous présentons le profil des bandes d'énergie sous polarisation $V_a=0$ volt, à l'obscurité (*Figure IV.54*) et sous lumière ($\mathbf{a} = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$, $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)

(Figure IV.55). Sur la figure IV.56, nous avons reporté les profils de la densité de courant obtenus par les deux programmes.

Les profils des bandes d'énergie et de la densité de courant obtenus avec les deux programmes, dans les mêmes conditions, sont identiques. Il y a, donc, une coïncidence entre les deux programmes.

La caractéristique courant-tension relevée à l'obscurité et sous une lumière ($a = 5.10^4 \text{ cm}^{-1}$, $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} .s^{-1}$) (figure IV.57), montre également une parfaite coïncidence entre les deux programmes.

Nous pouvons valider, alors, la condition de passage de l'hétérojonction de I_1 à I_2 dans PI_1I_2N , supposée par la continuité de courant.

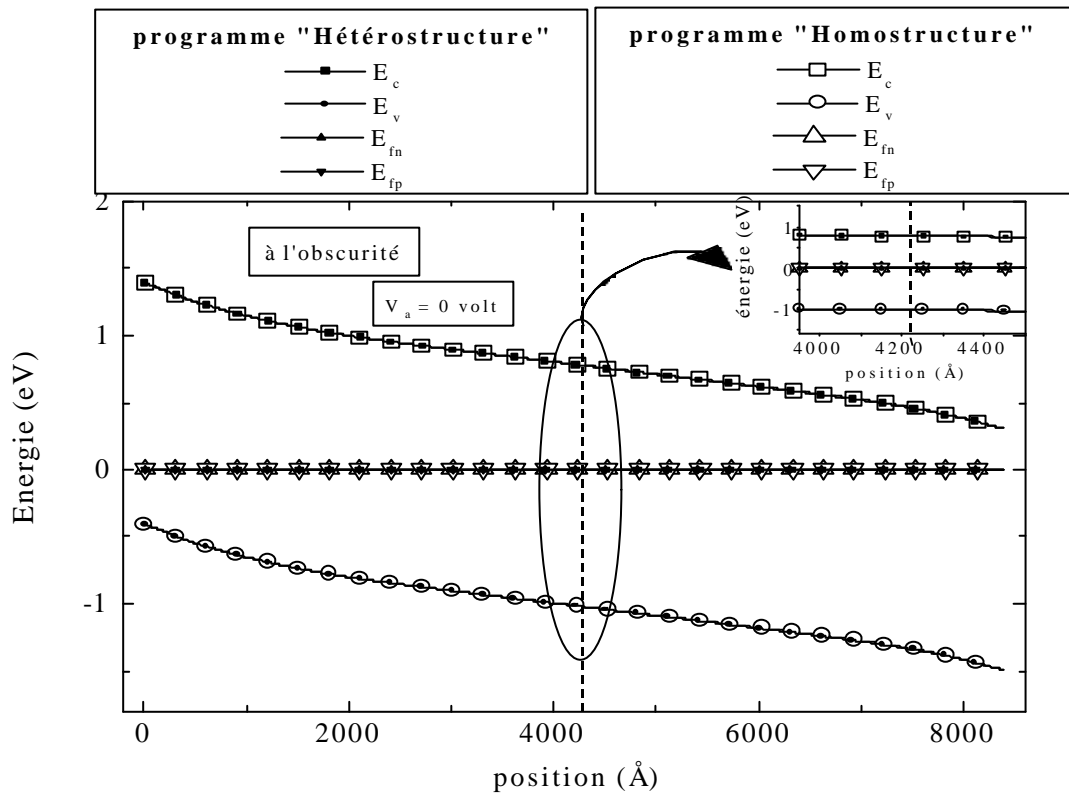


Figure.IV.54 Le profil des bandes d'énergie de la structure PIN à l'obscurité et sous une polarisation $V_a = 0$ volt, calculé par le programme de l'hojonction (en ouvert) et calculé par le programme de l'hétérojonction (en plein)

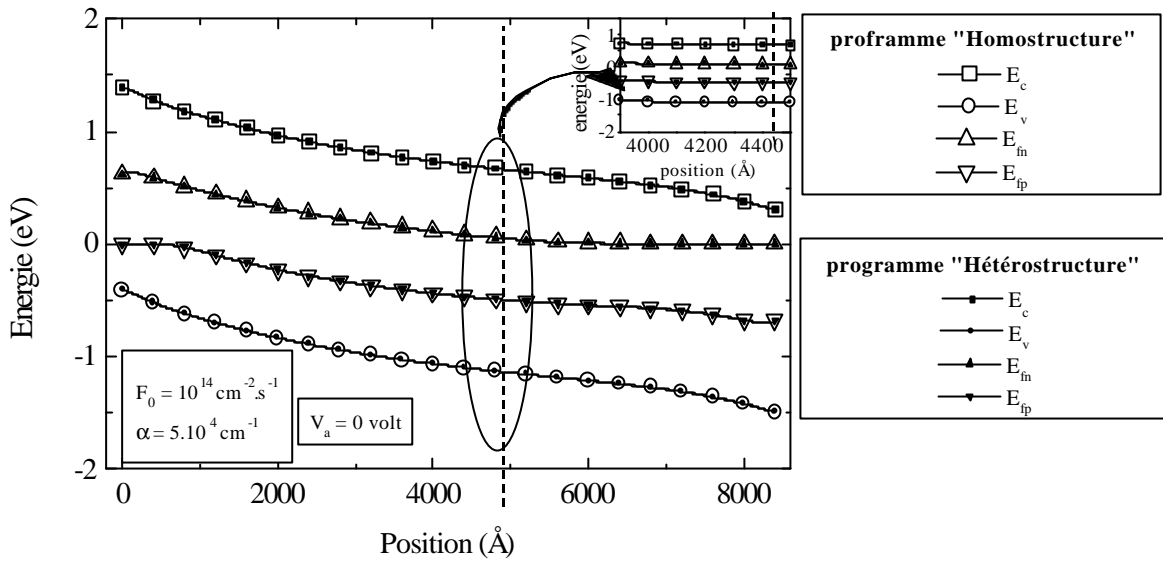


Figure.IV.55 Le profil des bandes d'énergie sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$) et sous une polarisation $V_a = 0 \text{ volt}$, calculé par le programme de l'homojonction (en ouvert), et calculé par le programme de l'hétérojonction (en plein).

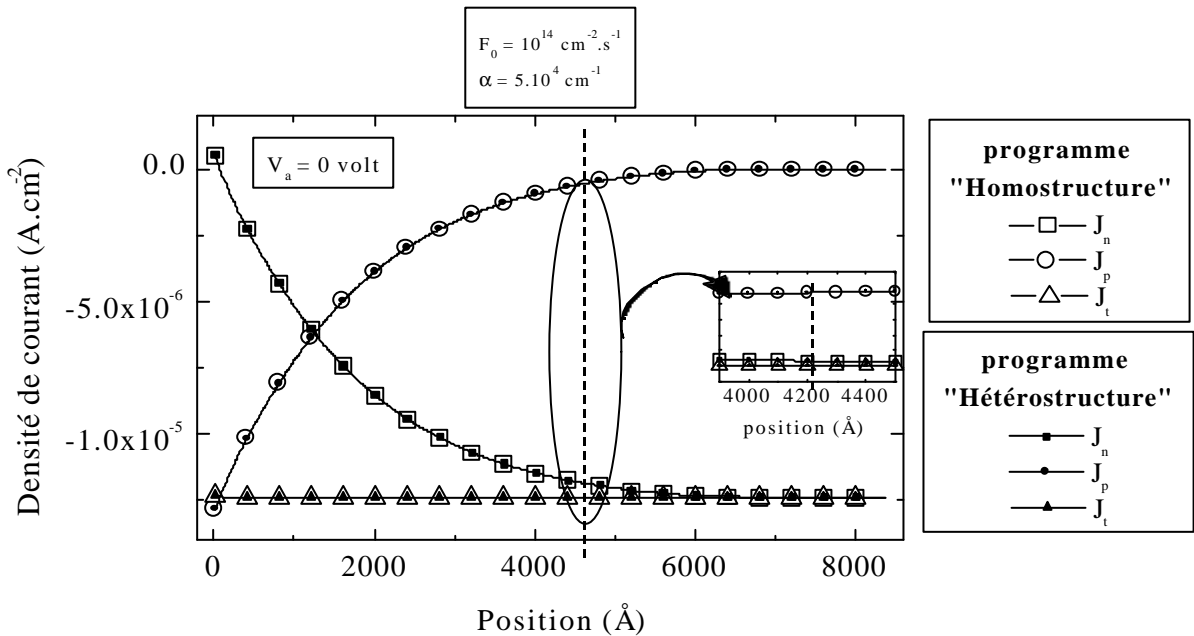


Figure.IV.56 Le profil de la densité de charge sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $\mathbf{a} = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$) et sous une polarisation $V_a = 0 \text{ volt}$, calculé par le programme de l'homojonction (en ouvert), et calculé par le programme de l'hétérojonction (en plein).

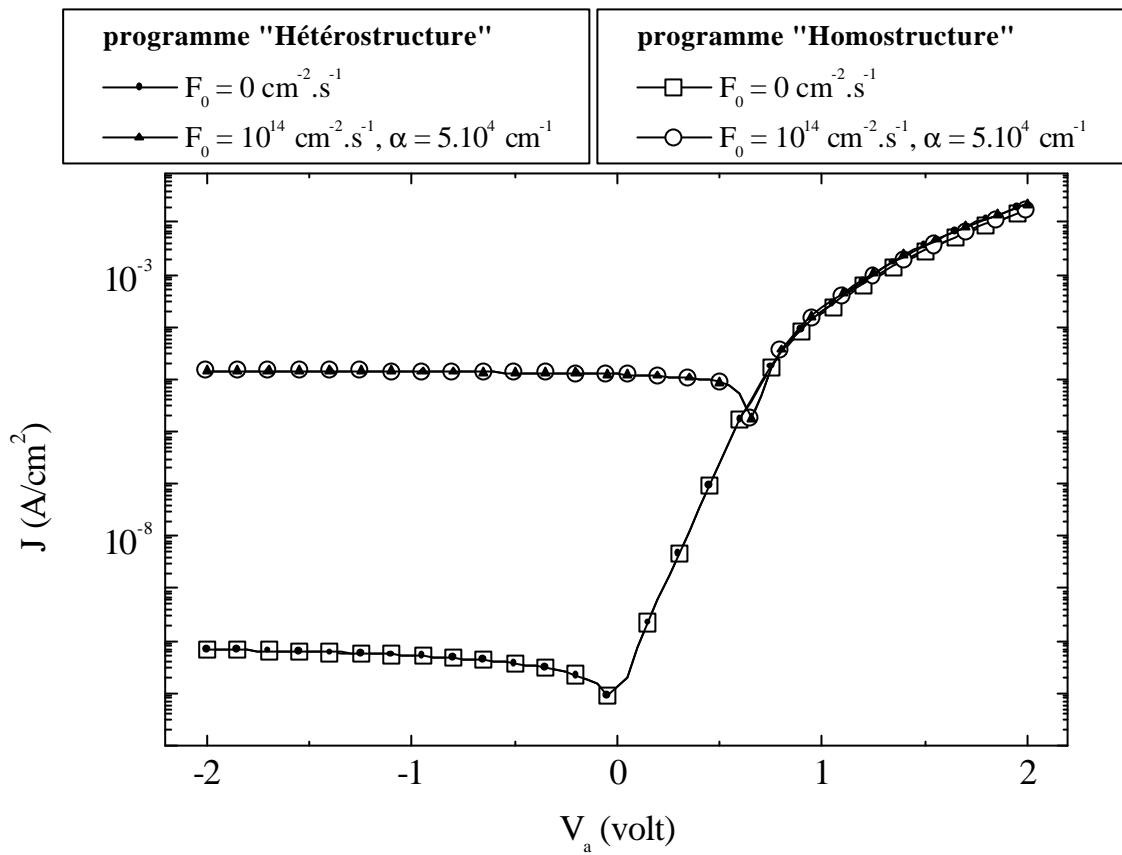


Figure.IV.57 Caractéristique courant-tension à l'obscurité et sous lumière ($F_0 = 10^{14}$ cm⁻².s⁻¹, $\alpha = 5 \cdot 10^4$ cm⁻¹), calculs par le programme de l'homojonction (en ouvert) et le programme de l'hétérojonction (en plein).

IV.4 Hétérostructure PI_1I_2N

IV.4.1 Description de la structure

L'hétérostructure PI_1I_2N est constituée de deux couches de large gap (P : dopée P et I_1 : non dopée) et par deux couches de gap plus faible (I_2 : non dopée et N : dopée N).

Nous proposons dans ce paragraphe d'étudier l'hétérostructure PI_1I_2N et l'effet de la polarisation sur le fonctionnement de celle ci.

Nous considérons l'hétérostructure PI_1I_2N avec les couches (P et I_1) en a-Si:H (de gap : $E_{g1}=1,8 eV$) et les couches (I_2 et N) formées de a-SiGe:H (de gap $E_{g2}=1,3 eV$). Le silicium et le silicium germanium cristallins ont des affinités très proches. Nous supposons que les deux matériaux ont la même affinité électronique (*Figure IV.58*). Concernant les autres paramètres de la DOS, nous considérons les paramètres cités dans le *Tableau IV.1*. Les paramètres géométriques et du dopage sont donnés sur la *Figure IV.59*.

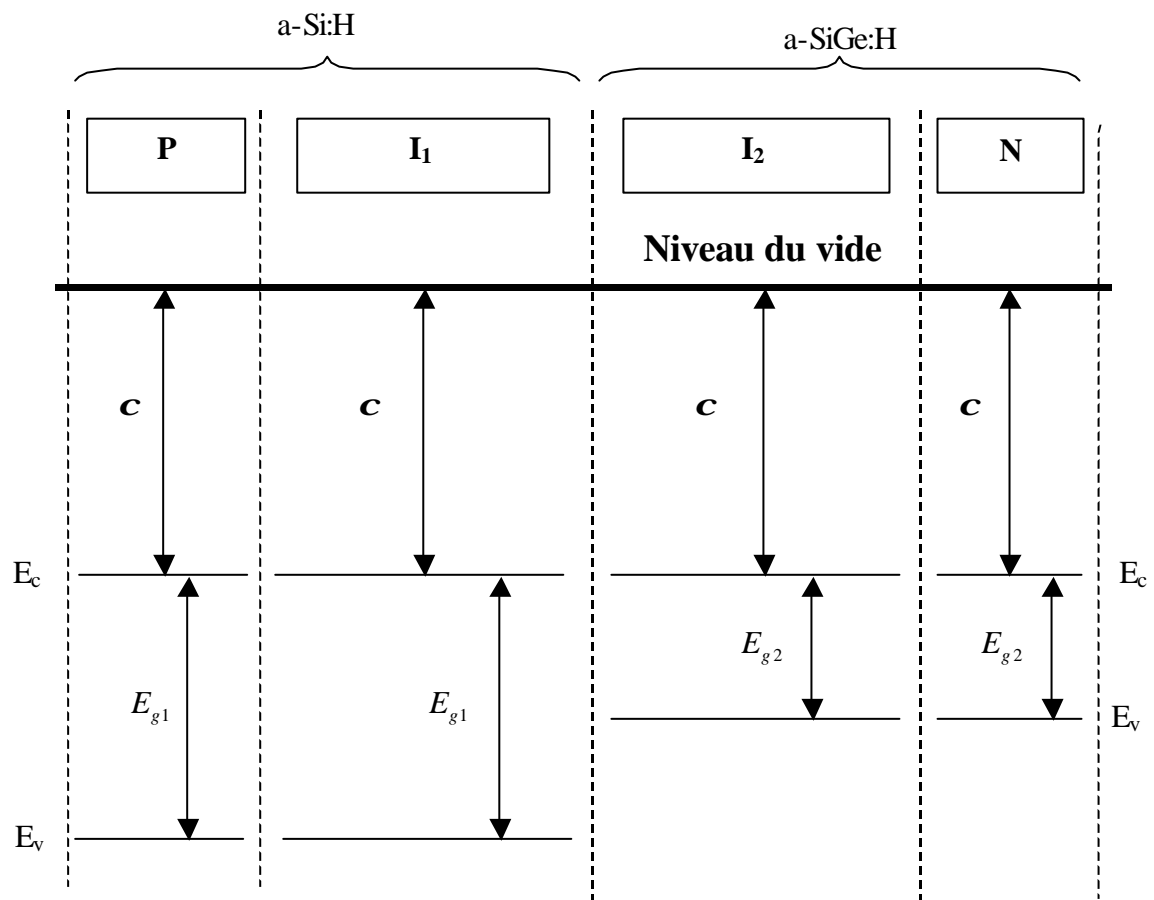


Figure.IV.58 Les couches de l'hétérostructure PI_1I_2N à l'état isolé.

	P	I ₁	I ₂	N
Matériau		a-Si:H	a-SiGe:H	
Gap (eV)		1,8	1,3	
Épaisseur (Å)	200	5000	5000	200
Dopage (cm ⁻³)	10 ¹⁷	0	0	5.10 ¹⁶

Figure.IV.59 Paramètres de l'hétérostructure PI₁I₂N.

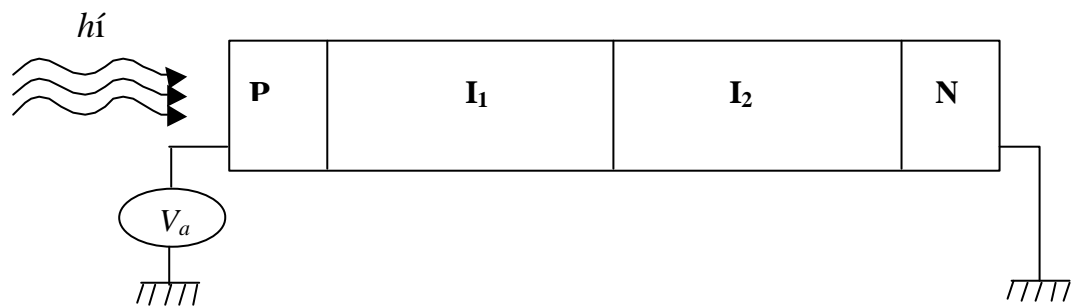


Figure.IV.60 Structure PI₁I₂N polarisée par une tension V_a et éclairée par une lumière de flux de photons incidents F_0 et d'énergie de photon $h\nu$

IV.4.2 Spectres d'absorption du a-Si:H et du a-SiGe:H

Les matériaux utilisés dans cette structure ont des largeurs de gap différentes. En conséquence, les spectres d'absorption sont également différents. Pour calculer le spectre d'absorption pour chacun des deux matériaux, nous procédons ainsi :

1. Pour $h\nu < E_g$: le coefficient d'absorption est considéré faible. Nous prenons dans cette gamme $\alpha = 10^3 \text{ cm}^{-1}$.

2. Pour $h\nu > E_g$: le coefficient d'absorption α est supérieur à 10^4 cm^{-1} ($\alpha > 10^4 \text{ cm}^{-1}$). La relation entre le coefficient d'absorption et l'énergie de photons est donnée par la relation de Tauc :

$$\sqrt{\alpha \cdot h\nu} = B(h\nu - E_g).$$

Pour calculer la constante B, nous nous sommes servis d'un spectre d'absorption expérimental présenté sur la *Figure IV.61* (la mesure a été fait au niveau de notre équipe). La valeur de la constante B est obtenue par le Fit linéaire présenté sur la *Figure IV.62*. Nous considérons que $B_{a\text{-Si:H}} = B_{a\text{-SiGe:H}}$. Nous représentons dans la *Figure IV.63* le spectre d'absorption utilisé.

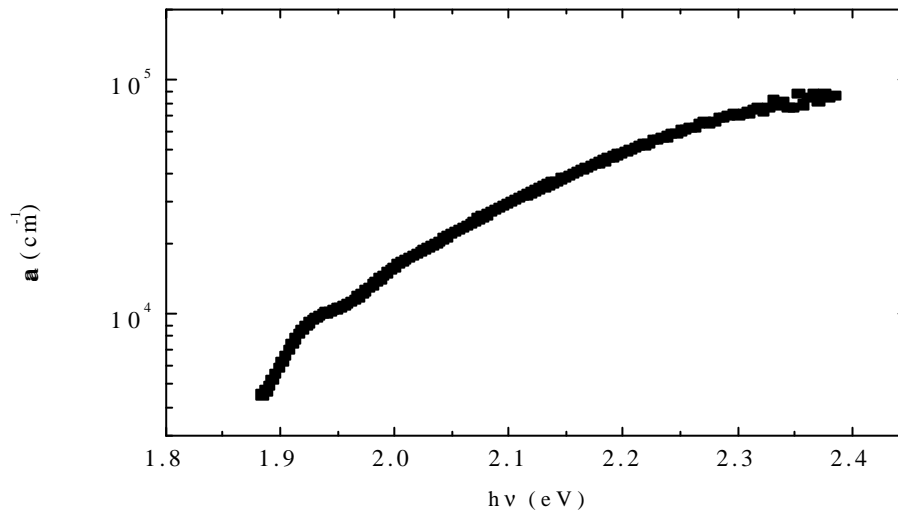


Figure.IV.61 Spectre d'absorption expérimental du a-Si:H.

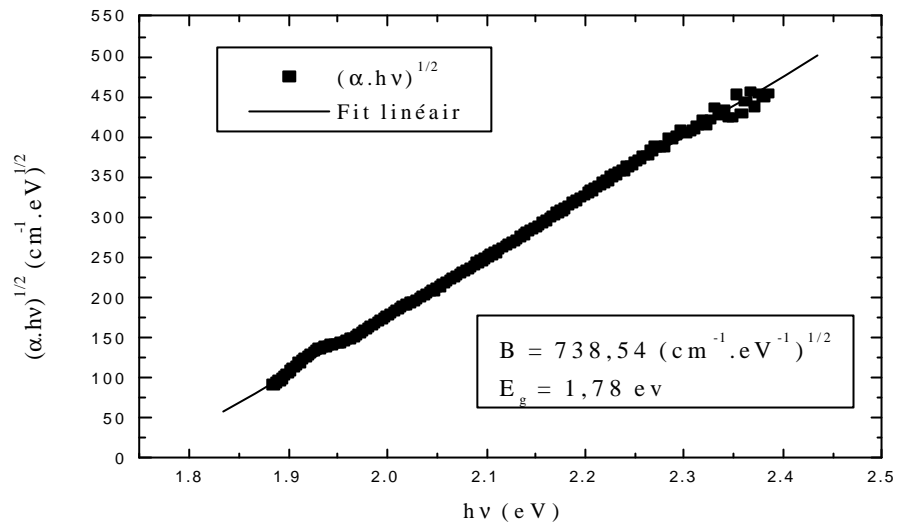


Figure.IV.62 La courbe $\sqrt{(\alpha \cdot hv)}$ en fonction de hv et le fit linéaire correspondant.

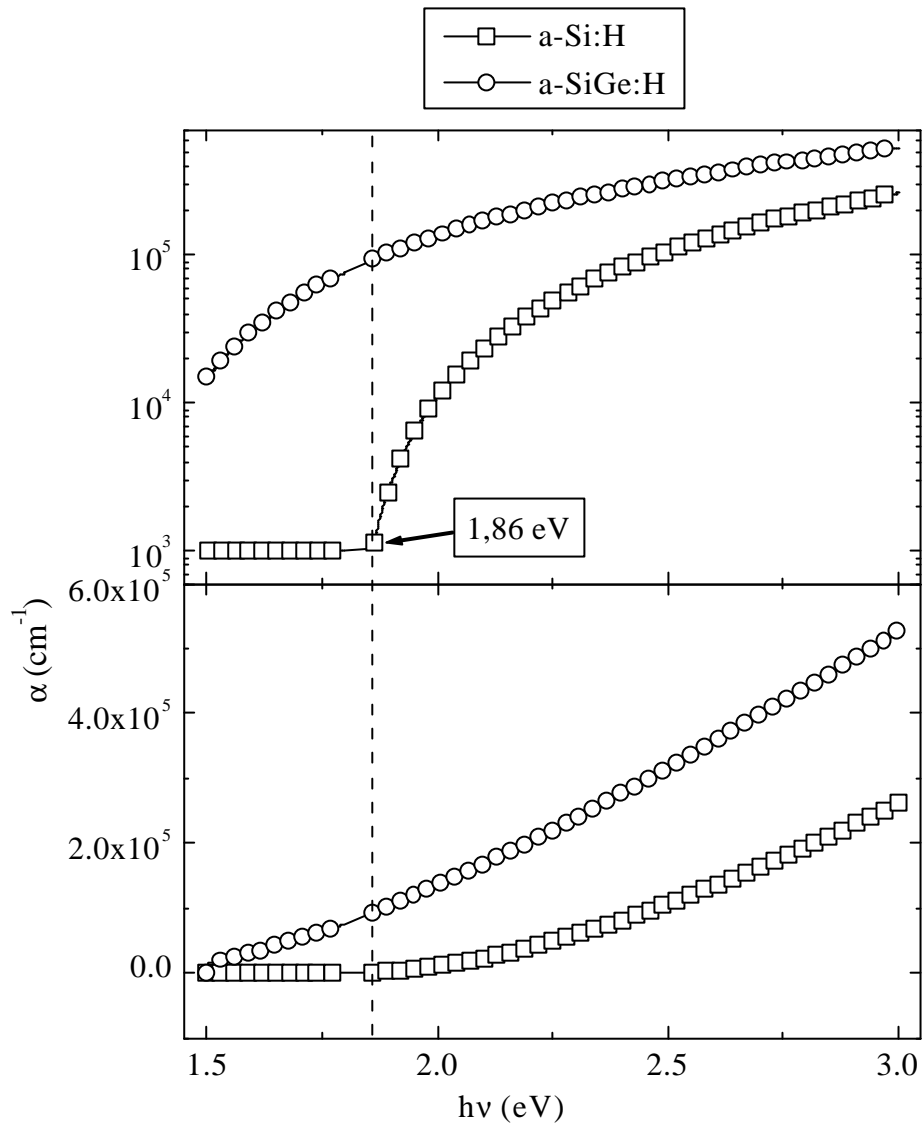


Figure.IV.63 Les spectres d'absorption du a-Si:H et du a-SiGe:H utilisés.

IV.4.3 Caractéristique $J(h\nu)$

Sur la *Figure IV.64*, nous avons représenté la caractéristique $J(h\nu)$ pour un flux de photons de $F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, à trois polarisations : 0 / -0,5 / -0,75 volt. Chacune des courbes $J(h\nu)$ peut se décomposer en deux parties distinctes : elle présente un pic dans la gamme des fortes énergies de photons et un épaulement dans la gamme des faibles énergies de photons, le point de séparation se trouve à une énergie de photons 1,86 eV.

Sur l'ensemble du spectre, la densité de courant augmente avec $|V_a|$. Cette augmentation est importante pour les faibles énergies de photons [44]. D'où le déplacement du pic vers les faibles énergies de photons quand la polarisation augmente.

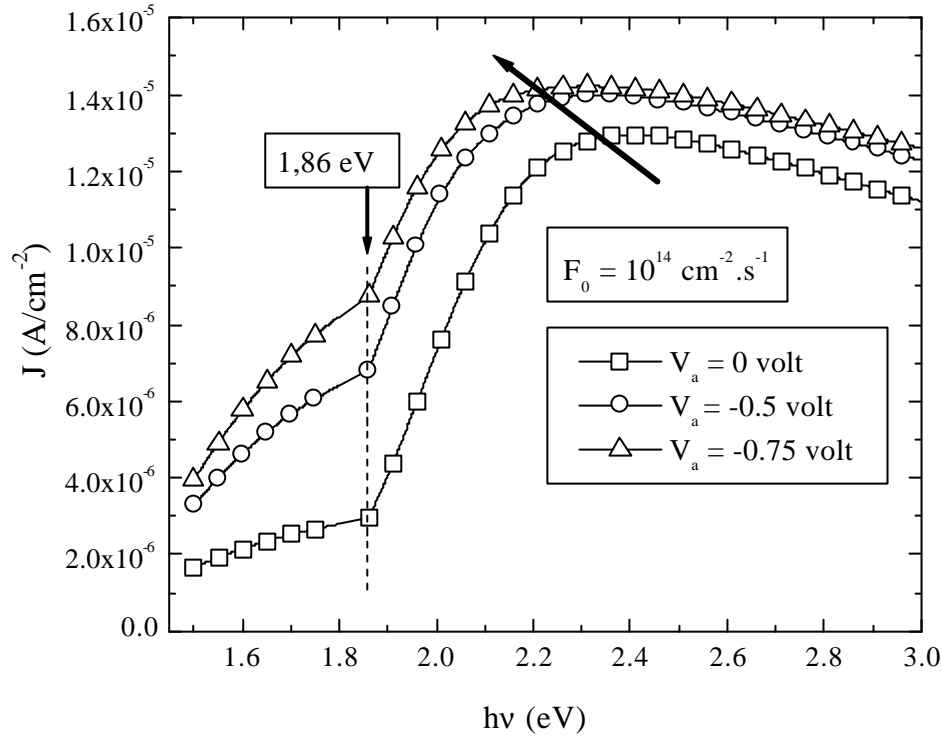


Figure.IV.64 Tracé de la densité de courant en fonction de l'énergie de photons pour plusieurs polarisations.

Afin de comprendre le comportement de la caractéristique $J(h\nu)$, nous avons étudié le cas où le a-SiGe:H est transparent à la lumière ($\alpha(a\text{-SiGe:H}) = 0$), d'une part et le cas où le a-Si:H est transparent à la lumière ($\alpha(a\text{-Si:H}) = 0$), d'autre part (Figure IV.65). Le Tableau IV.4 résume les cas de comparaison basés sur l'absorption optique.

Dans le cas où I_2N (a-SiGe:H), est transparent, $J(h\nu)$ montre une variation semblable à celle du cas général pour $h\nu > 1,86 \text{ eV}$. Dans le cas où la partie PI_1 (a-Si:H), est transparente, la courbe $J(h\nu)$ montre une variation similaire à celle du cas

général pour $h\nu < 1,86 eV$ Nous pouvons conclure que l'épaule correspond à l'absorption dans le a-SiGe:H et le pic correspond à l'absorption dans le a-Si:H.

	P	I ₁	I ₂	N
Cas général	$a \neq 0$	$a \neq 0$	$a \neq 0$	$a \neq 0$
1 ^{er} cas	$a \neq 0$	$a \neq 0$	$a = 0$	$a = 0$
2 ^{em} cas	$a = 0$	$a = 0$	$a \neq 0$	$a \neq 0$

Tableau.IV.4

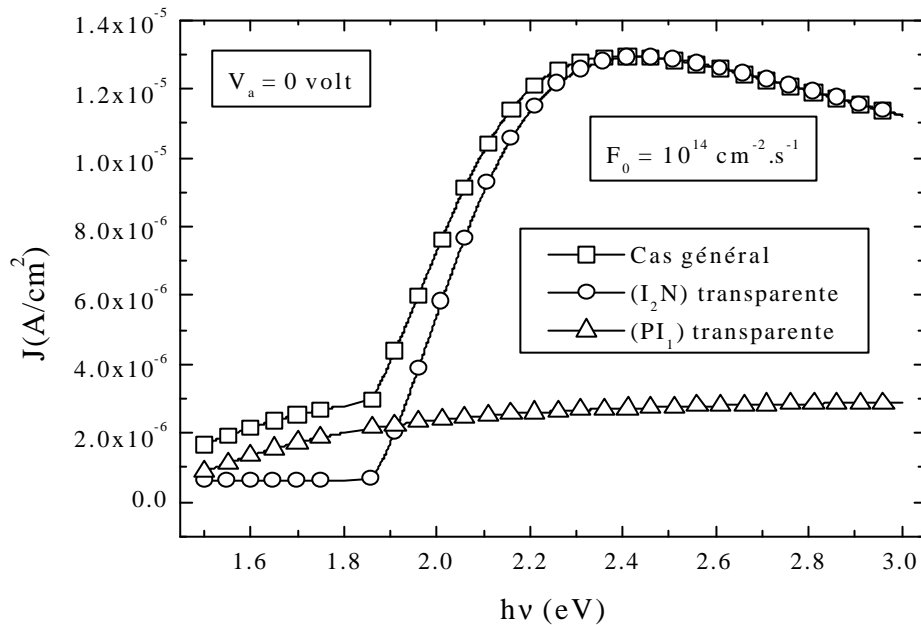


Figure.IV.65 Tracé de la densité de courant en fonction de l'énergie de photons sans polarisation et pour un flux de photons incidents $10^{14} cm^{-2}.s^{-1}$, pour trois spectres d'absorption.

IV.4.4 Profil de la photogénération et profil du champ électrique

Dans cette partie, nous expliquons le comportement de la caractéristique $J(h\nu)$ vis-à-vis de la polarisation en discutant les profils de la photogénération et du champ électrique pour deux valeurs de $h\nu$. Nous nous sommes mis sur les deux cas suivants : le cas où l'énergie correspond à la couleur rouge $h\nu = 1,86 eV$ ($\lambda = 6666,67 \text{ \AA}$) et le cas où l'énergie correspond à la couleur verte $h\nu = 2,5 eV$ ($\lambda = 4960 \text{ \AA}$). Nous avons

tracé le profil de la photogénération pour les deux longueurs d'onde (*Figure IV.66*). Nous notons que la lumière verte est presque totalement absorbée dans la partie PI_1 (a-Si:H), tandis que la lumière rouge est, essentiellement, absorbée dans la partie I_2N (a-SiGe:H).

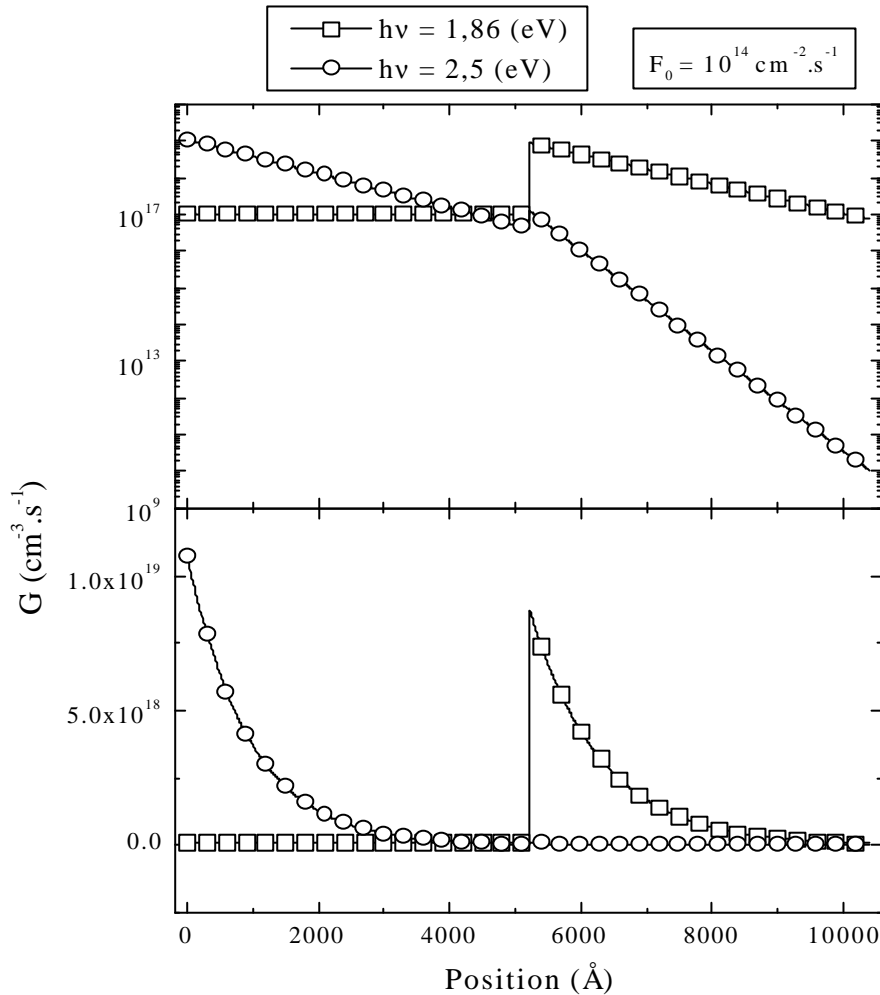


Figure.IV.66 Le profil de la photogénération correspondant à la lumière verte et à la lumière rouge

A. La lumière rouge ($h\nu = 1.86 \text{ eV}$)

Pour deux valeurs différentes de la polarisation : 0 / -0,75 volt, nous représentons, sur la *Figure IV.67*, la distribution spatiale du champ électrique.

La génération des porteurs se passe principalement dans la région I_2N en a-SiGe:H. Les électrons sont directement collectés dans la couche dopée N. Tous les trous photogénérés qui participent au photocourant traversent la région en a-Si:H pour être collectés. Un champ électrique intense favorise énormément la collection de trous sur la face P. Dans la région PI_1 , le champ électrique dépend fortement de la

polarisation, d'où la forte dépendance de la densité de courant avec la polarisation inverse.

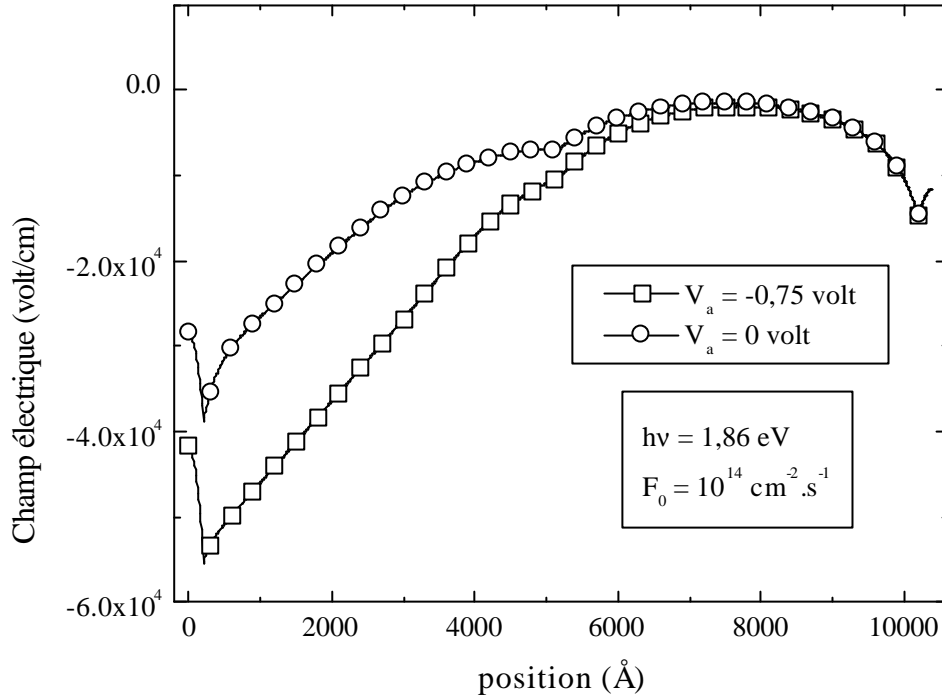


Figure.IV.67 Profil du champ électrique sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $h\nu = 1.86 \text{ eV}$) et dans deux cas de polarisation (0, -0.75 volt)

B. Lumière verte ($h\nu = 2.5 \text{ eV}$)

Sur la Figure IV.68, nous avons représenté le profil du champ électrique pour les polarisations 0 et -0,75 volt. La génération des porteurs se passe, essentiellement, dans la région frontale. Les trous sont directement collectés dans la couche dopée P. Tous les électrons participant au photocourant traversent la région I_2N . La variation du champ électrique dans les couches I_2 et N avec la polarisation est plus faible que la variation du champ électrique dans les couches P et I_1 , d'où la densité de courant est peu influencée par la tension de polarisation.

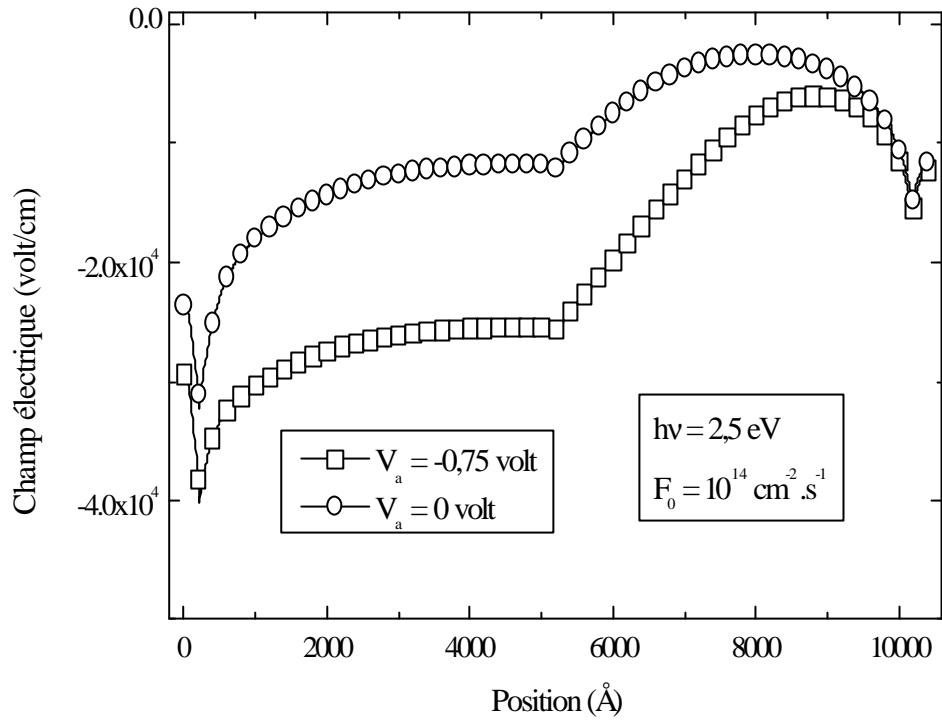


Figure.IV.68 Profil du champ électrique sous lumière ($F_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $h\nu = 2,5 \text{ eV}$) et dans deux cas de polarisation (0 volt et -0,75 volt)

V.1 Comparaison entre les structures PIN et NIP

Le déplacement des porteurs de charges libres est conditionné par la longueur de dérive et la longueur de diffusion ($L_{diff} = \sqrt{\mu \frac{KT}{e}}$, $L_{derive} = \mu x$). Dans le a-Si:H, la mobilité des électrons est supérieure à celle des trous, d'où la facilité du déplacement des électrons. Dans une multicouche à base de a-Si:H, les paires électrons-trous sont générées près de la surface éclairée. Pour une structure PIN, les électrons sont collectés à la surface arrière. Par contre, pour la NIP, ce sont les trous qui sont collectés à la surface arrière. Le courant dans une PIN est donc plus important que le courant dans une NIP. Ce qui permet de confirmer que c'est la PIN qui donne de meilleures performances.

V.2 Homostructure PIN

V.2.1 Effet de quelques paramètres du modèle de la DOS

A. Effet de la concentration des liaisons pendantes N_{db}

À l'obscurité et à une polarisation négative la densité de courant augmente avec N_{db} à cause de la génération thermique. Tandis qu'en polarisation positive, la densité de courant diminue avec N_{db} .

Notons que sous lumière la densité de courant diminue en augmentant N_{db} jusqu'à ce que le comportement de la caractéristique courant-tension de la PIN s'approche du comportement ohmique (caractéristique presque linéaire).

Par ailleurs, la tension en circuit ouvert V_{oc} et le courant en court circuit J_{cc} diminuent lorsque la N_{db} augmente.

B. Effet de la température caractéristique de la queue de bande de conduction (T_c)

La température T_c influe peu sur la densité de courant. Néanmoins, nous avons constaté qu'à des polarisations positives élevées, il y a une diminution de la densité de courant avec l'augmentation de T_c .

La tension en circuit ouvert V_{oc} et le courant en court circuit J_{cc} sont, de même, peu affectés par la variation de T_c .

C. Effet de la température caractéristique de la queue de bande de valence (T_v)

À l'obscurité, la variation de T_v modifie le comportement de la densité de courant. Pour les fortes polarisations positives, la densité de courant diminue avec T_v . Pour les faibles polarisations positives et pour les polarisations négatives, nous observons une très faible diminution. Sous lumière, nous notons une diminution de la densité de courant avec l'augmentation de T_v .

La tension V_{oc} et le courant J_{cc} diminuent avec l'augmentation de T_v .

V.2.2 Effet des paramètres géométriques et des dopages

A. Effet de l'épaisseur de la région I (E_i)

L'augmentation de E_i est une augmentation du volume de la région non dopée I. Donc pour les faibles coefficients d'absorption, le nombre de photons absorbés croît avec E_i , d'où la création d'un nombre important de paires électrons- trous. Ce qui est à l'origine de l'augmentation du courant avec E_i . Pour les grandes valeurs de \mathbf{a} , l'absorption se fait presque à la surface donc l'augmentation de E_i ne fait que rallonger le parcours des porteurs qui seront difficilement collectés, d'où la diminution du courant avec E_i .

Le potentiel en circuit ouvert (V_{oc}) varie peu avec l'épaisseur de la région I. Par contre la densité de courant (J_{cc}) diminue quand E_i augmente.

B. Effet de l'épaisseur de la région P (E_p)

Le profil de la photogénération montre que :

- Pour les faibles \mathbf{a} , la densité de courant n'est pas influencée par la variation de E_p .
- Pour les forts \mathbf{a} , la densité de courant diminue en augmentant l'épaisseur E_p .

Si la couche P est transparente ($\mathbf{a}(P)=0$), la densité de courant pour les forts coefficients d'absorption augmente avec l'augmentation de E_p .

Le V_{oc} varie peu avec l'épaisseur de la région P. Le J_{cc} diminue en diminuant E_p .

C. Effet de l'épaisseur de la région N (E_n)

La majeure partie de la lumière est absorbée dans la couche P et la couche I (avant d'arriver à la région dopée N). Ceci explique le fait que la réponse de la PIN est insensible à la modification de l'épaisseur E_n .

D. Effet du dopage de la région P (N_{ap})

Pour les faibles valeurs de a , le champ électrique et le taux de recombinaison dans la région frontale augmentent avec N_{ap} . Ceci peut expliquer l'insensibilité de la densité de courant à la modification de N_{ap} . Pour les forts coefficients d'absorption, l'intensité du taux de recombinaison augmente considérablement avec N_{ap} . Malgré la croissance du champ électrique, son effet n'arrive pas à compenser la recombinaison dans la région non dopée, d'où la densité de courant diminue en augmentant N_{ap} .

Le potentiel en circuit ouvert V_{oc} augmente avec N_{ap} pour montrer une saturation à $N_{ap}=10^{17} \text{ cm}^{-3}$. La variation du courant en court circuit J_{cc} présente un maximum.

E. Effet du dopage de la région N (N_{dn})

Du fait que la lumière est atténuée avant d'arriver à la région dopée N, le dopage N_{dn} influe peu sur le courant. De même, la tension V_{oc} reste invariante lorsqu'on change le dopage dans la région N. Par contre, le J_{cc} augmente légèrement avec N_{dn} .

V.3 Hétérostructure PI_1I_2N

Nous avons considéré l'hétérostructure PI_1I_2N avec les couches P et I_1 en a-Si:H, les couches I_2 et N formées de a-SiGe:H.

La réponse spectrale présente un pic. La densité de courant augmente avec $|V_a|$, cette augmentation est importante pour les faibles énergies de photons, d'où le déplacement du pic vers les faibles énergies de photons quand la polarisation augmente.

Explication :

- **Pour les faibles énergies de photons**

La génération des porteurs se passe principalement dans la région I_2N . Les électrons sont directement collectés sur la face arrière. Tous les trous photogénérés qui participent au photocourant traversent la région PI_1 pour être collectés. Dans la région PI_1 , la polarisation a un effet important sur le champ électrique, d'où la forte dépendance de la densité de courant avec la polarisation inverse.

▪ **Pour les fortes énergies de photons**

La lumière verte (forte énergie de photons) est presque totalement absorbée dans la partie PI_1 . Les trous sont directement collectés sur le contact coté P tandis que, les électrons traversent la région I_2N pour être collectés. Dans la région I_2N , le champ électrique varie peu avec la polarisation. Donc l'augmentation de la polarisation n'a pas beaucoup d'effet sur la densité de courant.

V.4 Prévion du comportement de la réponse spectrale d'une hétérostructure formée de deux PIN en configuration tête-bêche

La PIN avant est en α -Si:H de gap E_{g1} , la PIN arrière est formée en α -SiGe:H de gap E_{g2} . Nous supposons la structure polarisée par une tension V_a et soumise à une lumière d'énergie de photons $h\nu$ (Figure V.1).

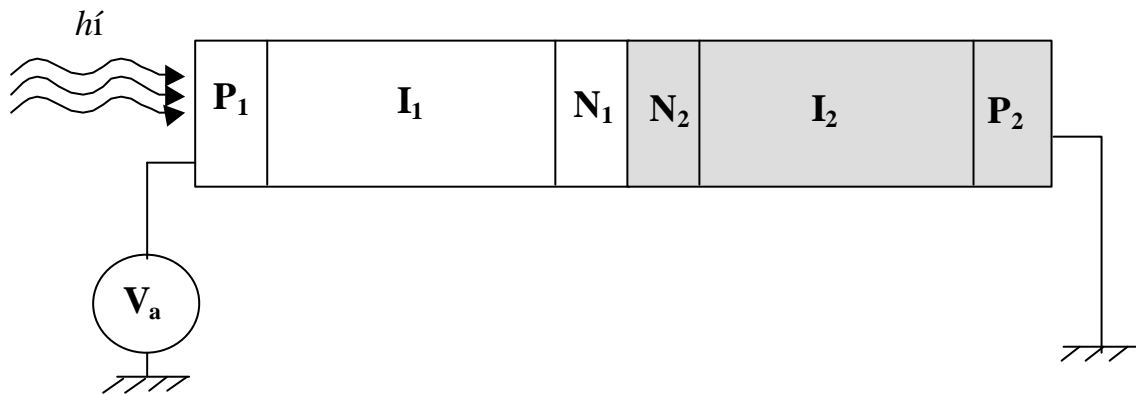


Figure.V.1 La structure $P_1I_1N_1N_2I_2P_2$

- $V_a < 0$

La PIN avant est polarisée en inverse, tandis que la PIN arrière est en polarisation directe.

1. Forte énergie de photons : la lumière est absorbée dans la région frontale. Vu la direction du champ électrique, les électrons sont collectés sur le contact arrière.
2. Faible énergie de photons : la lumière est, essentiellement, absorbée dans la partie $N_2I_2P_2$. Les trous font le parcours jusqu'au contact avant pour être collectés.

Puisque la durée de vie des électrons est supérieure à celle des trous, nous pouvons conclure que la densité de courant donnée par une lumière de forte énergie de photons est plus importante que celle donnée par une lumière de faible énergie de photons.

▪ $V_a > 0$

La direction du champ électrique impose une situation opposée à la situation précédente :

1. Forte énergie de photons : ce sont les trous qui sont collectés sur la surface arrière.
2. Faible énergie de photons : ce sont les électrons qui sont collectés sur la surface avant.

Nous déduisons que la densité de courant donnée par la lumière de forte énergie de photons est plus faible que celle donnée par la lumière de faible énergie de photons.

Sur la *Figure V.2*, nous proposons l'allure typique de la réponse spectrale de ce type de structures.

Par ce type de structure, des détecteurs de deux couleurs (bicolores) sont faisables. La position des maximums de la réponse spectrale peut être décalée en changeant les épaisseurs des couches et les largeurs des gaps des deux couches I. Par ce moyen nous pouvons construire des détecteurs rouge-vert, rouge-bleu ou vert-bleu.

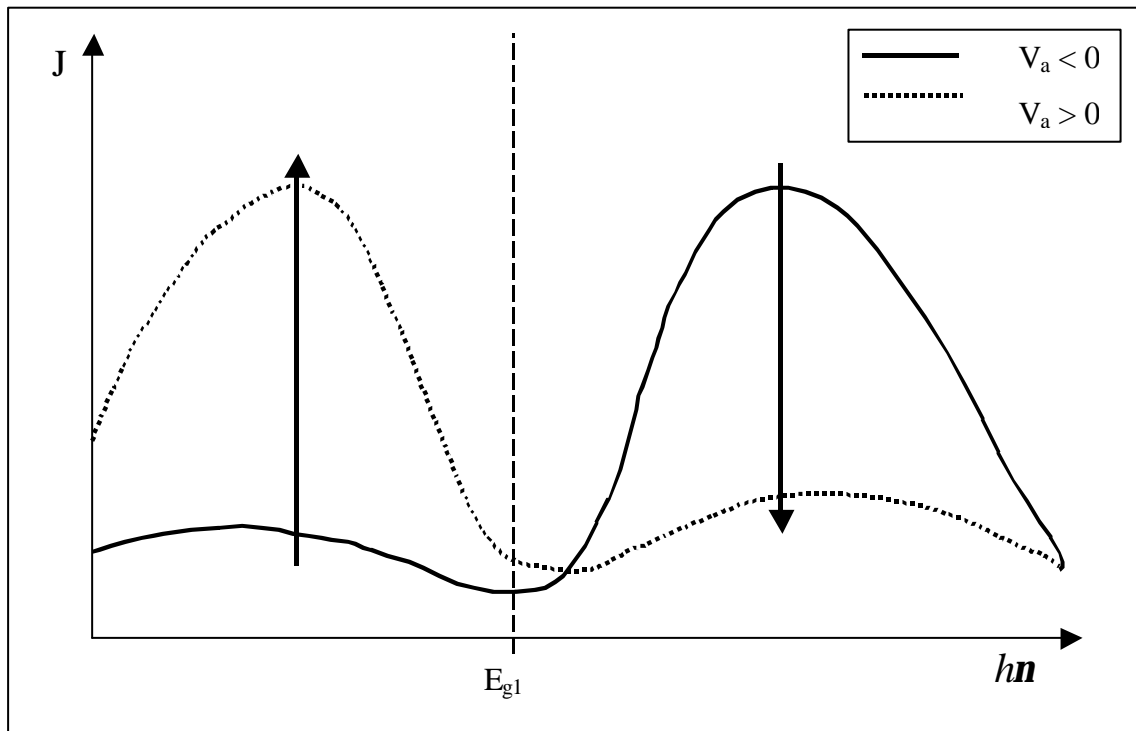


Figure.V.2 L'allure prévue pour réponse spectrale de l'hétérostructure $P_1I_1N_1N_2I_2P_2$.

Notre travail a consisté à simuler numériquement les propriétés optoélectroniques des dispositifs à multicouches à base de a-Si:H et de ses alliages. Nous avons mis au point deux programmes de simulation. Le premier programme est adapté à l'homostructure PIN. Le deuxième programme de calcul est adapté à l'hétérostructure PI_1I_2N . Les deux programmes développés nous ont permis d'étudier la structure PIN en a-Si:H et la structure PI_1I_2N où : I_1 est en a-Si:H et I_2 est en a-SiGe:H.

Les résultats obtenus sur la structure PIN sont conformes aux observations expérimentales et à ce qu'on attend physiquement.

A la lumière des résultats qui concernent l'effet des paramètres de la structure, nous pouvons conclure que les performances de la PIN peuvent être optimisées avec un choix adéquat des paramètres géométriques et des concentrations de dopage.

Nous notons qu'une concentration importante des liaisons pendantes conduit à ce que le comportement de la caractéristique courant-tension de la PIN s'approche du comportement ohmique (caractéristique presque linéaire).

En comparant les performances de l'homostructure PIN avec ceux de la NIP nous avons pu confirmer que la PIN présente de meilleures performances.

Nous avons également montré, dans ce travail, que la réponse spectrale de l'hétérostructure PI_1I_2N change avec la tension de polarisation. La densité de courant est beaucoup influencée par la variation de la polarisation quand il s'agit de faibles énergies de photons. Tandis que pour les fortes énergies de photons la densité de courant varie faiblement avec la polarisation. Le pic de la réponse spectrale se déplace vers les faibles énergies de photons quand les polarisations augmentent en valeur absolue.

Nous avons pu ainsi expliciter l'avantage et l'intérêt d'utiliser deux matériaux différents en vue de la détection de la couleur.

REFERENCES

- [1] T. Mohammed-Brahim, K. Kis-Sion, D. Briand, M. Sarret, O. Bonnaud, J. P. Kleider, C. Longeaud, B. Lambert, J. Non cryst. Sol., Vol. 227-230, p. 962 (1998)
- [2] M. H. Brodsky, M. Cardona, J. J. Cuomo, Phys. Rev. B, Vol. 16, p. 3556 (1977)
- [3] S. C. Moss, J. F. Grazkyk, Phys. Rev. Lett, Vol. 23, p. 581 (1969)
- [4] M. Gandais, M. L. Theye, S. Fisson, J. Boisonade, Phys. Stat. Sol, Vol. 58, p. 601 (1973)
- [5] N. Beldi, J. Sib, L. Chahed, T. Smail, T. Mohammed-Brahim, Z. Djebbour, J. P. Kleider, C. Longeaud, D. Mencaraglia, J. Non cryst. Sol., Vol. 164-166, p. 309 (1993)
- [6] W. Spear, P. Le Comber, J. Sol. Stat. Commun, Vol. 17, p. 1193 (1975)
- [7] Y. Pin Chou, S. Chen Lee, J. Appl. Phys., Vol. 83, p. 4111 (1998)
- [8] N. F. Mott, Phil. Mag., Vol. 19, p. 835 (1969)
- [9] M. H. Cohen, S. R. Ovshinsky, J. Non Cryst. Sol, Vol. 4, p. 391 (1970)
- [10] E. A. Davis, N. F. Mott, Phil. Mag, Vol. 22, p. 903 (1970)
- [11] J. Tauc, « Optical Properties of Solids », ed. F. Abelès, North-Holland, Amsterdam (1972)
- [12] F. Urbach, Phys. Rev., Vol. 92, p. 1624 (1953)
- [13] D. E. Carlson, C. R. Wronski, Appl. Phys. Lett., Vol. 28, p.671 (1976)
- [14] P. G. LeComber, W. E. Spear, A. Gaith, Electron Lett., Vol. 15, p. 179 (1979)
- [15] H. Miki et al., Proc. MRS Symp., Vol. 95, p. 431 (1987)
- [16] M. Matsumura, H. Hyama, Proc. IEEE, Vol. 68, p.1349 (1980)
- [17] J. Kanicki, « Amorphous and Microcrystalline Semiconductor Devices », ed. Artech House, Norwood, MA, U.S.A. (1991)
- [18] R. E. I. Schropp, M. Zeman, « Amorphous and Microcrystalline Silicon Solar Cells–Modeling », ed. Kluwer Academic Publishers, Boston, MA, U.S.A. (1998)
- [19] R. A. Street, « Technology and Applications of Amorphous Silicon », ed. Springer, NewYork, U.S.A (2000)
- [20] Wilfried G. J. H. M. Van Sark, « Methode of deposition of hydrogenated amorphous silicon for device applications ».
- [21] Yang, A. Banerjee, K. Lord, S. Guha, Proc. 2nd World Conf. On Photovoltaï c Solar Energy Conversion, p. 387 (1998)

-
- [22] Yang, A. Banerjee, K. Lord, S. Guha, Appl. Phys. Lett., Vol. 70, p. 2975 (1997)
- [23] S. Hazra, A. Middy, J. Rath, S. Basak, S. Ray, Phys. Lett., Vol. 31, p. 292 (1977)
- [24] H. Stiebig, M. Bohm, MRS Spring Meeting- SymposiumA- Amorphous Silicon Technology, San Fransisco, USA (1993)
- [25] P. Rieve, J. Giehl, Q. I. Zhu, M. Böhm. MRS Spring meeting- Symposium A- Amorphous Silicon Technology, San Fransisco, USA (1996)
- [26] D. Knipp, H. Stiebig, J. Fölsch, F. Finger, Wagner, J. Appl. Phys., Vol. 83, N. 3, p. 1463 (1998)
- [27] Q. Zhu, J. Sterzel, B. Schneider, S. Coors, M. Böhm, J. Appl. Phys., Vol. 83, N. 7, p. 3906 (1998)
- [28] B. Atannowski, H. Stiebig, D. Knipp, H. Wagner. J. Appl. Phys., Vol. 85, N. 7, p. 3904 (1999)
- [29] W. Shockley, W. T. Read, Phys. Rev., Vol. 87, p. 835 (1952)
- [30] J. G. Simmons, G. W. Taylor, Phys. Rev., Vol. B4, p. 502 (1971)
- [31] G. W. Taylor, J. G. Simmons, J. Non Cryst. Sol., Vol. 8-10, p. 940 (1972)
- [32] T. Smail, T. Mohammed-Brahim, Phil. Mag., Vol. B 64, p. 675 (1991)
- [33] W. Shockley, J. T. Last, Phys. Rev., Vol. 107, p. 392 (1957)
- [34] E. I. Yoffa, D. Adler, phys. Rev., Vol. B 12, p. 2260 (1975)
- [35] A. G. Milnes, D. L. Feucht, « Heterojunctions and metal-semiconductor Junctions », ed. Academic Press, New York, U.S.A. (1972)
- [36] K. M. Chang, J. Y. Chang, C. Y. Chang, IEEE electron device lett., Vol. 14, N 7, p. 338 (1993)
- [37] A. A. Grinberg, M. S. Shur, R. J. Fisher, H. Morkoç, IEEE Trans. Electron Devices, Vol. ED-31, p. 1758 (1984)
- [38] S. M. Sze, « Physics of Semiconductor Devices », 2nd ed. New York (1981)
- [39] S. R. Dhariwal, S. Rajvanshi, Solar energy materials and Solar Cells, Vol. 79, p. 199 (2003)
- [40] R. A. Street, Appl. Phys. Lett, Vol. 57, p.1334 (1990)
- [41] R. A. Street, Phil, Mag., Vol. B63, p.1343 (1991)
- [42] A. Fantoni, M. Vieira, R. Martins, Mathematics and computers in simulation, Vol. 49, p. 381 (1999)
- [43] M. Hoheisel, Elkereichele, H Harms, J. Kotschy, J. Non cryst. Sol., Vol. 137-138, p. 11181 (1991)
- [44] R. Bruggeman, Neidlinger, M. B. Schubert, J. Appl. Phys., Vol. 81, p. (1997)