

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE HOUARI BOUMEDIENE
FACULTE DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de **MAGISTER**

En: **PHYSIQUE**

Spécialité: **PHYSIQUE DES MATERIAUX**

Par: **HAMMOUDI-FEDALA Katia**

Intitulé:

**Simulation et modélisation de la méthode du photocourant constant (CPM) appliquée au silicium amorphe hydrogéné:
Etude de l'absorption optique**

Soutenu publiquement le: 02 Mai 2007, devant le jury composé de:

Mr. DJELOUAH Hakim	Professeur (USTHB)	Président
Mme SMAIL Tania	Chargée de Cours (USTHB)	Directrice de mémoire
Mme KHALAL-KOUACHE Karima	Maître de Conférence (USTHB)	Examinatrice
Mr. KELLOU Abdelhafid	Maître de Conférence (USTHB)	Examineur
Mme RAHAL Abla	Maître de Conférence (USTHB)	Examinatrice

A la mémoire du professeur Moussa AOUCHER.

Remerciements

Cette étude a été effectuée au Laboratoire de Physique des Matériaux, précisément dans l'équipe Couches Minces et Semiconducteurs de la Faculté de Physique de l'USTHB.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance au feu Professeur Moussa AOUCHER de m'avoir accueillie dans son laboratoire et d'avoir été tout le temps disponible et à l'écoute. Je lui suis reconnaissante de m'avoir permis de travailler avec lui, de m'avoir initiée à la recherche et d'être pour moi un exemple de rigueur.

J'exprime ma gratitude à Madame SMAIL Tania, Chargée de cours à l'USTHB, qui a accepté de diriger ce travail de magister et d'avoir investi un temps précieux dans des discussions qui m'ont été très fructueuses. J'ai pu ainsi profiter de ses connaissances tant sur la physique que sur la programmation. Je la remercie également pour la lecture critique de mon manuscrit et pour tous ses conseils.

J'adresse mes vifs remerciements à Monsieur DJELOUAH Hakim, Professeur à l'USTHB, pour l'honneur qu'il a bien voulu me faire en présidant le jury de ce travail.

Je remercie de l'intérêt que Madame KHALAL-KOUACHE Karima et Monsieur KELLOU Abdelhafid, Maîtres de conférences à l'USTHB, ont porté à mon travail en acceptant de siéger dans le jury.

Je remercie également Madame RAHAL Abla, Maître de conférence à l'USTHB, pour ses nombreux encouragements tout au long de mon travail et en particulier d'avoir acceptée de participer au jury de ce mémoire.

Je ne saurais oublier tous mes camarades et tous les membres de l'équipe pour l'ambiance de travail qui y règne. Je les remercie aussi pour leur gentillesse et pour leurs encouragements.

Je tiens à remercier mon époux Abdelkrim qui m'a aidée et soutenue tout au long de mes études et d'avoir supporté mes sautes d'humeurs.

Je remercie également mes parents, ainsi que toute ma famille pour leur soutien et leurs encouragements tout au long de ma scolarité.

Je remercie enfin tous ceux qui ont aidé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

SOMMAIRE

Introduction	1
<u>CHAPITRE A: Présentation des propriétés structurales et électroniques du silicium amorphe hydrogéné</u>	4
I. Description du matériau	5
I.1. Arrangement atomique du silicium amorphe.....	5
I.2. Description du silicium amorphe hydrogéné.....	6
II. Modèles de densité d'états	6
II.1. Introduction.....	6
II.2. Modèle CFO.....	8
II.3. Modèle de Mott et Davis.....	8
II.4. Notion de gap de mobilité.....	8
II.5. Modèle standard de densité d'états du a-Si:H.....	10
<u>CHAPITRE B: Coefficient d'absorption, photoconductivité, CPM et DBP: description et résultats antérieurs</u>	12
I. Coefficient d'absorption optique	13
I.1. Définition du coefficient d'absorption.....	13
I.2. Mécanismes d'absorption optique.....	14
I.3. Spectre d'absorption optique typique du a-Si:H: description et exploitation.....	15
I.4. Méthode expérimentale de détermination du coefficient d'absorption optique.....	18
I.4.1. Spectre d'absorption par Transmission/Réflexion.....	19
I.4.2. Spectroscopie de déflexion photothermique (PDS).....	20
I.4.3. Méthode du photocourant constant (CPM).....	21
I.5. Formalisme de l'absorption optique.....	21
II. Photoconductivité	25
II.1. Formulation et définition.....	25
II.2. Processus de génération-recombinaison.....	26
II.2.1. Recombinaison.....	26

II.2.2. Génération optique.....	28
III. Méthode du photocourant constant (CPM).....	29
III.1. Description.....	29
III.2. Résultats antérieurs de la CPM appliquée au a-Si:H.....	30
IV. Photoconductivité à double faisceau (DBP).....	35
IV.1. Description.....	35
IV.2. Le quenching optique.....	36
IV.3. Modèle de Rose de la photoconductivité.....	37
<u>CHAPITRE C: Modélisation et simulation numérique</u>.....	40
I. Description du modèle de densité d'états utilisé.....	41
I.1. Etats des queues de bandes.....	42
I.2. Etats des liaisons pendantes.....	43
I.3. Etats étendus des bandes.....	44
I.4. Continuité entre les densités d'états étendus des bandes et les états des queues de bandes.....	44
II. Calcul des concentrations des porteurs libres.....	45
II.1. Equilibre thermodynamique.....	46
II.2. Hors équilibre thermodynamique / Régime stationnaire.....	48
II.2.1. Système d'équations utilisé.....	48
II.2.2. Cinétique des échanges.....	49
II.2.3. Génération et absorption optiques.....	53
II.2.4. Calcul des fonctions d'occupation.....	55
II.2.4.a. Fonctions d'occupation sur les états étendus.....	55
II.2.4.b. Fonctions d'occupation sur les queues de bandes.....	56
II.2.4.c. Fonctions d'occupation sur les liaisons pendantes.....	57
II.3. Procédure du calcul des concentrations des porteurs libres n et p et paramètres microscopiques.....	59
II.3.1. Organigramme du calcul de n et p.....	59
II.3.2. Méthode numérique.....	61
II.3.3. Choix des paramètres.....	63

III. Expérience virtuelle de la CPM	64
III.1. Modélisation et simulation de la CPM.....	64
III.2. Organigramme et méthode numérique de la CPM.....	65
IV. Simulation de la photoconductivité à double faisceau (DBP)	67
<u>CHAPITRE D: Présentation des résultats de la simulation numérique et discussion</u>	70
I. Description du spectre d'absorption optique calculé	71
I.1. Justification du choix des gaussiennes pour les liaisons pendantes.....	71
I.2. Expression de la matrice de transition.....	75
I.3. Contribution des différents états localisés à l'absorption optique.....	78
II. Simulation de la méthode CPM	82
II.1. Détermination du spectre d'absorption.....	82
II.2. Comparaison entre le spectre d'absorption total et celui obtenu par la CPM.....	85
II.2.1. Etude des variations des densités de charge dans le cas de la CPM.....	86
II.2.2. Etude des variations des taux de génération-recombinaison des électrons dans le cas de la CPM.....	87
II.3. La CPM à différentes valeurs de la photoconductivité.....	90
II.4. Vérification des conditions de validité de la CPM.....	92
III. photoconductivité à double faisceau (DBP)	94
III.1. Quenching thermique.....	94
III.2. Quenching optique.....	97
IV. Conclusion	102
Conclusion générale	103
Bibliographie	105

Introduction

Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) est l'un des semiconducteurs non cristallins les plus étudiés. Il a commencé à être développé entre 1950 et 1960. Chittick *et al.* [1] sont les premiers qui ont montré l'intérêt du a-Si:H. En effet, ils observèrent qu'en déposant le silicium amorphe par un plasma de silane (SiH_4), plus de 99.9 % des défauts étaient saturés par l'hydrogène, ce qui rendait ce matériau utilisable comme semiconducteur. Depuis, les recherches sur ses propriétés n'ont pas cessé et l'élaboration des cellules solaires à partir de ce matériau a suscité l'intérêt des scientifiques et des industriels. Les recherches ont montré que ce matériau avait de bonnes propriétés de transport électrique [2] et une forte photoconductivité dues à une faible densité de défauts [3]. Le a-Si:H présente par rapport au silicium monocristallin plusieurs avantages notamment la possibilité de l'élaboration en couches minces, sur de larges surfaces et de le fabriquer à faible coût. Ainsi, plusieurs applications industrielles à base du a-Si:H ont vu le jour telles que les photorécepteurs pour la xérographie, les transistors à effet de champs et plus particulièrement la conversion photovoltaïque. Les propriétés optoélectroniques du a-Si:H dépendent fortement de sa densité d'états. Il est donc nécessaire de mieux connaître cette dernière afin d'optimiser le rendement des applications faites à partir de ce matériau. Ceci a poussé de nombreux chercheurs à axer leurs recherches vers le développement de techniques de caractérisation originales et fiables. Les mesures électriques sont très limitées pour étudier la conduction due aux défauts et pour étudier les propriétés optoélectroniques. D'où l'intérêt des caractérisations optiques dont la plupart reposent sur la mesure de la photoconductivité.

Dans notre laboratoire, le a-Si:H est élaboré par pulvérisation DC magnétron et il est caractérisé par des méthodes électriques et optiques. La méthode du photocourant constant (CPM) figure parmi les méthodes optiques utilisées pour l'obtention du spectre d'absorption optique du matériau étudié. Le coefficient d'absorption optique est déterminé dans les semiconducteurs pour décrire leurs comportements lorsqu'ils sont soumis à une lumière. Le coefficient d'absorption dépend fortement de la structure de bandes du semiconducteur et c'est pour cela que la connaissance du désordre structural et de la densité de défauts du matériau est importante.

Le présent travail est consacré principalement à la simulation de la méthode du photocourant constant (CPM). Nous y avons mis au point un programme numérique permettant le calcul du coefficient d'absorption optique en fonction de l'énergie de photons en utilisant deux méthodes. La première est la méthode de convolution qui consiste à utiliser la définition quantique du coefficient d'absorption qui repose sur la probabilité de transition d'un électron d'un état vers un autre. La deuxième est la CPM qui s'appuie sur le calcul de la photoconductivité du matériau. A travers ces deux calculs nous avons pu tirer des informations sur quelques propriétés du a-Si:H et surtout d'étudier la fiabilité et le domaine de validité spectrale de la technique CPM. Enfin, nous avons consacré la dernière partie de ce

travail à la simulation de la méthode de la photoconductivité à double faisceau (DBP) qui jusqu'à présent n'a été utilisée que pour caractériser des semiconducteurs cristallins.

Nous avons donc réparti ce mémoire en quatre chapitres.

Le chapitre A est consacré à la présentation des propriétés structurales et électroniques du a-Si:H. Nous décrivons donc la structure atomique du a-Si:H et nous présenterons quelques modèles de densités d'états pour ce matériau.

Le chapitre B est subdivisé en quatre grandes parties. Nous donnerons dans la partie I la définition et la description de quelques méthodes de caractérisation permettant d'obtenir le coefficient d'absorption optique. La partie II est consacrée à la description de la photoconductivité et aux processus de génération-recombinaison qui l'engendrent. Nous donnerons dans la troisième partie les hypothèses de la méthode du photocourant constant et quelques résultats antérieurs concernant cette méthode obtenus par d'autres auteurs sur du a-Si:H. La dernière partie du chapitre B est consacrée à la description de la méthode de la photoconductivité à double faisceau. Nous verrons par la suite que cette méthode permet de mettre en évidence la diminution de la photoconductivité en fonction de l'énergie de photon appelée quenching optique. Nous présenterons aussi le modèle conceptuel de Rose qui a permis d'expliquer les quenching thermique et optique de la photoconductivité dans le cas des semiconducteurs cristallins.

Le chapitre C est consacré à la modélisation et à la simulation numérique de la CPM et de la DBP. Ainsi, nous donnerons la description du modèle de densité d'états utilisé dans notre simulation. Nous expliquerons la façon avec laquelle nous avons adapté les équations nécessaires aux calculs pour le cas du a-Si:H et nous présenterons l'algorithme de calcul des concentrations des charges libres, de la CPM et de la DBP.

Enfin, le chapitre D est consacré à la description et à la discussion des résultats obtenues par la simulation numérique. Nous décrivons dans la partie I le spectre d'absorption optique obtenu par la convolution des densités d'états remplies et vides. Nous donnerons les résultats de la simulation de la CPM. Ainsi, nous comparerons les spectres obtenus et nous en extrairons le domaine de validité de la CPM. D'autre part, nous donnerons les résultats de la simulation de la DBP et plus particulièrement le quenching optique de la photoconductivité. Enfin, nous terminerons par une conclusion pour le chapitre D et une conclusion générale.

CHAPITRE A

Présentation des propriétés structurales et électroniques du silicium amorphe hydrogéné

L'étude des propriétés optiques et électriques du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) nécessite une présentation préalable des propriétés structurales et électroniques du matériau. Dans la première partie de ce chapitre, nous décrivons la structure atomique du silicium amorphe (a-Si) et celle du a-Si:H. Dans la seconde partie nous exposons les différents modèles de densité d'états qui ont été proposés par plusieurs auteurs et le modèle de densité d'états standard utilisé dans notre simulation.

I. Description du matériau

I.1. Arrangement atomique du silicium amorphe

Le a-Si est souvent comparé à son homologue cristallin pour le décrire. Un cristal est un arrangement périodique d'atomes ou de molécules dans l'espace. Cette périodicité est maintenue sur une longue distance. Un matériau amorphe ne maintient qu'un ordre à courte distance.

La structure du silicium monocristallin est de type diamant (voir figure A.1) où chaque atome de silicium est lié à quatre autres atomes situés aux sommets d'un tétraèdre qui constitue l'élément de base. La liaison est de type covalent. Dans le a-Si, l'arrangement atomique est basé sur la liaison tétraédrique comme dans le silicium cristallin. Cette configuration ne se reproduit pas au delà des premiers plus proches voisins. Le désordre de la structure atomique du a-Si est dû à la distorsion des angles de liaisons et aux inégalités des distances interatomiques. En outre, une telle structure présente divers défauts, principalement les liaisons non satisfaites dites liaisons pendantes.

Ces défauts engendrent des niveaux énergétiques électroniques à l'intérieur de la bande interdite dits états localisés. La distribution de ces états sera décrite dans le § A.II.

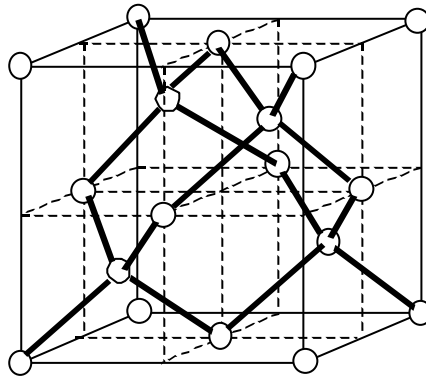


Figure A.1: Maille conventionnelle de la structure diamant.

I.2. Description du silicium amorphe hydrogéné

Des expériences de résonances paramagnétiques électroniques (RPE) montrent la présence de liaisons pendantes allant de l'ordre de 10^{19} à 10^{20} par cm^3 dans le a-Si pur [4]. Malheureusement, le a-Si pur n'est pas utilisable cause de la présence d'un aussi grand nombre de liaisons pendantes. Au cours des années 70, le groupe de Harvard [5] suggère que l'incorporation de l'hydrogène pendant le dépôt sature une partie des liaisons pendantes du a-Si:H. Le signal RPE détecte une diminution des liaisons pendantes dont la densité diminue jusqu'à 10^{16} cm^{-3} . L'analyse infrarouge révèle que l'hydrogène se lie avec le silicium sous plusieurs configurations telles que SiH, SiH₂ et SiH₃.

L'incorporation de l'hydrogène dans le a-Si permet la diminution des défauts, la relaxation du réseau et l'élargissement du gap. L'hydrogène a aussi pour effet de rendre le dopage dans le matériau plus efficace [2]. Ceci entraîne une amélioration des qualités optoélectroniques du a-Si:H.

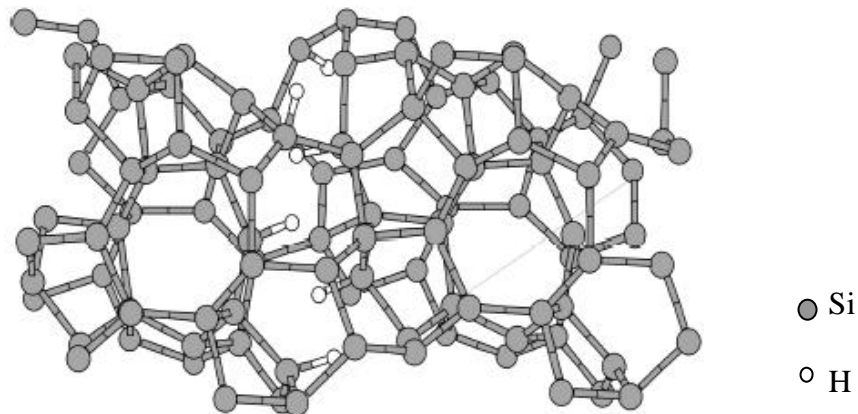


Figure A.2: Arrangement atomique du a-Si:H.

II. Modèles de densité d'états

II.1. Introduction

Sur la base du modèle de Kronig-Penney, qui est une description schématique à une dimension d'un cristal (Figure A.3.a), le théorème de Bloch se base sur la périodicité du réseau cristallin et permet d'établir le diagramme connu des bandes d'énergie dans les semiconducteurs cristallins: une bande de valence (VB: Valence Band) et une bande de conduction (CB: Conduction Band) séparées par une bande interdite.

Pour déterminer un diagramme de densité d'états dans un matériau amorphe, le modèle des puits de potentiel de Kronig-Penney doit être adapté en utilisant d'autres hypothèses. Le maintien de l'ordre à courte distance permet, à partir de l'approximation des liaisons fortes, d'établir un diagramme de bandes avec des états permis et des états non permis. Sur la base de ces hypothèses, plusieurs modèles de densités d'états sont proposés tenant compte du modèle des puits d'Anderson.

Dans un réseau périodique d'un matériau cristallin, les atomes se comportent comme des puits de potentiel périodique à profondeur fixe, ce qui conduit à une bande d'énergie étroite de largeur B . Dans le modèle d'Anderson [6], le potentiel d'une structure amorphe est une suite de puits de potentiel périodiques de profondeur aléatoire (voir figure A.3.b). La différence entre la profondeur de potentiel la plus grande et celle la plus petite est appelée la dispersion V_0 . Anderson suppose que si le rapport V_0/B dépasse une certaine valeur critique alors tous les états qui vérifient cette condition sont localisés. Néanmoins, Mott [7] a montré dans son modèle de densité d'états qu'une partie d'états reste localisée même si le rapport V_0/B est inférieur à la valeur critique d'Anderson. Un rappel de modèles de densité d'états est présenté dans ce qui suit.

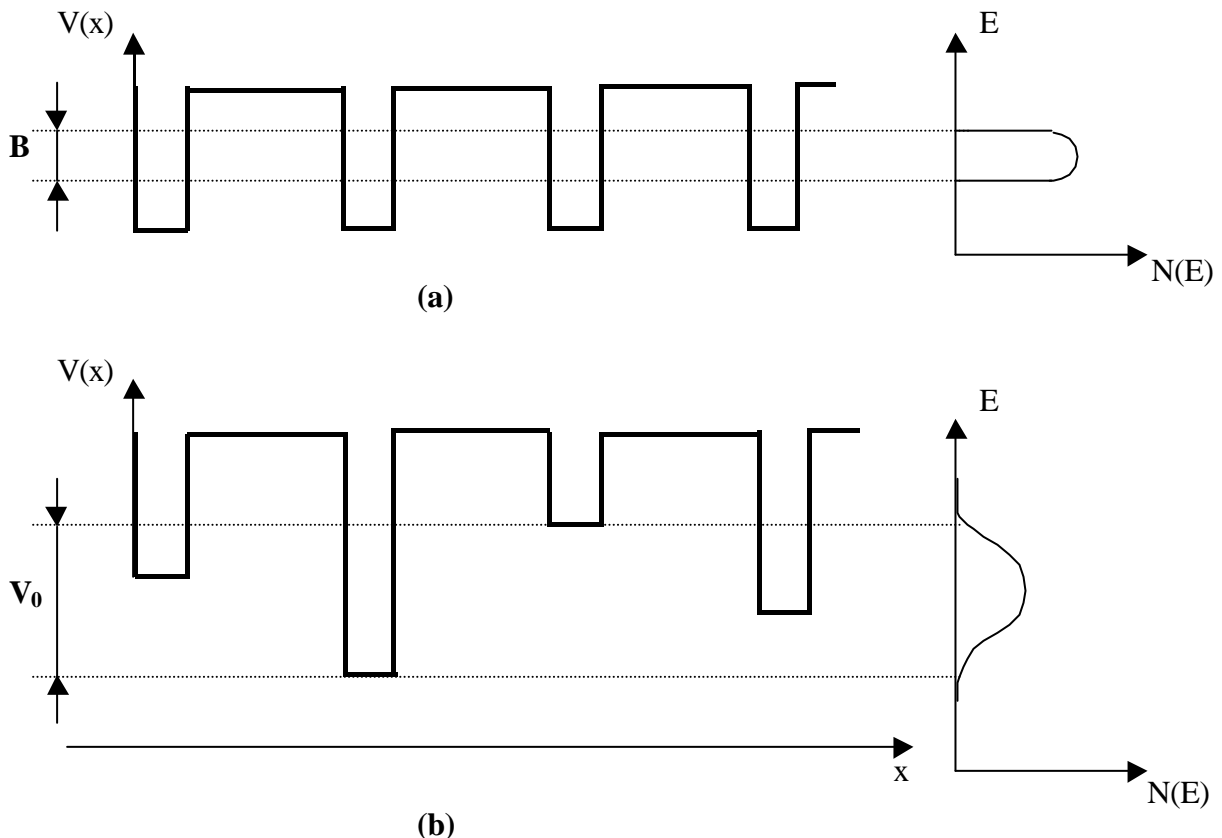


Figure A.3: (a) Puits de potentiel pour un réseau périodique.

(b) Puits de potentiel d'Anderson.

II.2. Modèle CFO

En 1969, Cohen, Fritzsche et Ovshinsky proposent un modèle de densité d'états pour les matériaux amorphes tels que les verres de chalcogénures [8]. Ce modèle de densité d'états est dit de CFO et se caractérise par deux queues de bandes d'états localisés qui se prolongent à l'intérieur du gap et qui se croisent pour définir le niveau de Fermi. La queue de bande de conduction au dessus du niveau de Fermi se comporte comme une suite de niveaux donneurs et la queue de bande de valence qui se trouve en dessous du niveau de Fermi se comporte comme une suite de niveaux accepteurs (voir figure A.4.a).

II.3. Modèle de Mott et Davis

En 1979, Mott et Davis [7] établissent, à partir de résultats expérimentaux, que la densité d'états est composée d'états étendus de la bande de valence (VB) et de la bande de conduction (CB), et des états localisés à l'intérieur de la bande interdite. Ces états localisés se présentent sous forme de prolongements à partir des états étendus des deux bandes à l'intérieur de la bande interdite, appelés queue de bande de valence (VBT: Valence Band Tail) et queue de bande de conduction (CBT: Conduction Band Tail). Ils sont dus au désordre structural présent dans le matériau. Mott et Davis introduisent aussi dans leur modèle deux pics jumeaux qui peuvent être assimilés à des états donneurs et accepteurs. L'apparition de ces deux pics jumeaux est due aux liaisons non satisfaites dans les matériaux amorphes (Figure A.4.b).

II.4. Notion de gap de mobilité

Comme dans le cristallin, la notion de gap subsiste dans l'amorphe. Dans un matériau cristallin, le gap est déterminé par les bords des bandes états étendus. Du fait de l'existence des queues de bandes, la détermination du gap dans un matériau amorphe n'est pas évidente. Mott [9] et Cohen [10] ont montré que la mobilité des électrons et celle des trous varient considérablement de plusieurs décades lors du passage des états étendus des bandes aux états localisés des queues de bandes. On peut voir sur la figure A.4.c la variation de la mobilité en fonction de l'énergie qui nous donne la gamme d'énergie ($E_c - E_v$) où on peut remarquer la transition de la mobilité. Cette gamme d'énergie est appelée "gap de mobilité" pour les matériaux amorphes au lieu de gap.

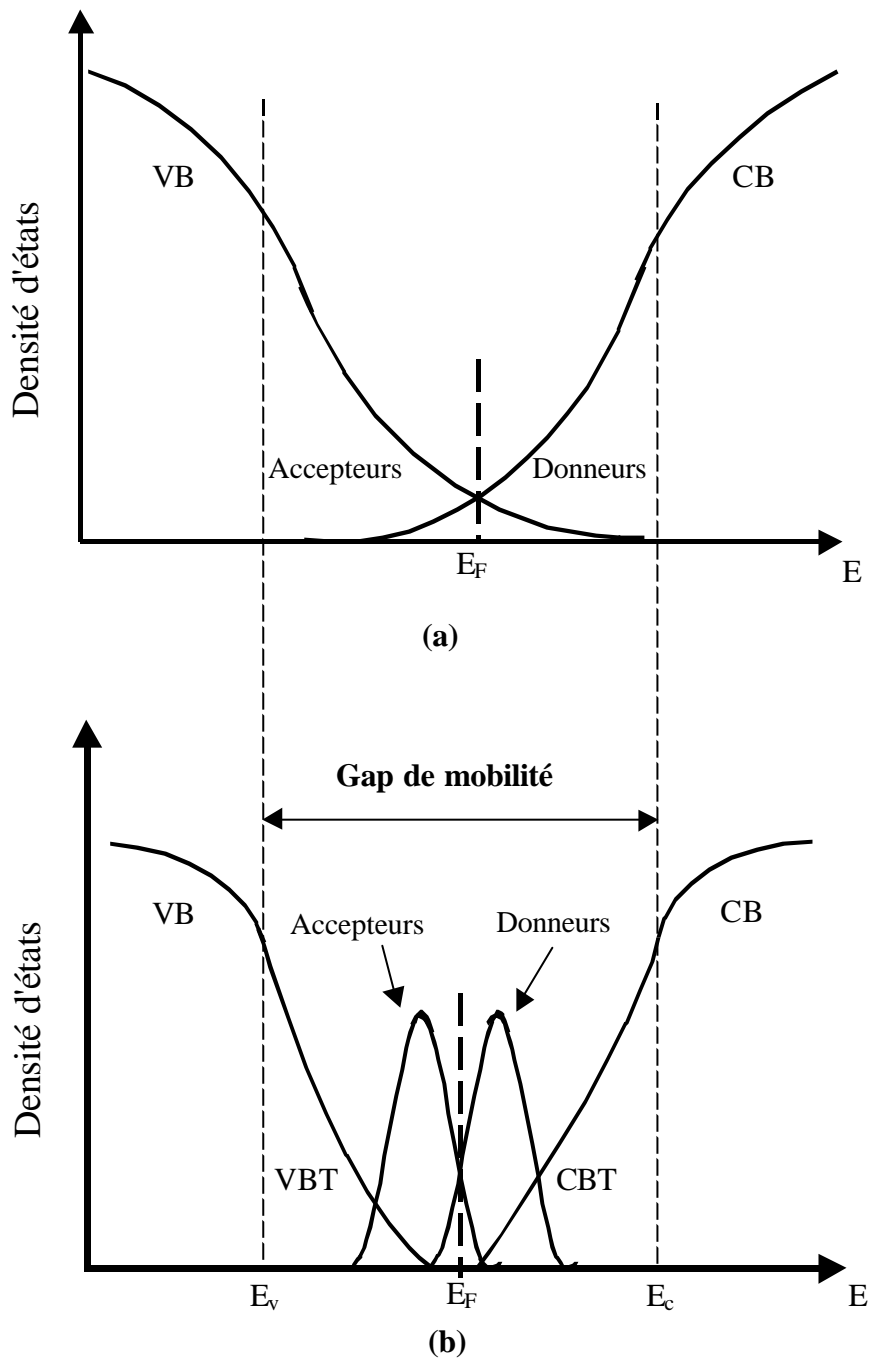


Figure A.4: (a) Modèle CFO pour la densité d'états.

(b) Modèle de Mott et Davis pour la densité d'états.

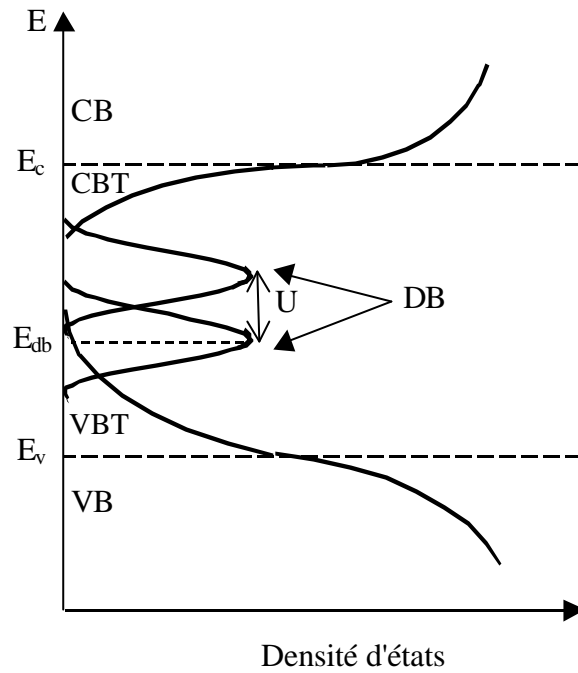
II.5. Modèle standard de densité d'états du a-Si:H

Le modèle standard de densité d'états, communément utilisé pour le a-Si:H, est basé sur le modèle de Mott et Davis [7]. Dans ce modèle (voir figure A.5.a) nous distinguons les états étendus de la CB et les états étendus de la VB qui se prolongent en des queues de bandes à l'intérieur du gap. Dans le silicium amorphe hydrogéné, la queue de bande de valence (VBT) et la queue de bande de conduction (CBT) décroissent en deux exponentielles vers l'intérieur du gap. La pente kT_v caractéristique de la VBT est généralement plus grande que kT_c , qui est la pente caractéristique de la CBT. Les valeurs généralement attribuées à ces pentes sont comprises entre 50 et 90 meV pour kT_v et entre 25 et 60 meV pour kT_c .

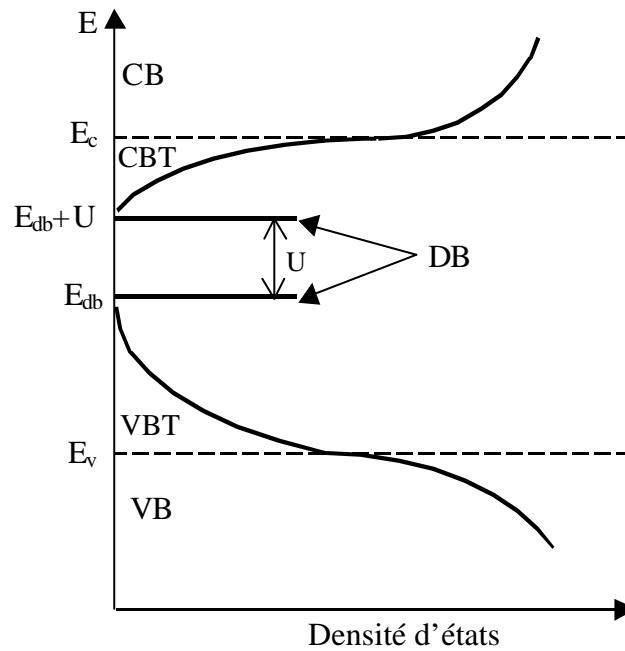
Les liaisons pendantes (DB: Dangling Bonds) du a-Si:H engendrent des états localisés. Elles sont distribuées en deux gaussiennes au milieu du gap. Une liaison pendante peut être dans l'un des trois états de charges notés : D^0 , D^+ et D^- . L'état D^0 correspond à l'état neutre, l'état D^+ est chargé positivement et l'état D^- est chargé négativement. La première gaussienne, dont le pic est en énergie E_{db} par rapport à la bande de valence, représente les états des charges D^0 et D^+ . La seconde gaussienne, dont le pic est en énergie $E_{db}+U$, représente les états de charge D^- . U est l'énergie de corrélation dite de Hubbard. Dans la littérature, la valeur de E_{db} est habituellement comprise entre 0.8 et 0.9 eV par rapport à E_v . L'énergie de corrélation U est généralement prise positive entre 0.3 et 0.4 eV.

Afin de simplifier leurs calculs numériques, plusieurs auteurs ont supposé deux états discrets pour les liaisons pendantes [11] (voir figure A.5.b). L'hypothèse d'états discrets est très utilisée pour expliquer le comportement de quelques propriétés du a-Si:H telle que la photoconductivité. Cependant, pour le calcul du coefficient d'absorption optique, comme dans le cas de notre simulation, l'utilisation des états des liaisons pendantes en forme de gaussiennes s'est imposée.

Le modèle standard de densité d'états avec des gaussiennes pour les liaisons pendantes est celui qui rend compte le mieux des résultats expérimentaux. Il est couramment utilisé pour expliquer les propriétés électroniques et optique du a-Si:H. C'est celui que nous adopterons dans notre étude.



(a)



(b)

Figure A.5: Illustration du modèle de densité d'états standard du a-Si:H.

(a) Etats en gaussiennes pour les DB.

(b) Etats discrets pour les DB.

CHAPITRE B

**Coefficient d'absorption,
photoconductivité, CPM et
DBP: description et résultats
antérieurs**

Dans ce chapitre, nous définissons deux caractéristiques optoélectroniques importantes du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) qui sont le coefficient d'absorption optique et la photoconductivité. L'étude du spectre d'absorption optique et de la photoconductivité permet de déterminer plusieurs paramètres propres au matériau, notamment la densité d'états des niveaux profonds et l'énergie du gap [12]. Dans ce qui suit, nous commençons par définir qualitativement le coefficient d'absorption optique ainsi que ses différents mécanismes. Nous énumérons quelques méthodes expérimentales classiques permettant la détermination du coefficient d'absorption optique. Nous rappelons la définition de la photoconductivité ainsi que les processus de génération-recombinaison. Nous passons ensuite à la présentation du principe de la méthode du photocourant constant (CPM) et nous citons des résultats théoriques et expérimentaux obtenus par d'autres auteurs. Enfin, nous présentons la technique de la photoconductivité à double faisceau (DBP) et le modèle conceptuel de Rose utilisé pour l'interprétation du quenching optique de la photoconductivité.

I. Coefficient d'absorption optique

I.1. Définition du coefficient d'absorption

Lorsqu'une lumière d'intensité I_0 et d'énergie de photons $h\nu$ tombe sur la surface d'un matériau d'épaisseur d , celui-ci absorbe une partie de cette onde lumineuse et réfléchit l'autre partie (voir la figure B.1). L'intensité de lumière $I(x)$ absorbée, à la profondeur x de la surface, est donnée par la relation empirique de Lambert-Bouguer:

$$I(x) = I_0(1 - R)\exp(-\alpha x) \quad (\text{B.1})$$

où R est le coefficient de réflexion à la surface de l'échantillon et α est le coefficient d'absorption optique. La grandeur inverse du coefficient d'absorption α^{-1} est numériquement égale à l'épaisseur d'une couche du matériau considéré qui réduirait l'intensité de la lumière de $1/e$. La courbe donnant le coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde est appelée spectre d'absorption optique du matériau.

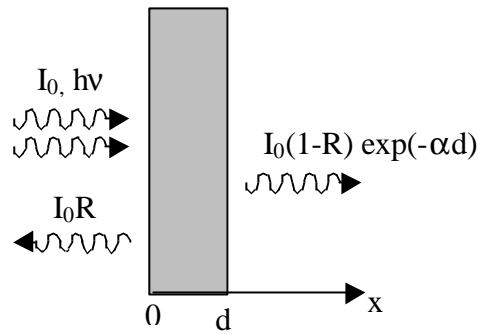


Figure B.1: Schéma illustrant la transmission et la réflexion d'une lumière dans un échantillon éclairé.

I.2. Mécanismes d'absorption optique

Dans les matériaux semiconducteurs, on distingue plusieurs mécanismes d'absorption de la lumière qui dépendent de la structure de bandes d'énergie du matériau et de l'énergie de cette lumière. Les principaux types d'absorption rencontrés généralement dans les semiconducteurs se résument comme suit [13]:

- L'absorption intrinsèque, appelée aussi absorption interbande. Elle provoque la transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction pour créer une paire d'électron-trou libre. Dans ce cas, l'énergie de la lumière doit être supérieure à celle du gap. Lorsque le matériau est à gap direct le vecteur d'onde est conservé lors de la transition.
- L'absorption extrinsèque est due à la transition d'électrons d'un niveau d'impureté vers la bande de conduction ou vers la bande de valence.
- L'absorption par les porteurs de charges libres qui sont accélérés en absorbant une partie de l'énergie lumineuse.
- L'absorption par excitons qui donne naissance à des paires électron-trou corrélées par des forces coulombiennes se produit en particulier dans les semiconducteurs et dans les isolants. Il faut savoir que l'énergie coulombienne entre les deux charges est dissimulée par la présence de charges libres.
- L'absorption par les vibrations du réseau résulte de l'interaction de l'onde lumineuse avec les vibrations thermiques du réseau. Sa contribution est prise en compte lorsque le matériau est à gap indirect. Ainsi, les phonons mis en interaction contribuent à la conservation de l'énergie et du vecteur d'onde.

Il est généralement admis que le a-Si:H est à gap direct. Les mécanismes d'absorption qui interviennent sont principalement l'absorption interbande et l'absorption extrinsèque due aux états localisés. Les transitions entre états localisés sont moins probables par rapport à ces deux dernières. Nous donnons sur la figure B.2 une illustration de ces différentes transitions optiques dans le a-Si:H. Le modèle standard de densité d'états y est utilisé (voir § A.II.5).

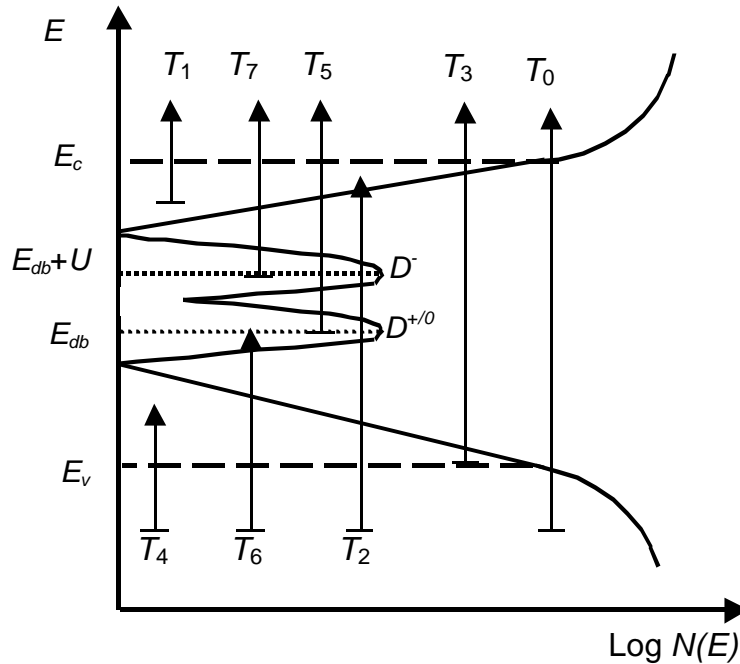


Figure B.2: Illustration des différentes transitions électroniques intervenant dans l'absorption optique pour le cas du a-Si:H.

I.3. Spectre d'absorption optique typique du a-Si:H: description et exploitation

Les mesures optiques constituent un bon moyen pour examiner les propriétés des semi-conducteurs. En particulier, la mesure du coefficient d'absorption optique pour plusieurs valeurs d'énergie de photons, donne des informations intéressantes telles que l'énergie du gap et la concentration des liaisons pendantes présentes dans le matériau [14]. Nous décrivons dans ce qui suit les différentes zones d'absorption du spectre d'absorption optique ainsi que quelques méthodes pour extraire la densité totale des défauts.

La gamme d'absorption qui nous intéresse pour le a-Si:H varie du proche infrarouge à l'ultraviolet. Un spectre typique du coefficient d'absorption du a-Si:H est représenté sur la figure B.3. On remarque l'existence de trois zones d'absorption: la zone I, la zone II et la zone III qui représentent respectivement la forte, la moyenne et la faible absorption.

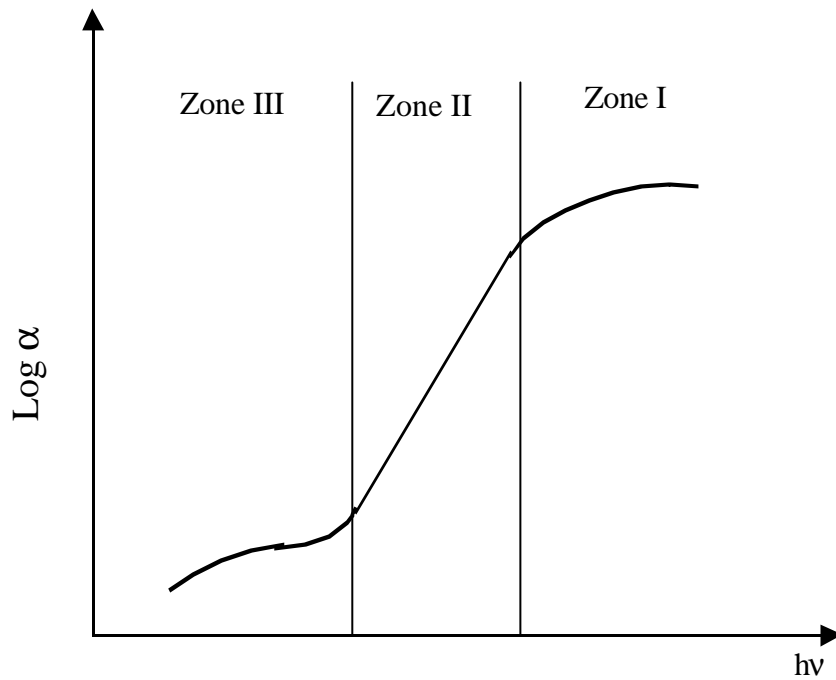


Figure B.3: Spectre d'absorption optique typique d'un échantillon de a-Si:H.

Le coefficient d'absorption dans la zone I de la forte absorption varie généralement entre 10^4 et 10^5 cm^{-1} pour un échantillon de a-Si:H. La forte absorption apparaît lorsque l'énergie de photons est supérieure à l'énergie du gap qui engendre des transitions électroniques de type T_0 entre la bande de valence et la bande de conduction (voir figure B.2). C'est l'absorption interbande. A partir de considérations de mécanique quantique et à partir de l'intégrale de convolution des densités d'états (voir équation B.10 qui sera donnée dans le § B.I.4), Tauc [15] a établi la relation suivante:

$$\sqrt{\alpha h\nu} = B(h\nu - E_0) \quad (\text{B.2})$$

où B est une constante de proportionnalité et E_0 est le gap optique qui est déterminé en extrapolant la partie linéaire de la représentation graphique de la relation de Tauc comme indiqué sur la figure B.4. Le gap optique d'un échantillon est généralement déterminé à partir de son spectre d'absorption expérimental obtenu par transmission optique en utilisant la relation (B.2). Il est à noter que sa valeur n'est pas très différente du gap de mobilité.

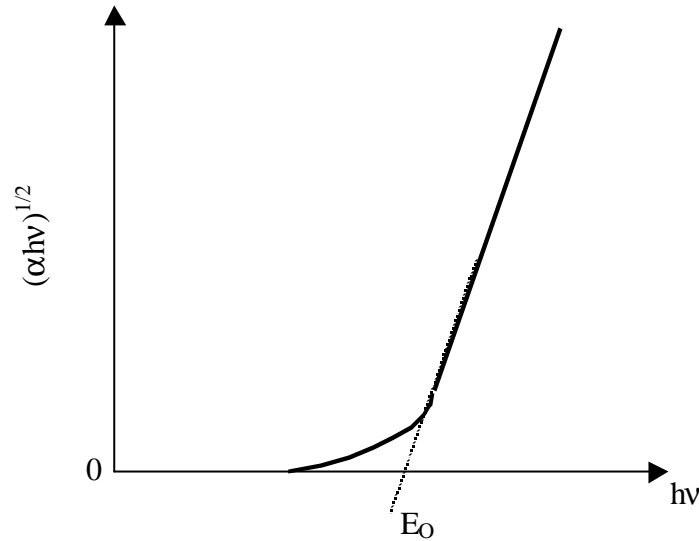


Figure B.4: Illustration de l'extraction du gap optique selon le modèle de Tauc.

La zone II décrit la partie exponentielle du spectre où l'absorption est plus faible (compris approximativement entre 10^2 et 10^4 cm^{-1}) appelée pente d'Urbach (voir figure B.3). Son origine est souvent attribuée aux transitions des électrons des états localisés de la queue de bande de valence vers les états étendus de la bande de conduction et aux transitions électroniques des états étendus de la bande de valence vers la queue de bande de conduction (transitions de type T_2 et T_3 de la figure B.2). La contribution des queues de bande est à l'origine de la variation exponentielle de cette zone de moyenne absorption. Comme la densité d'états de la queue de bande de valence est plus large que celle de la queue de bande de conduction, alors la transition mettant en jeu les états de la queue de bande de valence est donc plus probable [16]. La variation en exponentielle a été observée pour la première fois par Urbach [17] sur du bromure d'argent (AgBr). A partir des densités d'états des niveaux considérés, nous obtenons la relation suivante:

$$\alpha(h\nu) = \alpha_0 \exp\left(\frac{h\nu}{U_r}\right) \quad (\text{B.3})$$

où α_0 est une constante de proportionnalité et U_r est appelée la pente d'Urbach qui est généralement attribuée à l'énergie caractéristique kT_v de la queue de bande de valence. L'extraction de l'énergie U_r nous renseigne donc sur le désordre dans le matériau a-Si:H.

Le coefficient d'absorption optique est faible dans la gamme d'énergie qui correspond à la zone III (approximativement inférieur à 10^2 cm^{-1}). Cette partie du spectre est associée aux transitions électroniques entre les états des liaisons pendantes et les états étendus. La densité d'états profonds N_{db} , qui est un paramètre caractéristique du matériau, peut être déduite de

cette partie du spectre. Les méthodes couramment utilisées pour la détermination de la densité de défauts N_{db} à partir d'un spectre d'absorption optique expérimental reposent sur le fait qu'il y ait une proportionnalité entre N_{db} et le coefficient d'absorption optique. On cite deux méthodes:

a- La méthode d'intégration de la partie excédentaire du coefficient d'absorption:

Le calcul de N_{db} consiste en l'intégration du coefficient d'absorption dans la zone III en soustrayant le coefficient d'absorption dû à la queue de bande de valence [18]. L'expression qui permet de calculer N_{db} est la suivante:

$$N_{db} = A \int_{E_1}^{E_2} \left[\alpha(h\nu) - \alpha_0 \exp\left(\frac{h\nu}{U_r}\right) \right] dE \quad (B.4)$$

où A est une constante extraite expérimentalement, E_1 est l'énergie de photons minimale dont la valeur numérique est limitée par l'expérience et E_2 est l'énergie qui sépare la zone II de la zone III.

b- Le coefficient d'absorption à une énergie donnée :

Cette méthode, qui résulte de la précédente, a été proposée par Wyrsh [19]. Elle consiste à écrire une simple linéarité entre la densité d'états N_{db} et le coefficient d'absorption à une énergie donnée E_{ref} généralement prise égale à 1.2 eV. Son expression s'écrit comme suit:

$$N_{db} = C(E_{ref}) \times \alpha(E_{ref}) \quad (B.5)$$

où $C(E_{ref})$ est le paramètre de calibration qui a été évalué expérimentalement par la technique ESR (Electron Spin Resonance) sur des échantillons de a-Si:H et qui vaut $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ [19].

I. 4. Méthodes expérimentales de détermination du spectre d'absorption optique

Nous présentons ici les expériences les plus connues et les plus utilisées dans les laboratoires pour la détermination du coefficient d'absorption. Nous décrivons brièvement leurs principes de mesures ainsi que leurs domaines de validité.

I.4.1. Spectre d'absorption par Transmission/Réflexion

Les mesures de la transmission optique ou de la réflexion permettent de déduire quelques paramètres caractérisant le matériau étudié tels que le coefficient d'absorption [20] et l'indice de réfraction. En utilisant l'approximation de la zone de transparence on obtient une bonne appréciation du coefficient d'absorption dans le domaine de la forte absorption. Nous rappelons ci-dessous le principe de mesure de la transmission optique.

Une lumière monochromatique est envoyée sur une couche mince d'un semiconducteur déposé sur un substrat transparent (du verre par exemple). Une partie de la lumière incidente est réfléchiée aux interfaces air/semiconducteur et semiconducteur/verre, et l'autre partie de la lumière est transmise. Selon la longueur d'onde, une interférence constructive ou destructive se produit. Un exemple de spectre de transmission obtenu à l'aide d'un spectrophotomètre sur du a-Si:H est présenté dans la figure B.5

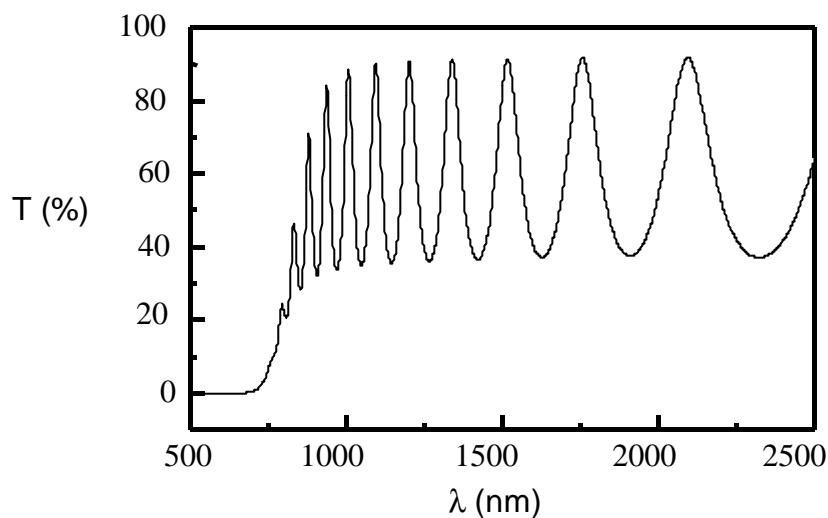


Figure B.5: Spectre typique de transmission optique obtenu sur du a-Si:H [21]

Le spectre de transmission est dépouillé sur les trois zones: la forte, la moyenne et la faible absorption pour déterminer l'indice de réfraction et le coefficient d'absorption en fonction de l'énergie de photons. Il permet aussi une bonne estimation de l'épaisseur de la couche semiconductrice étudiée. L'expression générale donnant la transmittance est la suivante:

$$T(\lambda) = \frac{A \exp(-\alpha d)}{B + 2C \exp(-\alpha d) + D \exp(-2\alpha d)} \quad (\text{B.6})$$

où α est le coefficient d'absorption optique, d est l'épaisseur de l'échantillon et A , B , C et D sont des constantes qui dépendent de l'indice de réfraction du semiconducteur et de celui du substrat.

I.4.2. Spectroscopie de déflexion photothermique (PDS)

La technique de la spectroscopie de déflexion photothermique (PDS: Photothermal Deflection Spectroscopy) [18] est basée sur l'effet photothermique qui désigne l'ensemble des phénomènes liés à la transformation en chaleur de la lumière absorbée par un matériau. Son dispositif expérimental est schématisé sur la figure B.6.

L'échantillon, plongé dans un fluide transparent, est éclairé par une lumière monochromatique d'énergie $h\nu$. L'énergie lumineuse est intégralement transformée en chaleur par un processus de désexcitation non radiatif (dans le cas du a-Si:H la luminescence est négligeable à température ambiante). Cet échauffement de l'échantillon crée un gradient de température et par conséquent un gradient de l'indice de réfraction dans le fluide environnant l'échantillon. Un faisceau laser cohérent, tangent à la surface de l'échantillon, est dévié par le gradient de l'indice de réfraction du fluide. La déflexion est alors mesurée par un détecteur photosensible. Ce dernier transforme la déflexion en un signal électrique $S(h\nu)$ proportionnel à l'énergie de la lumière incidente. Le signal obtenu nous donne directement le coefficient d'absorption à partir de la relation suivante:

$$\alpha(h\nu) = -\frac{1}{d} \text{Log} \left(1 - \frac{S(h\nu)}{S_0} \right) \quad (\text{B.7})$$

où S_0 est le signal de saturation obtenu expérimentalement et d est l'épaisseur de l'échantillon.

Cette technique, très sensible, permet la détermination directe du coefficient d'absorption sur des couches minces d'épaisseurs supérieures à 10 μm . Elle est sensible aux états de surface et de volume.

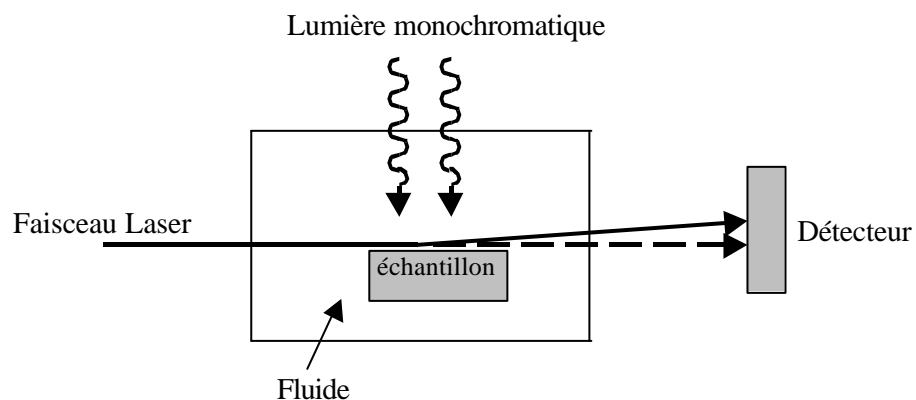


Figure B.6: Principe de mesure de la PDS.

I.4.3. Méthode du photocourant constant (CPM)

La méthode du photocourant constant (CPM: Constant Photocurrent Method) est basée sur la mesure de la réponse spectrale. Originellement, la théorie de la CPM a été développée sur du GaAs, dopé par de l'oxygène, par Griemmes et Lebdo en 1975 [22]. Ce n'est qu'en 1981 que Vanecek *et al.* [23] l'ont utilisée pour la première fois sur du a-Si:H de type n. Depuis, la CPM est aussi utilisée pour caractériser les matériaux intrinsèques et les matériaux de type p [24] et même pour des semiconducteurs organiques [25].

La méthode CPM consiste à maintenir le photocourant I_{ph} (ou la photoconductivité σ_{ph}) constant en ajustant le flux de lumière incident sur l'échantillon à chaque énergie de photons. Les hypothèses de la CPM mènent à une relation de linéarité entre le coefficient d'absorption et l'inverse du flux de lumière incidente ajusté. Cette technique mesure le coefficient d'absorption dû aux transitions qui contribuent à générer des porteurs de charge libres. Une partie de ce travail étant consacrée à la simulation de la CPM, le détail des hypothèses de cette méthode sera donné dans le chapitre B § III.1.

I.5. Formalisme de l'absorption optique

L'étude microscopique du coefficient d'absorption optique utilise la théorie des perturbations [26]. La perturbation en question est l'énergie de l'électron soumis à une onde lumineuse d'énergie $h\nu$. On sait que toute perturbation induit une transition électronique d'un état vers un autre. En tenant compte de toutes les transitions thermiques et optiques possibles entre les différents états localisés et les états étendus, on peut calculer la probabilité de transition W de l'électron d'un état occupé $|i\rangle$ d'énergie E_i vers un état inoccupé $|f\rangle$ d'énergie E_f en fonction de l'opérateur perturbation H' comme suit:

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \sum |\langle f | H' | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i \pm h\nu) \quad (\text{B.9})$$

Nous y retrouvons la fonction δ qui caractérise la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement lors de la transition optique. \hbar est la constante de Planck.

Le coefficient d'absorption dépend de la probabilité de transition et il est calculé en faisant l'intégrale du produit de convolution des densités d'états des niveaux occupés par les électrons et des densités d'états des niveaux vides. Cette intégrale est multipliée par la matrice de transition optique qui dépend de l'énergie de photons. L'expression du coefficient d'absorption optique par la méthode de convolution est donnée alors par:

$$\alpha(h\nu) = M(h\nu) \int_{-\infty}^{+\infty} N_{\text{initial}}(E) f_{\text{initial}}(E) N_{\text{final}}(E+h\nu) f_{\text{final}}(E+h\nu) dE \quad (\text{B.10})$$

où $N_{\text{initial}}(E)$ est la densité d'états initiale, $N_{\text{final}}(E+h\nu)$ est la densité d'états finale, $f_{\text{initial}}(E)$ est la fonction d'occupation des électrons de l'état initial, $f_{\text{final}}(E+h\nu)$ est celle de l'état final et $M(h\nu)$ est l'élément de matrice de transition optique qui exprime la probabilité de transition d'un état vers un autre.

L'expression de la matrice de transition est déterminée à partir du calcul en utilisant la théorie des perturbations en mécanique quantique [27]:

$$M(h\nu) = C_1 \frac{P^2(h\nu)}{h\nu} \quad (\text{B.11})$$

où C_1 est une constante qui dépend de la masse de l'électron m , de la charge électronique e , de l'indice de réfraction statique du matériau n_s , de la célérité de la lumière c et de la densité atomique ρ considérée identique à celle du silicium cristallin. La constante C_1 s'écrit:

$$C_1 = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{h^4}{(2\pi)^2 n_s m^2} \frac{1}{3\rho} \quad (\text{B.12})$$

où $\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ est la constante de structure fine.

$P^2(h\nu)$ est l'élément matriciel au carré de l'opérateur quantité de mouvement appelé élément de matrice du moment moyenné au carré. Il est relié à l'élément de matrice dipolaire moyenné au carré $R^2(h\nu)$ par:

$$P^2(h\nu) = \frac{m^2}{\hbar^4} (h\nu)^2 R^2(h\nu) \quad (\text{B.13})$$

Dans ce cas la matrice de transition $M(h\nu)$ peut s'écrire en fonction de $R^2(h\nu)$ comme suit:

$$M(h\nu) = C_0 h\nu R^2(h\nu) \quad (\text{B.14})$$

où C_0 est une constante qui s'écrit:

$$C_0 = \frac{(2\pi)^2}{n_s} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{3\rho} \quad (\text{B.15})$$

Tauc *et al.* [15] sont les premiers qui ont supposé que l'élément de matrice du moment moyenné au carré $P^2(h\nu)$ est indépendant de l'énergie de photons. Dans ce cas la matrice de transition optique est proportionnelle à l'inverse de l'énergie de photons multiplié par une constante K. La matrice de transition optique s'écrit alors:

$$M(h\nu) = \frac{K}{h\nu} \quad (\text{B.16})$$

A partir de ces considérations, Vanecek *et al.* [28] ont déduit la valeur de la constante K par la mesure du coefficient d'absorption optique sur un film mince de a-Si:H en utilisant la CPM. Ils trouvent K égale à $4.34 \cdot 10^{-38} \text{ eV}^2 \text{ cm}^5$. Néanmoins, d'après Sakata *et al.* [29], cette valeur de la constante K n'est valable que pour certains échantillons de a-Si:H déposés sous des conditions spécifiques.

Plus tard, Cody *et al.* [30] ont supposé quant à eux que c'est plutôt l'élément de matrice du dipôle moyenné au carré $R^2(h\nu)$ qui est constant. D'après la relation B.13, $P(h\nu)$ est proportionnel à l'énergie de photons. Par conséquent, la matrice de transition est aussi proportionnelle à l'énergie de photons comme cela apparaît dans l'équation B.17:

$$M(h\nu) = C h\nu \quad (\text{B.17})$$

A partir d'un calcul analytique, Hindley [31] suggère que $M(h\nu)$ présente une proportionnalité par rapport aux probabilités de transitions optiques interbande, d'états étendus vers états localisés et d'états localisés vers états étendus. Cet auteur prévoit aussi une diminution de l'amplitude de la matrice de transition pour les transitions optiques entre états localisés. Cependant, ces hypothèses n'ont pas été vérifiées.

Certains auteurs étudient la partie imaginaire de la constante diélectrique $\epsilon(h\nu)$ au lieu du coefficient d'absorption optique $\alpha(h\nu)$. Ces deux propriétés sont reliées entre elles par l'expression suivante:

$$\alpha(h\nu) = \frac{h\nu}{\hbar n_s c} \epsilon(h\nu)$$

Jackson *et al.* [32] ont déterminé la partie imaginaire de la constante diélectrique au lieu du coefficient d'absorption. Elle est reliée à $R^2(h\nu)$ par:

$$\epsilon(h\nu) = 4.3 \cdot 10^{-45} R^2(h\nu) J(h\nu) \quad (\text{B.18})$$

où $J(h\nu)$ est la densité d'états jointe et elle est égale à la somme de toutes les transitions entre les états occupés et les états vides séparés par l'énergie de photons $h\nu$.

Par leurs mesures expérimentales de l'élément de matrice dipolaire moyenné au carré $R^2(h\nu)$ sur du a-Si:H et sur du silicium cristallin, Jackson *et al.* [32] ont pu montrer que ce dernier est constant. Sur la base de mesures expérimentales, ils trouvent que $R^2(h\nu)$ est constant pour le a-Si:H avec une amplitude de 10 \AA^2 pour des énergies inférieures à 3.4 eV et que $R^2(h\nu)$ est proportionnelle à $(h\nu)^{-5}$ pour les hautes énergies comme indiqué sur la figure B.7.

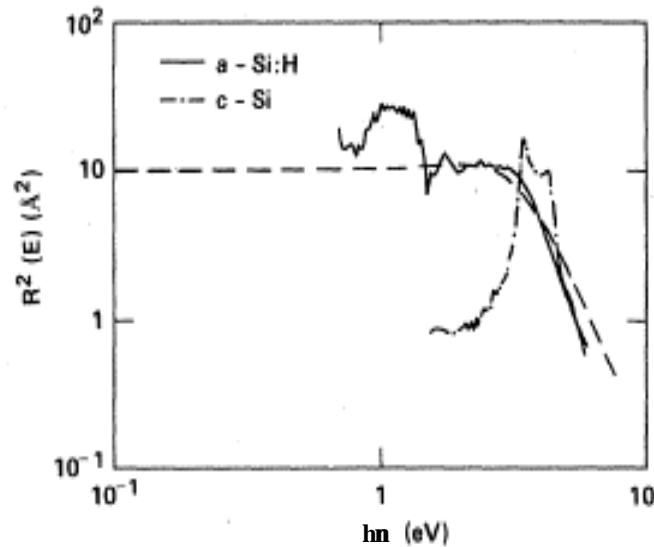


Figure B.7: Courbe en Log-Log donnant l'élément de matrice du dipôle moyenné au carré R^2 en fonction de l'énergie de photons pour le silicium cristallin (c-Si) et pour le a-Si:H [B2]

A partir des résultats de Cody *et al.* [30] et de Jackson *et al.* [32], Mettler *et al.* [33] déterminent le coefficient d'absorption optique en utilisant l'expression B.10 et les expressions B.14 et B.15 de la matrice de transition. Mettler *et al.* [33] suggèrent qu'il n'y a pas de modèle microscopique fiable pour $P^2(h\nu)$ et $R^2(h\nu)$ qui explique l'absorption optique du a-Si:H. Cependant, suite aux résultats expérimentaux obtenus par Jackson *et al.* [32], ils proposent d'utiliser l'expression de la matrice de transition qui est fonction de l'élément dipolaire moyenné au carré R^2 . Actuellement cette expression est très utilisée dans le calcul du coefficient d'absorption optique $\alpha(h\nu)$ et de la constante diélectrique $\epsilon(h\nu)$ [34-36] car elle se révèle être plus réaliste que la relation B.16. Dans le cas de notre simulation, nous utilisons les deux expressions de la matrice de transition (équation B.16 et B.17). Cependant, nous montrerons par la suite (§ D I.2) que nous avons opté pour la matrice de transition proportionnelle à l'énergie de photons.

II. Photoconductivité

Nous venons de voir dans la partie I de ce chapitre les différents processus de l'absorption optique donnant naissance à des électrons et à des trous libres. Ces porteurs de charges en excès participent à la conduction électrique. On parle alors de photoconductivité qui est l'une des caractéristiques électriques les plus étudiées dans le a-Si:H.

Dans ce qui suit, nous définissons la photoconductivité puis nous exposons les mécanismes de génération-recombinaison qui la régissent.

II.1. Formulation et définition

L'accroissement de la conductivité électrique d'un matériau sous l'effet de la lumière est appelé photoconductivité. Elle est due à un effet photoélectrique dans le volume du matériau. L'effet photoélectrique induit la création de paires électron-trous qui participent à la conduction électrique en s'ajoutant aux porteurs de charges libres existants sous obscurité. La conductivité totale s'écrit:

$$\sigma = en\mu_n + ep\mu_p \quad (\text{B.19})$$

où n et p sont les concentrations totales des électrons et des trous respectivement, e est la charge de l'électron, et μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous dans les états étendus respectivement. La conductivité sous obscurité s'écrit en fonction des concentrations des porteurs de charges libres n_0 et p_0 à l'équilibre thermodynamique:

$$\sigma_0 = en_0\mu_n + ep_0\mu_p \quad (\text{B.20})$$

En soustrayant la conductivité sous obscurité de la conductivité sous lumière, on obtient l'expression de la photoconductivité:

$$\sigma_{\text{ph}} = \sigma - \sigma_0 = e\mu_n \Delta n + e\mu_p \Delta p \quad (\text{B.21})$$

où Δn et Δp sont les concentrations excédentaires des porteurs de charges qui sont reliées aux taux nets de recombinaison U_n et U_p et aux durées de vie τ_n et τ_p des électrons et des trous respectivement par les équations suivantes:

$$U_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad \text{et} \quad U_p = \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (\text{B.22})$$

La photoconductivité peut s'écrire alors en fonction des durées de vie des porteurs et des taux de recombinaison de la manière suivante:

$$\sigma_{\text{ph}} = e\mu_n \tau_n U_n + e\mu_p \tau_p U_p \quad (\text{B.23})$$

II.2. Processus de génération-recombinaison

L'apparition d'une paire d'électron-trou due à l'application d'un flux de lumière d'énergie $h\nu$ interbande est appelée génération d'une paire électron-trou. La disparition d'électron ou de trou est désignée sous le nom de recombinaison. Dans ce qui suit, nous décrivons d'une manière succincte la statistique d'occupation dans le cas simple d'un état monovalent. Nous donnons ensuite l'expression mathématique du taux de génération dans un élément de volume quelconque lorsqu'il y a absorption de photons.

II.2.1. Recombinaison

La recombinaison des porteurs de charges peut se faire en surface ou dans le volume. Dans notre travail on s'intéresse à la recombinaison dans le volume. Il existe plusieurs mécanismes possibles de recombinaison dont principalement la recombinaison directe (bande de conduction vers bande de valence), la recombinaison indirecte (via des centres localisés dans la bande interdite) et la recombinaison Auger. Du fait de la grande largeur du gap du a-Si:H (entre 1.7 et 2 eV) la recombinaison directe est négligée. Seule la recombinaison indirecte est prise en compte car elle est beaucoup plus probable dans le a-Si:H à cause de la présence des centres de recombinaison dans le gap. Les autres types de recombinaison sont moins probables. Nous négligeons aussi les transitions entre états localisés. Nous décrivons ci-dessous la statistique élémentaire de Hall-Shockley-Read [37] qui régit la recombinaison sur un état monovalent.

Un centre monovalent est un niveau qui ne peut avoir que deux états de charge. Ce niveau introduit un seul centre de recombinaison qui peut être occupé par un électron ou vide. Le processus de recombinaison est schématisé sur la figure B.8. La statistique traduisant la recombinaison sur ces états est celle de Hall-Shockley-Read [37]. A partir de cette statistique on peut calculer le taux net de recombinaison des électrons U_n et celui des trous U_p . Ces taux de recombinaison expriment le nombre de porteurs en excès disparaissant par unité de volume et par unité de temps. U_{cn} et U_{en} sont les taux de capture et d'émission des électrons respectivement, U_{cp} et U_{ep} sont ceux des trous.

Pour le cas de la capture d'un électron par un centre d'un niveau discret d'énergie E_t , il est possible de déterminer le taux de capture par unité de temps et de volume U_{cn} . Ce dernier est proportionnel à la densité d'électrons libres n et aux centres disponibles $N_t(1-f)$ soit:

$$U_{cn} = n C_n N_t (1 - f) \quad (\text{B.24})$$

où C_n est le coefficient de capture des électrons qui dépend de la vitesse thermique et de la section efficace de capture d'un électron, N_t est la densité d'états localisés et f est la fonction d'occupation du centre.

Le taux d'émission d'un électron est donné par:

$$U_{en} = e_n N_t f \quad (\text{B.25})$$

où e_n est le coefficient d'émission d'un électron.

Pour le cas de l'émission d'un trou, ce qui en réalité correspond à la capture d'un électron de la VB par un centre vide, l'électron manquant laisse la place à un trou. Le taux d'émission des trous s'écrit alors:

$$U_{ep} = e_p N_t (1 - f) \quad (\text{B.26})$$

où e_p est le coefficient d'émission des trous.

Le dernier cas est celui de la capture d'un trou par le centre monovalent. Le taux de capture des trous s'écrit comme pour le cas de la capture d'un électron comme suit:

$$U_{cp} = p C_p N_t f \quad (\text{B.27})$$

où C_p est le coefficient de capture des trous qui dépend lui aussi de la vitesse thermique et de la section efficace de capture d'un trou.

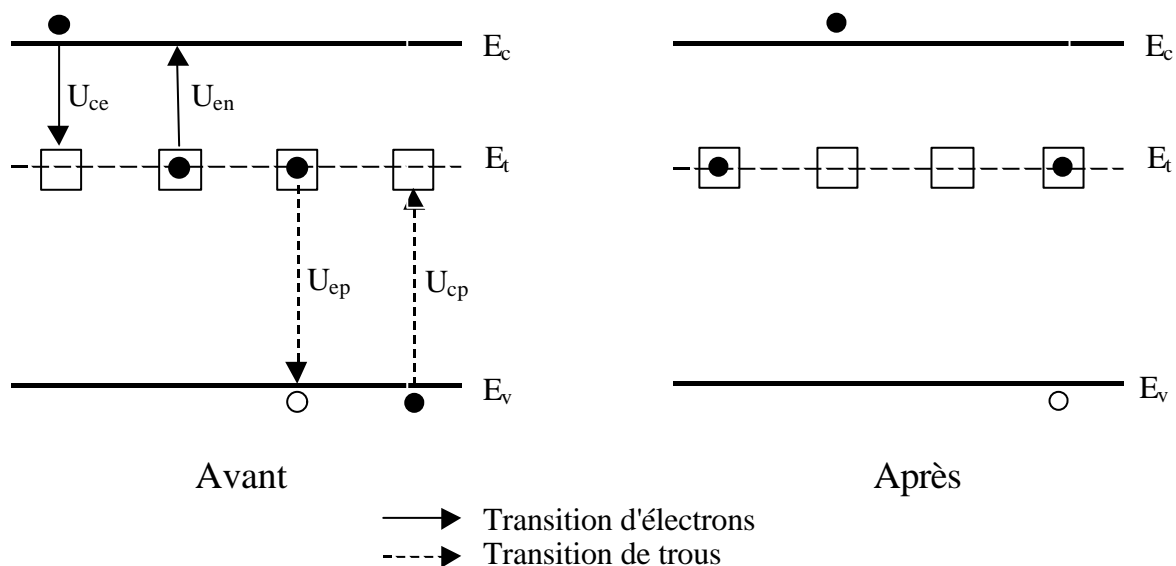


Figure B.8: Schéma représentatif des phénomènes d'émission et de capture sur un état monovalent E_t .

II.2.2. Génération optique

On désigne par le terme génération optique la création de porteurs libres lorsque le matériau est éclairé par une lumière d'énergie $h\nu$ permettant des transitions d'électron d'un état vers un autre. Le taux de génération $G(x)$ à une profondeur x exprime la vitesse de création de charges libres. Cette grandeur est proportionnelle au nombre de photons absorbés à une distance x à l'intérieur du matériau et au rendement quantique η représentant la probabilité pour qu'un photon crée un porteur libre. Le taux de génération s'écrit alors par définition en fonction du flux $\phi(x, h\nu)$, comme suit:

$$G(x, h\nu) = -\eta \frac{\partial \phi(x, h\nu)}{\partial x} \quad (\text{B.28})$$

Le flux de lumière $\phi(x, h\nu)$ étant proportionnel à son intensité, nous pouvons écrire son expression d'après la loi de Lambert-Bouguer (voir équation B.1) comme suit:

$$\phi(x, h\nu) = \phi_0 (1 - R) e^{-\alpha(h\nu)x} \quad (\text{B.29})$$

Le taux de génération s'écrit alors:

$$G(x, h\nu) = \alpha(h\nu) \eta \phi(x, h\nu) = \alpha(h\nu) \eta \phi_0 (1 - R) e^{-\alpha(h\nu)x} \quad (\text{B.30})$$

où $\alpha(h\nu)$ est le coefficient d'absorption optique, $\phi(x, h\nu)$ est le flux de lumière pénétrant à l'intérieur du matériau à une profondeur x et ϕ_0 est le flux de lumière incidente.

L'expression générale du taux de génération dans le volume peut être alors déduit à partir de l'équation précédente en effectuant l'intégration suivante:

$$G(h\nu) = \int_0^d G(x, h\nu) dx = \alpha(h\nu) \eta \phi_0 (1 - R) \left(\frac{1 - e^{-\alpha(h\nu)d}}{\alpha} \right) \quad (\text{B.31})$$

où d est l'épaisseur du matériau.

III. Méthode du photocourant constant (CPM)

Nous décrivons dans cette partie les concepts de base de la méthode du photocourant constant (CPM: Constant Photocurrent Method). Cette technique expérimentale est très utilisée pour déterminer le spectre d'absorption optique. En effet, la CPM est simple à réaliser expérimentalement comparativement à d'autres techniques. Elle permet d'accéder à quelques paramètres de la densité d'états (DOS) tels que la pente d'Urbach kT_v et la densité des liaisons pendantes N_{db} [38].

III. 1. Description

Nous développons dans cette partie les hypothèses de la CPM. Nous rappelons que cette méthode consiste à ajuster et à mesurer le flux de lumière incidente qui permet de maintenir la photoconductivité constante à chaque énergie de photons.

Les hypothèses fondamentales de la CPM sont basées sur la relation linéaire entre la photoconductivité σ_{ph} et le taux de génération optique G [23]. En effet, dans le cas d'un régime stationnaire les équations de continuité des électrons et des trous s'écrivent:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - U_n = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial p}{\partial t} = G_p - U_p = 0 \quad (\text{B.32})$$

où G_n (G_p) est le taux de génération optique des électrons (trous) et U_n (U_p) est le taux de recombinaison des électrons (trous).

On peut déduire alors que $G_n = U_n$ et $G_p = U_p$. Dans ce cas, d'après la relation (B.23), la photoconductivité s'écrit en fonction du taux de génération des électrons et des trous comme suit:

$$\sigma_{ph} = e\mu_n \tau_n G_n + e\mu_p \tau_p G_p \quad (\text{B.33})$$

Pour le cas du a-Si:H intrinsèque qui se comporte comme un matériau de type n, le produit $\mu_p \tau_p$ est supposé très petit devant $\mu_n \tau_n$. En supprimant l'indice n, l'équation (B.34) se réduit donc à:

$$\sigma_{ph} = e\mu \tau G \quad (\text{B.35})$$

Si on est dans le cas d'une faible absorption où $\alpha d \ll 1$, on peut alors appliquer l'approximation $\exp(-\alpha d) \approx (1 - \alpha d)$ à l'équation du taux de génération B.31. Par conséquent, la relation B.35 peut s'écrire pour une énergie donnée $h\nu$:

$$\sigma_{\text{ph}} = e(1 - R)(\eta\mu\tau)\phi_0 \alpha(h\nu) \quad (\text{B.36})$$

L'hypothèse de base de la CPM est de supposer le produit $(\eta\mu\tau)$ constant lorsque la photoconductivité est maintenue constante en fonction de l'énergie de photons. Pour cela, le flux de lumière incident ϕ_0 est ajusté en conséquence et il est mesuré à chaque énergie $h\nu$. On déduit donc à partir de l'expression (B.35) la relation suivante pour le coefficient d'absorption:

$$\alpha_{\text{CPM}}(h\nu) = \frac{K_{\text{CPM}}}{\phi_{\text{CPM}}(h\nu)} \quad (\text{B.37})$$

où $\phi_{\text{CPM}}(h\nu)$ est le flux nécessaire pour maintenir la photoconductivité constante et K_{CPM} est une constante qui est déterminée en calibrant le spectre relatif obtenu à l'aide d'un autre spectre généralement obtenu par la transmission optique ou par la PDS.

III. 2. Résultats antérieurs de la CPM appliquée au a-Si:H

La CPM figure parmi les méthodes de caractérisation les plus intéressantes et les plus utilisées pour la détermination du coefficient d'absorption optique sur le a-Si:H. Elle est sensible à l'absorption optique même pour des énergies de photons inférieures au gap. La figure B.9 montre un spectre d'absorption optique typique du a-Si:H mesuré par la technique CPM au sein de notre laboratoire [38]. Nous distinguons les trois gammes d'absorption optique: la forte, la moyenne et la faible absorption. La zone de forte absorption s'étale approximativement au dessus de 1.7 eV. La zone de moyenne absorption est la partie linéaire en échelle semi-logarithmique, elle s'étend entre 1.5 et 1.7 eV. La zone de faible absorption est située en dessous de 1.5 eV. Dans cette zone, nous pouvons remarquer la variation sinusoïdale du coefficient d'absorption optique. La forme sinusoïdale du spectre est attribuée aux réflexions multiples de la lumière à la surface et à l'interface comprise entre la couche de a-Si:H et le substrat [39-41].

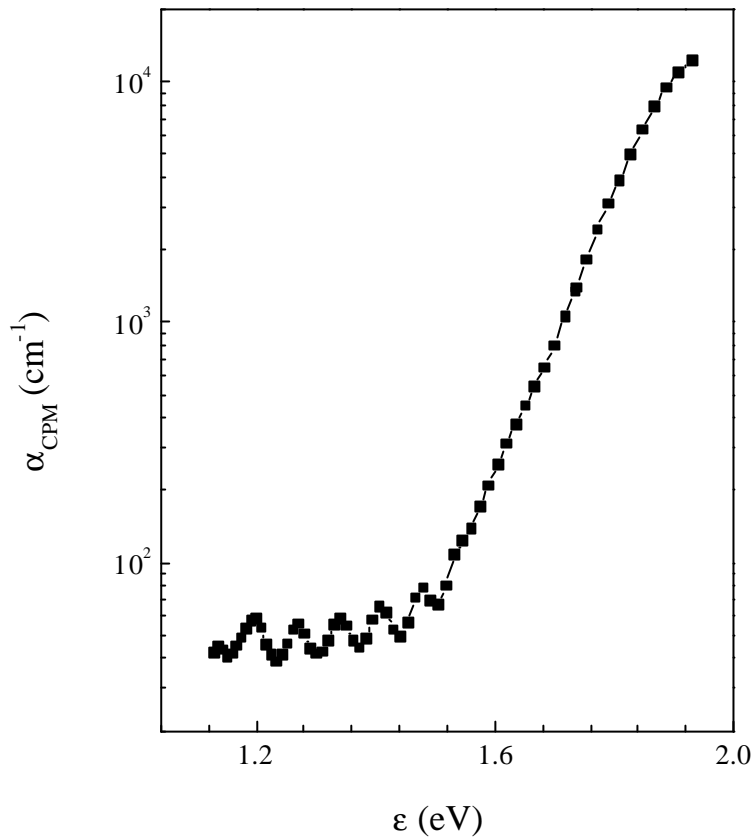


Figure B.9: Spectre du coefficient d'absorption optique obtenu par la CPM [8].

La complexité de la densité d'états du a-Si:H et l'importance de la méthode CPM ont entraîné des études théoriques et expérimentales pour interpréter le comportement du coefficient d'absorption optique. Différents modèles de calcul du coefficient d'absorption optique ont été ainsi mis en œuvre pour étudier les hypothèses et la validité de la CPM. Nous présentons dans ce qui suit une rétrospective de ces travaux.

En considérant une couche mince de a-Si:H, Hattori *et al.* [42] simulent la CPM pour déterminer le coefficient d'absorption optique. Ils se basent sur un modèle de densité d'états simple qui consiste en deux niveaux discrets corrélés par une énergie U à l'intérieur du gap situés à ϵ_s et à (ϵ_s+U) par rapport au bas de la bande de conduction. Ils supposent aussi que les taux de capture des électrons sont négligeables devant les taux de génération optique. Ils calculent séparément les coefficients d'absorption dus aux transitions des électrons et des trous libres. Le coefficient d'absorption de la CPM résulte alors de la sommation des deux spectres.

La figure B.10 représente les spectres calculés du coefficient d'absorption de la CPM pour trois positions du niveau ϵ_s . On remarque la présence d'une discontinuité dans le

coefficient d'absorption. D'après leurs résultats, Hattori *et al.* [42] attribuent l'absorption optique dans la gamme des faibles énergies à la contribution principale des trous et non à celle des électrons telle que le prédisent les autres auteurs. Nous considérons cependant que l'approche de Hattori *et al.* n'est pas réaliste. Expérimentalement, la mesure des photoconductivités dues aux électrons et aux trous libres séparément est impossible.

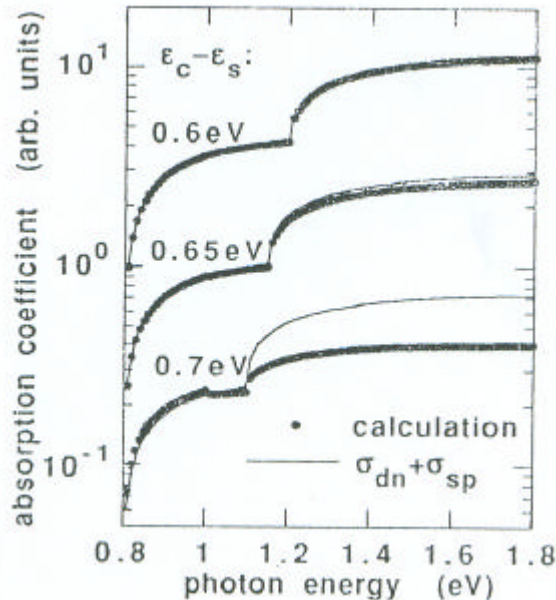


Figure B.10: Variation en énergie de photons d'un spectre CPM pour trois valeurs différentes du niveau e_s [42].

Sur la base du modèle standard de densité d'états, Platz *et al.* [43] présentent une simulation de la CPM et du coefficient d'absorption optique par la méthode de convolution. Ils maintiennent le taux de génération optique total constant pour chaque énergie de photons dans la simulation de la CPM. Ils remarquent une légère sous-estimation du spectre d'absorption obtenu par la CPM par rapport à celui calculé par la méthode de convolution. Dans la simulation de la CPM, ils déterminent la variation de la durée de vie des électrons qui s'écrit $\tau_n = \Delta n / G_n$ en fonction de l'énergie de photons. Ils remarquent que τ_n augmente dans la gamme d'énergie entre 1.1 et 1.4 eV. Ils expliquent ceci par le fait que les transitions optiques qui mettent en jeu les trous libres engendrent une importante augmentation de la durée de vie sur les états localisés. En dépit de cette observation, ils affirment que la variation de la durée de vie n'entrave pas la détermination du coefficient d'absorption par la simulation de la CPM. Les résultats de Platz *et al.* [43] ne sont que partiellement basés sur un modèle d'expérience de la CPM puisque l'expérience réelle consiste en le maintien de la photoconductivité et non pas du taux de génération optique. Ce qui explique l'insuffisance de leurs hypothèses.

Schmidt et Rubinelli [44] ont présenté des résultats expérimentaux et théoriques du coefficient d'absorption optique pour le a-Si:H obtenu par la CPM. Ils ont pris en compte toutes les transitions électroniques et optiques possibles pour le calcul du coefficient d'absorption par la méthode de convolution. Ils ont simulé et ont fait des mesures du coefficient d'absorption par la technique CPM sur des échantillons de a-Si:H non dopés en configuration coplanaire. Le spectre d'absorption qu'ils obtiennent par la CPM est inférieur au spectre d'absorption calculé par la méthode de convolution pour des énergies de photons comprises entre 0.8 et 1.3 eV. Selon ces auteurs, la contribution de l'absorption due aux électrons qui proviennent de la bande de valence n'est pas négligeable dans le coefficient d'absorption total pour des énergies de photons inférieures à 1.2 eV. Ils concluent que la CPM ne détecte pas l'absorption optique due aux trous.

En comparant les différents spectres d'absorption obtenus par différentes techniques sur du a-Si:H dopé et non dopé, Mettler *et al.* [33] ont étudié les limites de la CPM. Ils trouvent que la détermination du spectre d'absorption par la CPM se fait si deux conditions sont vérifiées. Il est souvent observé expérimentalement que la photoconductivité σ_{ph} varie en fonction de la génération totale G et s'écrit $\sigma_{ph} \propto G^\gamma$ d'après le modèle de Rose où γ est une constante appelée facteur de Rose. Ils généralisent cette dépendance à la conductivité totale sous lumière σ_{TOT} , avec un exposant γ^* , qui s'écrit $\sigma_{TOT} \propto G^{\gamma^*}$.

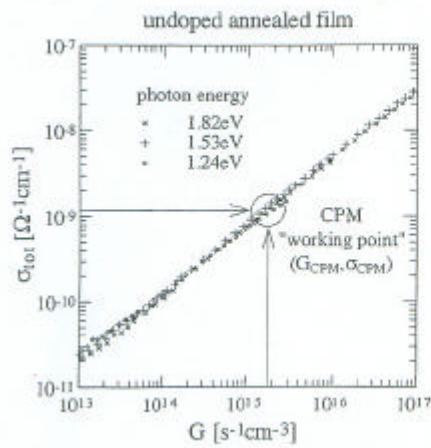
Dans le cas de l'hypothèse $\alpha d \ll 1$ de la CPM, on a $G = \phi_0 \alpha$, nous pouvons déduire que $\sigma_{ph} \propto (\phi_0 \alpha)^\gamma$ et $\sigma_{TOT} \propto (\phi_0 \alpha)^{\gamma^*}$.

Ainsi, Mettler *et al.* [33] proposent de valider la CPM en vérifiant les conditions suivantes pour chaque énergie $h\nu$:

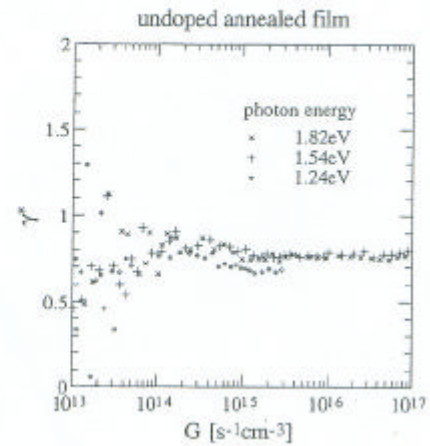
- a) Les exposants de la photoconductivité γ et γ^* doivent être indépendants de l'énergie de photons.
- b) Le taux de génération G doit lui aussi être indépendant de l'énergie de photons.

Ces deux conditions sont appelées points de fonctionnement. Ils se définissent comme étant les points correspondant à la valeur numérique de la photoconductivité que l'on maintient constante lors de l'expérience de la CPM. En effet, sur la courbe donnant $\text{Log } \sigma_{ph}$ en fonction de $\text{Log } G$ de la figure B.11.a, ils déterminent le G_{CPM} qui correspond à la valeur de σ_{CPM} , et à partir de G_{CPM} , ils déduisent ainsi le facteur de la photoconductivité γ_{CPM} qui représentent les points de fonctionnement.

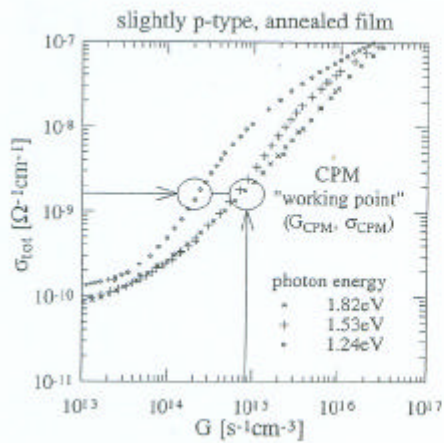
Nous rapportons les résultats expérimentaux de ces auteurs concernant la conductivité totale σ_{TOT} en fonction de la génération optique G sur du a-Si:H intrinsèque et sur du a-Si:H légèrement dopé p pour différentes valeurs d'énergie de photons.



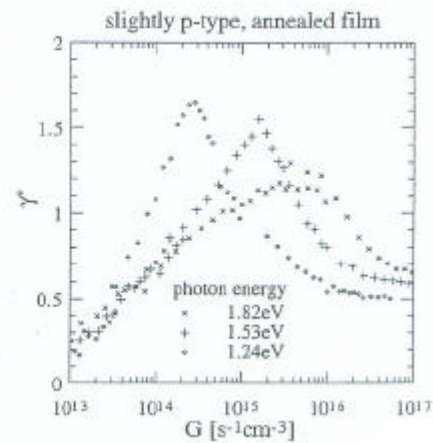
Figures B.11.a: Variation de la conductivité en fonction du taux de génération pour trois valeurs d'énergie de photons pour le a-Si:H intrinsèque.



Figures B.11.b: Variation de l'exposant de la photoconductivité en fonction du taux de génération pour trois valeurs d'énergie de photons pour le a-Si:H intrinsèque.



Figures B.12.a: Variation de la conductivité en fonction du taux de génération pour trois valeurs d'énergie de photons pour le a-Si:H dopé p.



Figures B.12.b: Variation de l'exposant de la photoconductivité en fonction du taux de génération pour trois valeurs d'énergie de photons pour le a-Si:H dopé p.

On remarque sur les figures B.11.a et B.11.b concernant le a-Si:H intrinsèque que les deux conditions sont vérifiées. Sur les figures B.12.a et B.12.b concernant le a-Si:H dopé p on remarque que les points de fonctionnement varient en fonction de l'énergie de photons, donc les deux conditions de la CPM ne sont pas vérifiées.

Nous venons de voir qu'il y a eu plusieurs tentatives d'explication du comportement du spectre d'absorption optique obtenu par la CPM. L'étude des hypothèses et du domaine de validité de la CPM reste encore ouverte à une large discussion, et a besoin de plus de

clarification. L'interprétation du spectre d'absorption optique obtenu, particulièrement dans la gamme de la faible absorption, reste encore fort controversée.

Dans le cas de notre simulation, nous proposons d'utiliser le modèle standard de densité d'états du a-Si:H et d'utiliser les paramètres microscopiques d'un matériau de bonne qualité optoélectronique. Pour l'étude de la méthode CPM, nous étudions le comportement de quelques grandeurs qui sont inaccessibles expérimentalement tel que les densités de charge des états localisés et leurs taux de génération et de recombinaison. Le but de notre travail n'est pas de lisser une quelconque courbe expérimentale du coefficient d'absorption optique mais d'étudier les hypothèses de la CPM et de vérifier ses conditions de validité.

IV. Photoconductivité à double faisceau (DBP)

Nous avons défini précédemment la réponse spectrale d'un semiconducteur comme étant la variation en énergie de photons de la photoconductivité. Nous savons que la longueur d'onde et le flux d'une lumière influent sur le comportement de la photoconductivité de façon que la photoconductivité augmente lorsque l'énergie ou le flux de lumière augmente. Il a été montré que dans le cas d'un éclairage simultané par deux lumières de longueurs d'onde différentes d'un semiconducteur cristallin, la photoconductivité subit une diminution appelée quenching optique. Cette méthode, appelée la photoconductivité à double faisceau, mettant en évidence le quenching optique est présentée dans cette partie du chapitre. Nous présentons aussi le quenching optique de la photoconductivité ainsi que le modèle conceptuel de Rose qui donne une explication de ce comportement dans les matériaux cristallins.

IV. 1. Description

La méthode de la photoconductivité à double faisceau (DBP: Dual Beam of Photoconductivity) a été très utilisée dans les matériaux cristallins présentant des états localisés discrets particuliers dans le gap [45]. En effet, cette technique nous renseigne sur la position en énergie de ces états localisés. La méthode du DBP, basée sur la mesure de la photoconductivité en fonction de l'énergie de photons, consiste à envoyer deux lumières d'intensités constantes issues de deux sources différentes. Un faisceau, dit primaire, est envoyé avec un flux ϕ_0 et une énergie de photons fixe supérieure au gap. L'autre faisceau, dit secondaire, est envoyé avec un flux ϕ tel que $\phi \ll \phi_0$ et une énergie de photons dans la gamme située entre le proche infrarouge et l'ultraviolet.

On rencontre dans la littérature la technique de la photoconductivité à double faisceau modulé (DBMP: Dual Beam modulated of Photoconductivity) qui est une superposition de deux faisceaux, le premier continu et le second modulé [46,47]. Il est à noter que les deux

techniques DBP et DBMP sont totalement différentes. L'utilisation d'un faisceau modulé permet de mesurer les petites variations d'un signal telle que la diminution de la photoconductivité. Ainsi, nous n'avons pas encore rencontré de travaux expérimentaux ou de simulations effectués sur un matériau amorphe utilisant le DBP. Les travaux de la DBP réalisés sur les semiconducteurs cristallins, ont mis en évidence la diminution de la photoconductivité en fonction de l'augmentation de l'énergie de photons appelée quenching optique.

IV. 2. Le quenching optique

Les mesures de la photoconductivité en fonction de l'énergie de photons par la méthode du DBP sur des matériaux cristallins généralement dopés n montrent la présence d'un quenching optique [48]. Le quenching optique est la diminution de la photoconductivité en fonction de l'énergie de photons $h\nu$ de la lumière secondaire. Il est généralement observé dans la gamme infrarouge.

Dans ses travaux sur des matériaux cristallins ayant des niveaux donneurs dans le gap, Bube [48] montre que grâce à l'étude du quenching optique ou thermique, la position des niveaux d'imperfections dans un matériau peut être déterminée. Plus précisément, l'énergie seuil du quenching optique correspond approximativement à la position d'un niveau d'imperfection par rapport au sommet de la bande de valence. Afin d'expliquer le quenching optique, Bube considère ce niveau doublement chargé. La transition induisant le quenching est due à l'électron qui passe de la bande de valence vers le niveau doublement chargé. Un trou est ainsi libéré dans la bande de valence et piégé par la suite sur un niveau monovalent. Un électron libre de la bande de conduction est alors capturé par le niveau monovalent.

Le quenching optique de la photoconductivité sur du a-Si:H a été observé par Persans et Fritzsche [47] en utilisant la DBMP. Plusieurs processus de recombinaisons ont été isolés en variant la longueur d'onde et la fréquence du faisceau secondaire. Cette mesure s'effectue pendant que l'échantillon est éclairé avec un faisceau primaire. Pour $T < 200$ K, ils observent un quenching aux basses énergies au voisinage de 0.6 eV. Pour $T > 250$ K, différents processus du quenching se produisent au seuil de 0.9 eV. Pour $200 < T < 250$ K, une nouvelle position du signal est observée. Les résultats du quenching optique sont interprétés par l'excitation optique des électrons de la bande de valence vers les centres de recombinaison qui ont de faibles coefficients de capture.

IV. 3. Modèle de Rose de la photoconductivité

A partir d'observations expérimentales montrant les variations de la photoconductivité en fonction du taux de génération optique, Rose [49] propose dans son modèle une relation de proportionnalité entre ces deux derniers comme suit:

$$\sigma_{\text{ph}} \propto G^\gamma \quad (\text{B.38})$$

où γ est appelé le facteur de Rose ou exposant de la photoconductivité. Sa valeur varie généralement entre 0.5 et 1. Il arrive que γ dépasse l'unité, on parle alors de supralinéarité de la photoconductivité.

Afin d'expliquer les différentes variations de la photoconductivité en fonction de la température ou de l'énergie de photons, Rose [49] propose un modèle conceptuel basé sur l'existence d'une distribution arbitraire de niveaux à l'intérieur du gap. Ce modèle a été utilisé par plusieurs auteurs [50] pour expliquer certains comportements de la photoconductivité, notamment la diminution de la photoconductivité lorsque la température augmente appelée "quenching thermique" ou pour expliquer le quenching optique. Dans ce cas, Rose considère dans son modèle un photoconducteur ayant deux groupes de niveaux à l'intérieur du gap qui se classent en deux types de centres: classe (I) et classe (II), différenciés par leurs sections de captures. La section de capture des électrons est la même que celle des trous sur un niveau de classe (I) se trouvant à une énergie E_1 par rapport à la bande de valence. En revanche, la section de capture des trous est nettement supérieure à celle des électrons sur un niveau de classe (II) se trouvant à une énergie E_2 par rapport à la bande de valence.

Dans le cas où le photoconducteur est éclairé, les quasi-niveaux de Fermi E_{Fn} et E_{Fp} se déplacent avec le flux de lumière et peuvent avoir des positions diverses par rapport à E_1 et E_2 . Lorsque les niveaux E_1 et E_2 se trouvent entre E_{Fn} et E_{Fp} , les niveaux de classe (I) et de classe (II) se comportent alors comme des centres de recombinaison. Par contre si ces deux niveaux se situent en dessous de E_{Fp} ou au dessus de E_{Fn} , ils se comportent alors comme des centres pièges. Un centre piège à électron se définit comme étant un niveau qui a une plus grande probabilité de libérer un électron capturé que de capturer un trou. Le mécanisme inverse caractérise un centre de recombinaison. En réalité, les centres de recombinaison et les centres pièges sont séparés par des niveaux dits niveaux de démarcation D_n et D_p qui ont été définis par Simmons et Taylor [51] comme étant des niveaux pour lesquels la probabilité d'émission d'un électron est égale à la probabilité de capture d'un électron (pour le niveau D_n). Une définition similaire pour le cas des trous est donnée pour le niveau D_p . Les niveaux D_n et D_p ont par définition des positions proches des quasi-niveaux de Fermi respectifs. On peut donc utiliser ces derniers pour distinguer les centres pièges des centres de recombinaison. Rose propose deux cas de figure pour les positions des niveaux E_1 et E_2 .

Dans le premier cas, le niveau de classe (I) est au dessus de E_{Fp} et en dessous de E_{Fn} : $E_{Fp} < E_1 < E_{Fn}$. Le niveau de classe (II) est en dessous de E_{Fp} : $E_2 < E_{Fp}$ (Figure B.13). Dans ce cas seul le niveau de classe (I) participe à la recombinaison.

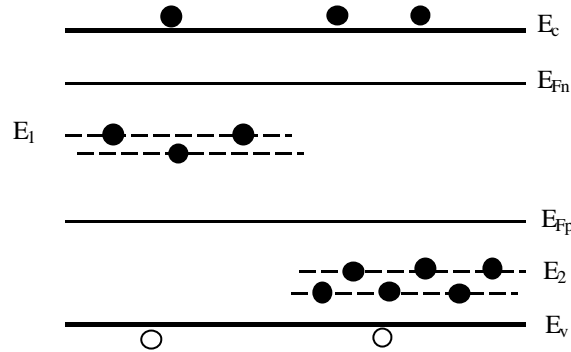


Figure B.13: Cas où le photoconducteur est éclairé par un faible flux de lumière
On représente les électrons par ● et les trous par ○.

Dans le second cas, lorsque l'énergie de photons ou la température augmente de sorte à avoir la situation suivante: $E_{Fp} < E_2 < E_1 < E_{Fn}$ (Figure B.14), le niveau de classe (II) se convertit de centre piège en centre de recombinaison. Le déplacement de E_{Fp} en dessous de E_2 est appelé sensibilisation de la photoconductivité (sensitization of photoconductivity). Ce phénomène conduit à une valeur supérieure à l'unité pour le facteur de Rose γ qui correspond à la supralinéarité de la photoconductivité.

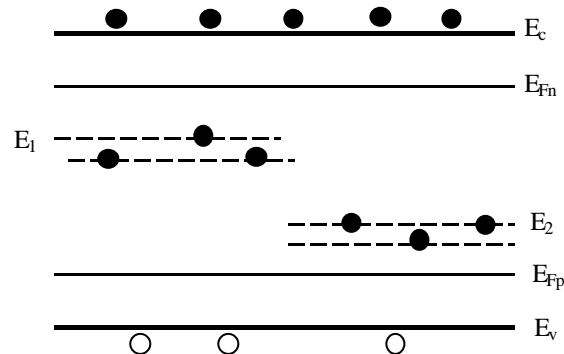


Figure B.14: Cas où le photoconducteur est éclairé par un fort flux de lumière.

Ainsi, sur la base de son modèle présenté ci-dessus, Rose suggère que le phénomène du quenching thermique survient du transfert des trous des niveaux de classe (II) vers les niveaux de classe (I) après la sensibilisation du photoconducteur. Rose prévoit que la photoconductivité résultant d'une excitation lumineuse dans le visible peut être considérablement réduite en ajoutant une autre lumière située dans le domaine infrarouge: c'est le quenching optique. Il s'explique de la même manière que le quenching thermique (Figure B.15). En effet, si l'énergie de la lumière infrarouge correspond à l'énergie séparant un niveau de classe (II) de la bande de valence, il y aura alors capture d'électrons par ce niveau de classe (II). Des trous seront donc libérés dans la bande de valence vont être capturés par un niveau de classe (I). La capture d'électrons libres par le niveau de classe (I) va donc augmenter, et leur concentration dans la bande de conduction diminue [52].

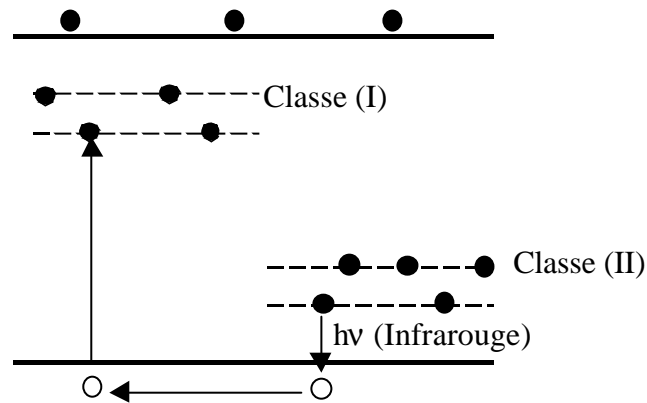


Figure B.15: Illustration du transfert des trous d'un niveau de classe (II) vers un niveau de classe (I).

Bien que le modèle de Rose présenté ci-dessus donne une explication du quenching thermique et optique de la photoconductivité, il n'est pas adapté pour le cas du a-Si:H à cause de la complexité de la distribution des états localisés dans le gap.

Dans le cadre de notre travail nous verrons par la suite, pour le cas du a-Si:H, les variations de la photoconductivité en fonction de la température, de l'énergie de photons et du taux de génération. Nous étudierons aussi les singularités obtenues ainsi que les variations de l'exposant de la photoconductivité en fonction du taux de génération.

CHAPITRE C

Modélisation et simulation numérique

La mesure de la photoconductivité permet d'accéder directement à quelques propriétés des semiconducteurs dont l'absorption optique. En effet, il existe, dans le cas des matériaux cristallins, une dépendance linéaire entre le coefficient d'absorption optique et la photoconductivité. Dans le cas des matériaux amorphes, cette linéarité disparaît du fait de l'existence d'états localisés dans le gap. Cependant, on peut indirectement déterminer le coefficient d'absorption à partir de la technique CPM qui est basée sur la photoconductivité.

Nous développons dans ce chapitre les étapes que nous avons suivies dans notre simulation numérique. Notre travail est basé sur le modèle standard de densité d'état (DOS: Density Of States) (voir § A.II.5) en prenant soin de vérifier les conditions de raccordement entre les bandes d'états étendus et leurs queues de bandes respectives. Nous présentons ensuite les équations permettant le calcul des concentrations n et p à l'équilibre et hors équilibre thermodynamique. Ces concentrations sont nécessaires pour le calcul des taux de recombinaison, de génération optique et des fonctions d'occupation sur les différents états localisés. Puis nous donnons l'algorithme et la méthode numérique du calcul de n et p et les paramètres de la DOS du a-Si:H utilisés. A partir de ces mêmes équations, nous adaptons l'algorithme du calcul de n et p au calcul de la CPM et de la photoconductivité à double faisceau (DBP: Dual Beam of Photoconductivity). Nous développons ainsi la méthode de calcul utilisée pour simuler la CPM et la DBP.

I. Description du modèle de densité d'états utilisé

Avant de donner le formalisme de calcul, nous décrivons d'abord en détail le modèle standard de densité d'états utilisé dans notre simulation.

Dans ce modèle, nous distinguons les états étendus de la bande de conduction (CB: conduction band) et les états étendus de la bande de valence (VB: valence band) qui se prolongent en deux queues de bandes exponentielles à l'intérieur du gap. Ceci en tenant compte de la continuité entre les états étendus des bandes et les queues de bande, ainsi que de la continuité de leurs dérivées comme nous le verrons dans le § C.II.4. Nous considérons aussi dans ce modèle des états profonds en forme de deux gaussiennes au milieu du gap dus aux liaisons pendantes (voir figure C.1).

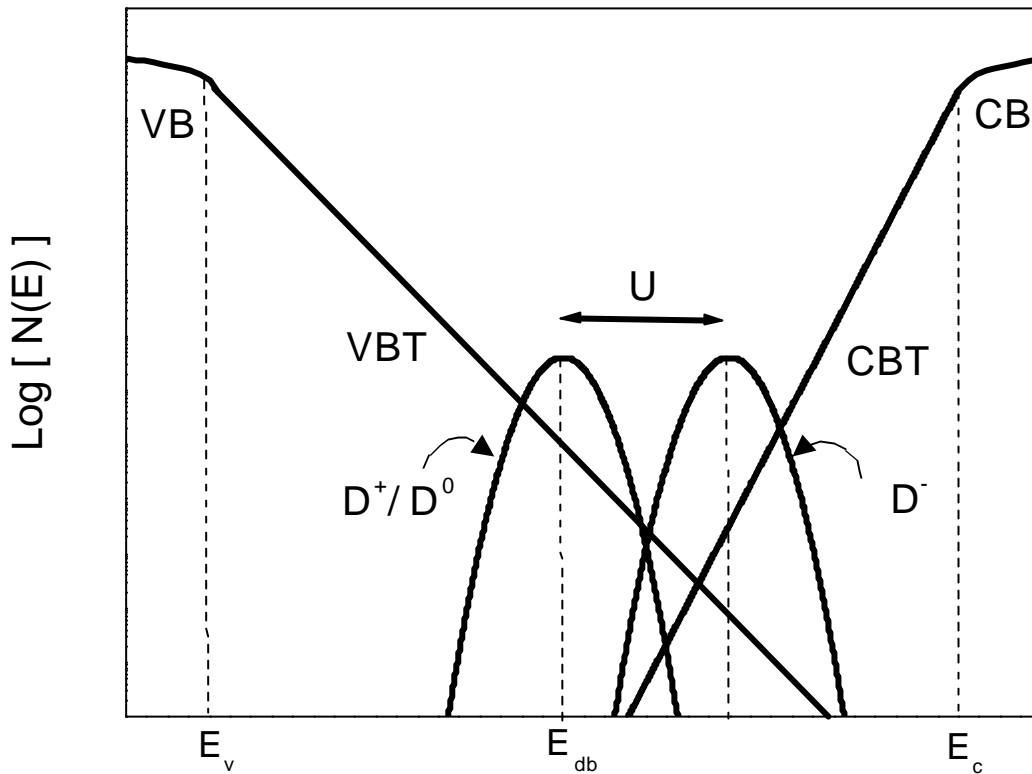


Figure C.1: Modèle standard de densité d'états pour le *a-Si:H* utilisé dans notre calcul.

Nous donnons dans ce qui suit les hypothèses et les équations correspondant à ce modèle de densité d'états.

I.1. Etats des queues de bandes

Les densités d'états des queues de bandes sont prises comme des décroissances exponentielles à l'intérieur du gap. Nous considérons la queue de bande de conduction (CBT: conduction band tail) et la queue de bande de valence (VBT: valence band tail) comme étant chacune une série de centres monovalents auxquels nous appliquons la statistique de Simmons et Taylor [51] que nous développerons par la suite dans le § C.II.2. Leurs expressions sont données pour la CBT et la VBT respectivement par:

$$N_{ct}(E) = N_{ct}^0 \exp\left(\frac{E - E_c}{kT_c}\right) \quad (C.1)$$

$$N_{vt}(E) = N_{vt}^0 \exp\left(\frac{E_v - E}{kT_v}\right) \quad (C.2)$$

où T_c et T_v sont les températures caractéristiques de la CBT et de la VBT respectivement, k est la constante de Boltzmann et N_{ct}^0 et N_{vt}^0 sont les densités effectives de la CBT et de la VBT respectivement.

I.2. Etats des liaisons pendantes

En raison de la complexité de la structure amorphe, particulièrement celle du a-Si:H, la distribution des états corrélés des liaisons pendantes (DB: dangling bonds) reste encore très controversée. En effet, plusieurs modèles de distribution de la densité d'états sont attribués aux liaisons pendantes dans le but d'expliquer par exemple les différents comportements expérimentaux de la photoconductivité observés [53]. Par exemple, l'hypothèse simplifiée de deux états discrets corrélés est utilisée pour expliquer le comportement de quelques propriétés du a-Si:H notamment la photoconductivité en fonction de la température [11,54,55]. La considération d'un élargissement de ces deux états discrets en forme de gaussiennes s'avère nécessaire pour obtenir des résultats réalistes comme dans notre calcul du coefficient d'absorption optique. En effet, nous testerons dans notre simulation dans un premier temps l'effet de ces deux niveaux des liaisons pendantes discrets sur le calcul du coefficient d'absorption optique. Ensuite, nous considérerons un élargissement de ces niveaux qui prendrons une distribution en forme de gaussiennes. L'utilisation de la distribution en gaussienne donne des résultats plus cohérents. La justification détaillée de ce choix sera donnée dans le chapitre suivant. Les expressions des densités d'états des deux gaussiennes peuvent s'écrire de la manière suivante:

$$D^{+/0}: \quad N_{DB1}(E) = \frac{N_{db}}{w\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(E - E_{db})^2}{2w^2}\right) \quad (C.3)$$

$$D^-: \quad N_{DB2}(E) = \frac{N_{db}}{w\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(E - E_{db} - U)^2}{2w^2}\right) \quad (C.4)$$

où N_{db} est la densité totale des liaisons pendantes et w est la déviation standard. Cette dernière représente la demi-largeur à mi-hauteur de chacune des gaussiennes. Les niveaux énergétiques constituant les gaussiennes sont corrélés deux à deux avec l'énergie de corrélation U dite de Hubbard. Cette dernière résulte de la somme d'un terme positif de répulsion coulombienne et d'un terme négatif dû aux diverses interactions avec le réseau. Il est communément admis dans le cas du a-Si:H que U soit positive.

I.3. Etats étendus des bandes

Nous appliquons l'hypothèse des densités d'états paraboliques des bandes des semiconducteurs cristallins aux états étendus du a-Si:H. On rappelle que les expressions des densités d'états étendus de la CB et de la VB calculées dans le cas d'un semiconducteur cristallin sont données respectivement par:

$$N_c(E) = A_c \sqrt{E - E_{c0}} \quad (C.5)$$

$$N_v(E) = A_v \sqrt{E_{v0} - E} \quad (C.6)$$

où E_{c0} et E_{v0} sont les positions énergétiques des bords de bande de conduction et de valence. $E_{g0} = E_{c0} - E_{v0}$ définit la largeur du gap optique dans le cas de notre matériau. A_c et A_v sont des constantes qui s'écrivent en fonction des masses effectives des électrons et des trous comme suit:

$$A_c = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{et} \quad A_v = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2} \right)^{3/2} \quad (C.7)$$

où m_n^* et m_p^* sont les masses effectives des électrons et des trous respectivement et h est la constante de Planck.

Nous montrerons dans ce qui suit comment nous écrivons les expressions des densités d'états étendus dans les bandes, CB et VB, en fonction de E_c et E_v qui délimitent le gap de mobilité dans le a-Si:H.

I.4. Continuité entre les densités d'états étendus des bandes et les états des queues de bandes

Nous adoptons les expressions des densités d'états étendus des bandes, établies pour le cas d'un cristal, en fonction de E_c et E_v dits points de raccordement. Ces points délimitent le gap de mobilité (voir figure C.2). Nous imposons ainsi simultanément la continuité de la densité d'états entre chaque bande et sa queue de bande, ainsi que celle de leurs dérivées, en E_c et E_v [57,58]. On parle alors de conditions de raccordement. En effet, les expressions (C.5) et (C.6) des densités d'états sont calculées dans le cas d'un matériau cristallin et sont donc fonctions de l'énergie du gap d'un cristal. La continuité entre la CB et la CBT et celle entre la VB et la VBT se traduisent par les conditions suivantes:

$$\left\{ \begin{array}{l} N_c(E_c) = N_{ct}(E_c) \\ \left. \frac{dN_c(E)}{dE} \right|_{E_c} = \left. \frac{dN_{ct}(E)}{dE} \right|_{E_c} \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} N_v(E_v) = N_{vt}(E_v) \\ \left. \frac{dN_v(E)}{dE} \right|_{E_v} = \left. \frac{dN_{vt}(E)}{dE} \right|_{E_v} \end{array} \right. \quad (\text{C.8})$$

Nous obtenons ainsi les expressions de E_{c0} et E_{v0} vérifiant les conditions précédentes :

$$E_{c0} = E_c - \frac{kT_c}{2} \quad \text{et} \quad E_{v0} = E_v + \frac{kT_v}{2} \quad (\text{C.9})$$

Nous pouvons donc déduire les expressions que doivent vérifier N_{ct}^0 et N_{vt}^0 :

$$N_{ct}^0 = A_c \sqrt{\frac{kT_c}{2}} \quad \text{et} \quad N_{vt}^0 = A_v \sqrt{\frac{kT_v}{2}} \quad (\text{C.10})$$

A_c et A_v sont données par les équations (C.7).

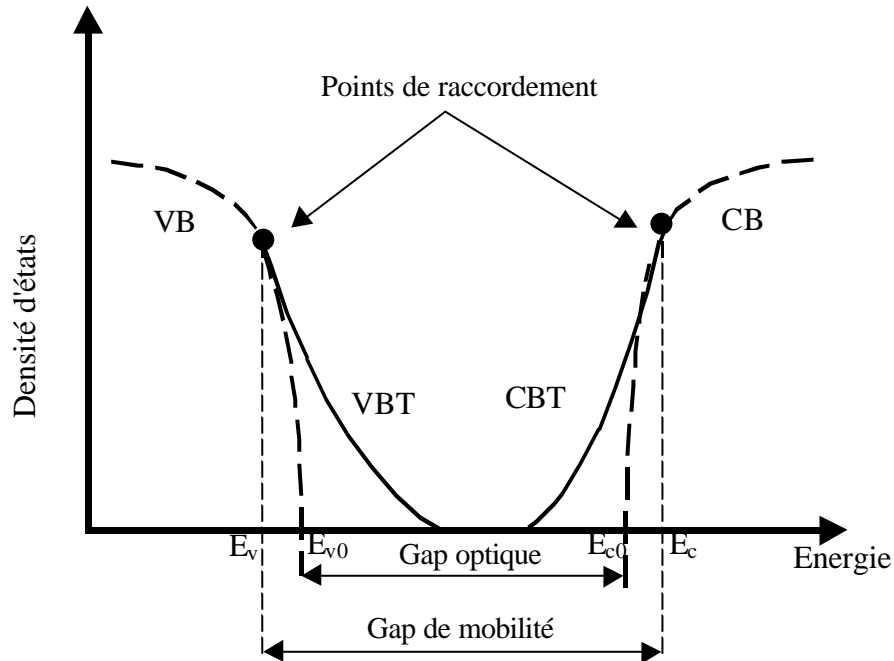


Figure C.2: Schéma représentant les points de raccordement entre chaque bande d'états étendus et sa queue de bande.

II. Calcul des concentrations des porteurs libres

La procédure du calcul des concentrations des porteurs de charge libres n et p à l'équilibre et hors équilibre thermodynamique est présentée. Dans le cas de notre simulation, nous considérons l'équilibre thermodynamique lorsque le matériau est sous obscurité et le hors équilibre lorsque qu'il est sous 'éclairage'. Nous utilisons l'équation de neutralité pour le calcul des concentrations des charges libres à l'équilibre thermodynamique. Pour le cas hors

équilibre thermodynamique, c'est l'équation de continuité des électrons et l'équation de neutralité que nous utilisons pour le calcul de n et p par unité de volume. Dans tout ce qui suit, l'indice "0" représentera l'obscurité. Il sera ainsi question de calculer les probabilités d'occupation, à l'équilibre et hors équilibre thermodynamique, sur tous les états qui composent notre modèle de densité d'états (DOS) du a-Si:H et de calculer les taux de recombinaison et de génération optique. On admet que ces vitesses de recombinaison et de génération sont uniformes dans tout le matériau.

II.1. Equilibre thermodynamique

L'équation de neutralité, qui découle de l'équation de Poisson, nous permet de calculer le niveau de Fermi E_{F0} à l'équilibre thermodynamique afin de remonter aux concentrations des porteurs de charges libres n_0 et p_0 . En l'absence d'un champ électrique interne, l'équation de neutralité permet au calcul de converger vers la solution recherchée en imposant la neutralité électrique dans le matériau étudié. L'équation de neutralité est la suivante:

$$n_0 - p_0 + Q_{ct0} - Q_{vt0} + Q_{db0}^- - Q_{db0}^+ = 0 \quad (\text{C.11})$$

Cette équation fait intervenir toutes les charges présentes dans le matériau. Leurs concentrations sont explicitées dans ce qui suit.

Dans le cas de notre modèle de densité d'états du a-Si:H, nous appliquons, à l'équilibre thermodynamique, la statistique de Fermi-Dirac sur les états étendus des bandes. Sous obscurité, la probabilité d'occupation d'un électron sur les états de la CB est donnée en fonction du niveau de Fermi E_{F0} comme suit:

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F0}}{kT}\right)} \quad (\text{C.12})$$

Les concentrations des porteurs de charges libres à l'équilibre thermodynamique sont données alors par:

$$n_0 = N_c^0 \exp\left(\frac{E_{F0} - E_c}{kT}\right) \quad \text{et} \quad p_0 = N_v^0 \exp\left(\frac{E_v - E_{F0}}{kT}\right)$$

où N_c^0 et N_v^0 sont les densités d'états équivalentes aux bords de la bande interdite qui s'écrivent:

$$N_c^0 = 2 \left(\frac{2 \pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{et} \quad N_v^0 = 2 \left(\frac{2 \pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

La statistique de Fermi-Dirac est adaptée pour calculer la probabilité d'occupation des électrons et des trous sur un état monovalent à l'équilibre thermodynamique. La probabilité de trouver un électron sur un niveau E de l'une des queues de bande s'écrit à l'aide de la fonction de Fermi-Dirac.

Les densités de charge des électrons Q_{ct0} et des trous Q_{vt0} sur les états de la CBT et la VBT respectivement sont données alors par:

$$Q_{ct0} = \int_{E_v}^{E_c} N_{ct}(E) f_0(E) dE \quad \text{et} \quad Q_{vt0} = \int_{E_v}^{E_c} N_{vt}(E) [1 - f_0(E)] dE$$

On a vu dans la partie I.3 de ce chapitre que les niveaux profonds dans le gap dus aux liaisons pendantes possèdent trois états de charge différents: D^+ , D^0 et D^- . Dans ce cas, ni la statistique de Fermi-Dirac, ni celle de Hall-Shockley-Read [37] ne s'appliquent pour ces états. A l'équilibre thermodynamique, la répartition des charges sur ces états peut être décrite par la statistique de l'ensemble grand canonique. En tenant compte de la dégénérescence de chaque état, la fonction de partition a été utilisée pour ce système pour déterminer l'expression des fonctions d'occupation $f_0^+(E)$, $f_0^0(E)$ et $f_0^-(E)$. Ces fonctions d'occupation expriment les probabilités de trouver les liaisons pendantes dans l'état D^+ , D^0 et D^- respectivement. Les expressions des fonctions d'occupation sont les suivantes [11]:

$$\left\{ \begin{array}{l} f_0^+(E) = \frac{1}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_{F0} - E}{kT}\right) + \exp\left(\frac{2(E_{F0} - E) - U}{kT}\right)} \\ f_0^0(E) = 2 f_0^+(E) \exp\left(\frac{E_{F0} - E}{kT}\right) \\ f_0^-(E) = f_0^+(E) \exp\left(\frac{2(E_{F0} - E) - U}{kT}\right) \end{array} \right. \quad (C.13)$$

Les densités des liaisons pendantes Q_{db0}^- et Q_{db0}^+ dans l'état de charge D^- et D^+ respectivement s'écrivent alors de la manière suivante:

$$Q_{db0}^- = \int_{E_v}^{E_c} N_{DBI}(E) f_0^-(E) dE \quad \text{et} \quad Q_{db0}^+ = \int_{E_v}^{E_c} N_{DBI}(E) f_0^+(E) dE$$

La méthode itérative de Newton convient au calcul des concentrations n_0 et p_0 pour une température donnée et ne fait intervenir que des dérivées partielles du premier ordre.

II.2. Hors équilibre thermodynamique / Régime stationnaire

Lorsqu'on éclaire uniformément un échantillon, un régime permanent s'établit. Le niveau de Fermi calculé à l'équilibre thermodynamique se dédouble en deux quasi-niveaux de Fermi: un pour les électrons (E_{Fn}) et un pour les trous (E_{Fp}). Dans ce cas, nous avons besoin d'un système de deux équations pour calculer les quasi-niveaux de Fermi E_{Fn} et E_{Fp} afin de remonter aux concentrations des charges libres n et p hors équilibre thermodynamique. Nous développerons dans ce qui suit la procédure du calcul de n et p , des taux d'émission et de capture sur les différents états localisés, des taux de génération optique et des fonctions d'occupation sur les états étendus, sur les queues de bande et sur les états des liaisons pendantes.

II.2.1. Système d'équations utilisé

Les équations de continuité des électrons et des trous s'écrivent de la manière suivante:

$$\frac{dn}{dt} = G_n - U_n = 0 \quad (\text{C.14})$$

$$\frac{dp}{dt} = G_p - U_p = 0 \quad (\text{C.15})$$

où G_n est le taux de génération optique d'électrons dans la CB et G_p est le taux de génération optique de trous dans la VB.

Les équations de continuité des électrons et des trous conduisent ainsi à une même équation: c'est l'équation de génération-recombinaison. Il est donc nécessaire d'utiliser une autre équation pour le calcul en régime stationnaire. L'équation de neutralité convient pour cela, puisque la neutralité dans le matériau doit être vérifiée à chaque énergie de photons et à chaque température. Nous prenons en compte toutes les concentrations de charge dans le matériau (libres et fixes), ainsi que toutes les transitions thermiques et optiques entre les différents états localisés et les états étendus (voir figures C.3 et C.4) et de la génération interbande G_0 (VB vers CB). L'équation de neutralité et l'équation de génération-recombinaison s'écrivent donc comme suit:

$$G_0 + G_1 + G_3 + G_5 + G_7 + U_1 - U_2 + U_5 - U_6 + U_{11} - U_{12} + U_{15} - U_9 = 0 \quad (\text{C.16})$$

$$n - p + Q_{ct} - Q_{vt} + Q_{db}^- - Q_{db}^+ = 0 \quad (\text{C.17})$$

où les G_i ($i = 0,1,\dots,8$) sont les différentes composantes du taux de génération et les U_i ($i = 1,2,\dots,16$) sont les vitesses de recombinaison (voir figures C.3 et C.4). Q_{ct} (Q_{vt}) est la

densité de charge des électrons (trous) sur les états de la CBT (VBT) et Q_{db}^- (Q_{db}^+) est la densité des liaisons pendantes dans l'état de charge D^- (D^+). Les expressions de ces densités seront explicitées par la suite.

II.2.2. Cinétique des échanges

Afin de résoudre le système d'équations (C.16) et (C.17), nous donnons les échanges électroniques et optiques entre les différents états localisés et ceux des bandes étendues (voir figures C.3 et C.4). Nous pouvons donc écrire les équations qui régissent la cinétique des échanges sur chaque état localisé. Pour traduire mathématiquement ces processus de recombinaison, nous allons utiliser des modèles de statistique qui correspondent à chaque type de niveau dans le gap. Dans le cas du a-Si:H tous les processus de recombinaison sont négligés, en dehors de la recombinaison indirecte. Ceci nous permet de calculer la fonction d'occupation des électrons et celle des trous hors équilibre thermodynamique sur les états monovalents des queues de bandes et sur les états corrélés des liaisons pendantes.

La statistique pour un niveau d'un seul type de centre de recombinaison dans un semiconducteur cristallin a été développée par Hall, Shockley et Read (HSR) [37]. Cette statistique a été étendue pour le cas d'une distribution continue d'états monovalents par Simmons et Taylor [51]. Cette approche convient parfaitement pour la distribution exponentielle des densités des queues de bande du a-Si:H. Toutes les transitions qui font intervenir un état E_i monovalent des queues (CBT et VBT) et les états étendus des deux bandes sont pris en compte dans nos équations.

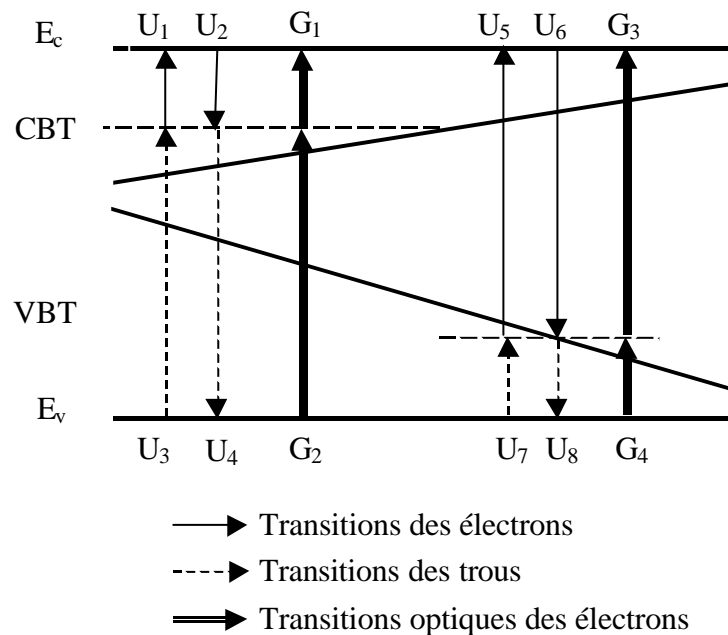


Figure C.3: Représentation de toutes les transitions thermiques et optiques possibles entre les queues de bandes et les états étendus.

Les expressions des différents U_i traduisant les taux d'émission et de capture des électrons et des trous sur un niveau E , de la CBT et de la VBT, sont données d'après la statistique de HSR [37] dans le tableau 1 suivant:

Tableau 1: Expressions des taux d'émission et capture thermique sur les états des queues de bandes.

	Notation	Sens	Vitesse de recombinaison
Transitions entre la CBT et les états étendus	U_1	émission d'un électron	$e_n^{ct}(E) f_n^{ct}(E) N_{ct}(E)$
	U_2	capture d'un électron	$n C_n^{ct} [1 - f_n^{ct}(E)] N_{ct}(E)$
	U_3	capture d'un trou	$p C_p^{ct} f_n^{ct}(E) N_{ct}(E)$
	U_4	émission d'un trou	$e_p^{ct}(E) [1 - f_n^{ct}(E)] N_{ct}(E)$
Transitions entre la VBT et les états étendus	U_5	émission d'un électron	$e_n^{vt}(E) f_n^{vt}(E) N_{vt}(E)$
	U_6	capture d'un électron	$n C_n^{vt} [1 - f_n^{vt}(E)] N_{vt}(E)$
	U_7	capture d'un trou	$p C_p^{vt} f_n^{vt}(E) N_{vt}(E)$
	U_8	émission d'un trou	$e_p^{vt}(E) [1 - f_n^{vt}(E)] N_{vt}(E)$

- ◆ e_n^x et e_p^x sont les coefficients d'émission des électrons et des trous respectivement.
- ◆ C_n^x et C_p^x sont les coefficients de capture des électrons et des trous respectivement.
- ◆ $f_n^x(E)$ représente la fonction d'occupation des électrons.
- ◆ $N_x(E)$ est la densité d'état de la queue de bande x .

L'exposant $x \equiv ct$ ou vt traduit la queue de bande de conduction (CBT) ou la queue de bande de valence (VBT) respectivement.

Nous rappelons les expressions des coefficients d'émission des électrons et des trous qui s'écrivent respectivement en fonction des coefficients de capture:

$$e_n^x(E) = C_n^x n_i \exp\left(\frac{E - E_i}{kT}\right)$$

$$e_p^x(E) = C_p^x n_i \exp\left(\frac{E_i - E}{kT}\right)$$

où n_i est la concentration intrinsèque de charges et E_i le milieu de la bande interdite.

Pour le cas des liaisons pendantes qui présentent des états doublement chargés, il est nécessaire de procéder autrement étudier la recombinaison sur ces états. Okamoto *et al.* [11] utilisent un calcul proche de celui de HSR [37]: ils supposent qu'on peut appliquer la recombinaison de HSR sur chacun des niveaux qui composent les états D^+ , D^0 et D^- des liaisons pendantes et que la concentration des liaisons pendantes est suffisamment faible pour négliger les transitions entre états localisés. Ils écrivent donc la cinétique des échanges sur chaque niveau composant les états des liaisons pendantes (voir tableau 2).

Nous donnons sur la figure C.4 le schéma de toutes les transitions électroniques et optiques possibles entre un état E des liaisons pendantes et les états étendus.

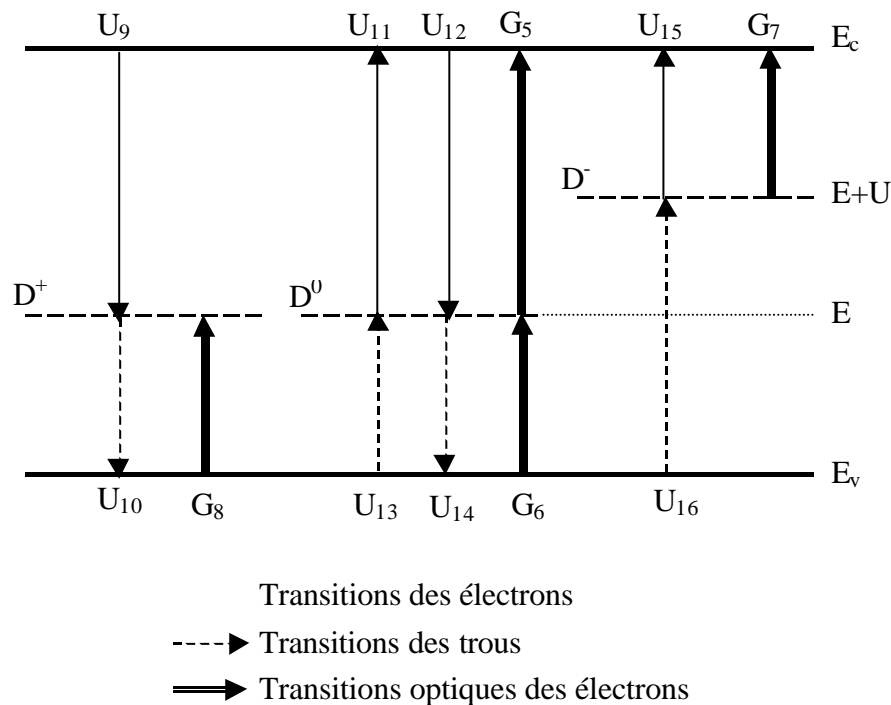


Figure C.4: Représentation de toutes les transitions thermiques et optiques possibles entre un état E des liaisons pendantes et les états étendus des bandes.

Tableau 2: Expressions des taux d'émission et capture thermique sur les états des liaisons pendantes.

Notation	Transition	Sens	Vitesse de recombinaison
U_9	$D^+ + e \rightarrow D^0$	Capture d'un électron de la CB par D^+	$n C_n^+ f^+(E) N_{DBI}(E)$
U_{10}	$D^+ \rightarrow D^0 + t$	Emission d'un trou de D^+ vers la VB	$e_p^+(E) f^+(E) N_{DBI}(E)$
U_{11}	$D^0 \rightarrow D^+ + e$	Emission d'un électron de D^0 vers la CB	$e_n^0(E) f^0(E) N_{DBI}(E)$
U_{12}	$D^0 + e \rightarrow D^-$	Capture d'un électron de la CB par D^0	$n C_n^0 f^0(E) N_{DBI}(E)$
U_{13}	$D^0 + t \rightarrow D^+$	Capture d'un trou de la VB par D^0	$p C_p^0 f^0(E) N_{DBI}(E)$
U_{14}	$D^0 \rightarrow D^- + t$	Emission d'un trou de D^0 vers la VB	$e_p^0(E) f^0(E) N_{DBI}(E)$
U_{15}	$D^- \rightarrow D^0 + e$	Emission d'un électron de D^- vers la CB	$e_n^-(E) f^-(E) N_{DBI}(E)$
U_{16}	$D^- + t \rightarrow D^0$	Capture d'un trou de la VB par D^-	$p C_p^- f^-(E) N_{DBI}(E)$

- ◆ e_n^j et e_p^j sont les coefficients d'émission des électrons et des trous respectivement. L'indice j fait référence aux états D^+ , D^0 et D^- ($j: +,0,-$).
- ◆ C_n^j et C_p^j sont les coefficients de capture des électrons et des trous respectivement.
- ◆ f^j représente la fonction d'occupation sur les états des liaisons pendantes.
- ◆ N_{db} est la concentration totale des liaisons pendantes.

Chaque état de charge de la liaison pendante est en équilibre thermodynamique avec les états étendus. Nous pouvons alors déterminer les coefficients d'émission en fonction des taux d'occupation et en fonction des coefficients de capture en appliquant le principe du bilan détaillé [55] : $U_9 = U_{11}$, $U_{12} = U_{15}$, $U_{10} = U_{13}$, $U_{14} = U_{16}$ (voir figure C.4). On obtient alors :

$$e_n^0(E) = n_0 \frac{f_0^+(E)}{f_0^0(E)} C_n^+ \qquad e_n^-(E) = n_0 \frac{f_0^0(E)}{f_0^-(E)} C_n^0$$

$$e_p^0(E) = p_0 \frac{f_0^-(E)}{f_0^0(E)} C_p^- \qquad e_p^+(E) = p_0 \frac{f_0^0(E)}{f_0^+(E)} C_p^0$$

II.2.3. Génération et absorption optiques

Suivant les hypothèses de notre calcul, c'est à dire pour une absorption uniforme de la lumière par une couche mince de a-Si:H et en l'absence d'un champ électrique interne, nous déterminons les taux de génération optique par unité de volume. Dans le cas où l'approximation $\alpha d \ll 1$ est valable, nous rappelons l'expression du taux de génération en fonction du flux de lumière et celle du coefficient d'absorption optique que nous avons données dans le § B.II.2.2:

$$G(h\nu) = \phi_0 \alpha(h\nu)$$

A partir de cette relation, nous pouvons calculer les composantes G_i du taux de génération optique qui s'écrivent en fonction des composantes du coefficient d'absorption optique de la manière suivante:

$$G_i(h\nu) = \phi_0 \alpha_i(h\nu)$$

Sur la base de notre modèle de densité d'états, nous énumérons toutes les transitions optiques possibles entre les différents états localisés et les états étendus de la CB et de la VB (voir les figures C.3 et C.4). Une transition optique n'a lieu que si l'énergie de photons $h\nu$ correspond au moins à la différence énergétique entre un état localisé et un état de la CB ou de la VB. L'énergie $h\nu$ ainsi absorbée permettra à l'électron de passer d'un niveau initial E vers un autre niveau final ($E+h\nu$). Le coefficient d'absorption optique total est calculé en intégrant le produit de convolution des densités d'états des niveaux occupés par les électrons et des densités d'états des niveaux vides. Cette intégrale est multipliée par l'élément de matrice de transition optique $M(h\nu)$ qui dépend de l'énergie de photons de la transition optique considérée. Ce terme exprime la probabilité de transition d'un état vers un autre. Nous rappelons l'expression du coefficient d'absorption pour une énergie de photons $h\nu$ donnée:

$$\alpha(h\nu) = M(h\nu) \int_{-\infty}^{+\infty} N_{\text{initial}}(E) f_{\text{initial}}(E) N_{\text{final}}(E+h\nu) f_{\text{final}}(E+h\nu) dE \quad (\text{C.18})$$

où $N_{\text{initial}}(E)$ est la densité d'états initiaux à l'énergie E et $N_{\text{final}}(E+h\nu)$ est la densité d'états finaux séparés de l'énergie $h\nu$ des états initiaux. $f_{\text{initial}}(E)$ et $f_{\text{final}}(E+h\nu)$ sont les fonctions d'occupation des états initiaux et finaux respectivement. Les fonctions d'occupation nécessaires au calcul de α sont déduites en faisant le bilan des vitesses de recombinaison sur chaque état localisé dont le détail du calcul sera donné dans le § C.III.2.4. Toutes les équations que nous établissons sont indépendantes du choix de l'expression de la matrice de transition. Notre choix de la matrice de transition et sa justification seront donnés dans le chapitre suivant qui concerne les résultats.

Les expressions des différents G_i , traduisant les taux de génération d'électrons à partir de la CBT et de la VBT vers les états étendus, sont données comme suit (voir figure C.3):

$$G_1(h\nu) = \phi_0 M(h\nu) \int_{E_v}^{E_c} N_{ct}(E) f_n^{ct}(E) N_c(E + h\nu) [1 - f_c(E + h\nu)] dE$$

$$G_2(h\nu) = \phi_0 M(h\nu) \int_{E_v}^{E_c} N_v(E - h\nu) [1 - f_v(E - h\nu)] N_{ct}(E) [1 - f_n^{ct}(E)] dE$$

$$G_3(h\nu) = \phi_0 M(h\nu) \int_{E_v}^{E_c} N_{vt}(E) f_n^{vt}(E) N_c(E + h\nu) [1 - f_c(E + h\nu)] dE$$

$$G_4(h\nu) = \phi_0 M(h\nu) \int_{E_v}^{E_c} N_v(E - h\nu) [1 - f_v(E - h\nu)] N_{vt}(E) [1 - f_n^{vt}(E)] dE$$

Nous donnons ci-dessous les expressions des taux de génération optique, dus aux transitions à partir des états des liaisons pendantes, comme pour le cas des queues de bande (voir figure C.4):

$$G_5(h\nu) = \phi_0 M(h\nu) \int_{E_v}^{E_c} N_{DBI}(E) f^0(E) N_c(E + h\nu) [1 - f_c(E + h\nu)] dE$$

$$G_6(h\nu) = \phi_0 M(h\nu) \int_{E_v}^{E_c} N_v(E - h\nu) [1 - f_v(E - h\nu)] N_{DBI}(E) f^0(E) dE$$

$$G_7(h\nu) = \phi_0 M(h\nu) \int_{E_v}^{E_c} N_{DBI}(E) f^-(E) N_c(E + h\nu + U) [1 - f_c(E + h\nu + U)] dE$$

$$G_8(h\nu) = \phi_0 M(h\nu) \int_{E_v}^{E_c} N_v(E - h\nu) [1 - f_v(E - h\nu)] N_{DBI}(E) f^+(E) dE$$

Dans le calcul des taux de génération optique à partir des états localisés, les bornes d'intégrale de l'équation sont réduites à E_v et E_c qui délimitent le gap de mobilité.

Pour le cas de l'absorption induisant la transition optique interbande G_0 , l'énergie de photons $h\nu$ doit être supérieure ou égale à l'énergie du gap. Son expression est la suivante:

$$G_0(h\nu) = \phi_0 M(h\nu) \int_{-\infty}^{E_v} N_v(E) [1 - f_v(E)] N_c(E + h\nu) [1 - f_c(E + h\nu)] dE$$

L'état initial de la transition interbande se trouvant à une énergie E de la bande de valence, les bornes d'intégration s'écriront cette fois de $-\infty$ à E_v . Contrairement à certains auteurs qui considèrent que la fonction d'occupation des électrons dans la VB et celle des places vacantes

dans la CB sont égales à un, nous tenons compte dans notre calcul de ces probabilités d'occupation.

Les différents termes G_i ainsi établis vont nous permettre de calculer les concentrations des charges libres n et p à une énergie $h\nu$ donnée. Ceci par la résolution du système d'équations formé de l'équation de continuité des électrons et de l'équation de neutralité donné précédemment (équations C.16 et C.17). Ce qui nous permettra par la suite de calculer tous les termes qui dépendent des concentrations n et p et de calculer ainsi les différentes composantes du coefficient d'absorption optique $\alpha_i(h\nu)$. Il suffit alors de sommer ces dernières pour avoir le coefficient d'absorption optique total à une énergie $h\nu$ comme suit:

$$\alpha(h\nu) = \sum_{i=0}^8 \alpha_i(h\nu)$$

En faisant varier l'énergie de photons $h\nu$, nous obtenons le spectre d'absorption optique total $\alpha(h\nu)$ par la méthode de convolution ainsi que ses composantes $\alpha_i(h\nu)$. Nous verrons dans le chapitre suivant que les $\alpha_i(h\nu)$ nous permettront de voir la contribution des différents états localisés dans l'absorption optique.

II.2.4. Calcul des fonctions d'occupation

Nous établissons dans cette partie les expressions des fonctions d'occupation des états étendus des bandes ainsi que celles des états localisés dans le cas hors équilibre thermodynamique. La statistique de Fermi-Dirac reste valable pour les états étendus des bandes. Pour le cas des états localisés, nous montrerons que les différents termes des taux de recombinaison et des taux de génération optique établis précédemment nous permettent de calculer les fonctions d'occupation.

II.4.2.a. Fonctions d'occupation sur les états étendus

Lorsque le matériau est éclairé, on est dans le cas hors équilibre. Les fonctions d'occupation des charges libres dans les états étendus s'écrivent alors en fonction des quasi-niveaux de Fermi, E_{Fn} et E_{Fp} , des électrons et des trous respectivement. Leurs expressions sont les suivantes:

$$f_c(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{Fn}}{kT}\right)} \quad (C.20)$$

$$f_v(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{Fp} - E}{kT}\right)} \quad (\text{C.21})$$

où $f_c(E)$ ($f_v(E)$) représente la probabilité pour qu'il y ait des électrons (des trous) dans la bande de conduction (bande de valence). T est la température.

Contrairement au cas de l'équilibre thermodynamique, la statistique de Fermi-Dirac ne s'applique plus pour les états des queues de bande. Nous développons ci-dessous la méthode calcul des fonctions d'occupation sur les états des queues de bande et sur les états des liaisons pendantes.

II.4.2.b. Fonctions d'occupation sur les queues de bande

Les expressions des fonctions d'occupation des queues de bande sont alors déterminées en faisant le bilan des transitions thermiques et optiques.

Les équations cinétiques en régime stationnaire, qui régissent la concentration des électrons sur la CBT et sur la VBT, s'écrivent respectivement:

$$\frac{d[N_{ct}(E)f_n^{ct}(E)]}{dt} = U_2 - U_1 + U_4 - U_3 + G_2 - G_1 = 0 \quad (\text{C.22})$$

$$\frac{d[N_{vt}(E)f_n^{vt}(E)]}{dt} = U_6 - U_5 - U_7 + U_8 + G_4 - G_3 = 0 \quad (\text{C.23})$$

En utilisant chacune des équations (C.22) et (C.23), nous obtenons les taux d'occupations des électrons sur un niveau E des queues de bandes:

$$f_n^x(E) = \frac{e_p^x(E) + n C_n^x + \phi_0 M(h\nu) N_v(E - h\nu)}{e_n^x(E) + e_p^x(E) + n C_n^x + p C_p^x + \phi_0 M(h\nu) [N_v(E - h\nu) + N_c(E + h\nu)]} \quad (\text{C.24})$$

Ceci nous permet de calculer les densités de charge totale sur les queues de bande:

$$Q_{ct} = \int_{E_v}^{E_c} N_{ct}(E) f_n^{ct}(E) dE \quad (\text{C.25})$$

$$Q_{vt} = \int_{E_v}^{E_c} N_{vt}(E) [1 - f_n^{vt}(E)] dE \quad (\text{C.26})$$

où Q_{ct} est la densité de charge totale des électrons sur la queue de bande de conduction et Q_{vt} est la densité de charge totale des trous sur la queue de bande de valence.

II.4.2.c. Fonctions d'occupation sur les liaisons pendantes

Comme rapporté précédemment, les états énergétiques des liaisons pendantes se présentent comme deux gaussiennes. Les niveaux des deux gaussiennes sont corrélés deux à deux par l'énergie de corrélation U à l'intérieur du gap. Nous considérons un niveau discret pour les états des liaisons pendantes pour écrire le bilan des échanges entre ce niveau et les états étendus. En se basant sur les résultats de Okamoto *et al.* [11], nous calculons les fonctions d'occupation en rajoutant aux équations cinétiques, en régime stationnaire, les transitions optiques [44]. Les équations donnant la cinétique des échanges sur les états D^+ , D^- et D^0 respectivement sont (voir figure C.3):

$$\frac{d(Q_{db}^+(E))}{dt} = U_{11} + U_{13} - U_9 - U_{10} + G_5 - G_8 = 0 \quad (C.27)$$

$$\frac{d(Q_{db}^-(E))}{dt} = U_{12} + U_{14} - U_{15} - U_{16} + G_6 - G_7 = 0 \quad (C.28)$$

$$f^+(E) + f^-(E) + f^0(E) = 1 \quad (C.29)$$

En manipulant ces trois équations nous obtenons les expressions suivantes des fonctions d'occupation:

$$f^0(E) = \frac{CC1 \times CC3}{CC} \quad (C.30)$$

$$f^+(E) = \frac{CC2 \times CC3}{CC} \quad (C.31)$$

$$f^-(E) = \frac{CC1 \times CC4}{CC} \quad (C.32)$$

avec

$$CC1 = nC_n^+ + e_p^+(E) + \phi_0 M(h\nu) N_v (E - h\nu) [1 - f_v(E - h\nu)]$$

$$CC2 = e_n^0(E) + pC_p^0 + \phi_0 M(h\nu) N_c (E + h\nu) [1 - f_c(E + h\nu)]$$

$$CC3 = pC_p^- + e_n^-(E) + \phi_0 M(h\nu) N_c (E + U + h\nu) [1 - f_c(E + U + h\nu)]$$

$$CC4 = e_p^0(E) + nC_n^0 + \phi_0 M(h\nu) N_v (E - h\nu) [1 - f_v(E - h\nu)]$$

$$CC = CC1 \times CC3 + CC2 \times CC3 + CC1 \times CC4$$

Nous reportons sur la figure C.5 les variations des fonctions d'occupation des états D^+ , D^0 et D^- sous éclairage. Nous pouvons donc écrire les expressions de leurs densités de charge respectivement:

$$Q_{db}^+ = \int_{E_v}^{E_c} f^+(E) N_{DBI}(E) dE \quad (C.33)$$

$$Q_{db}^0 = \int_{E_v}^{E_c} f^0(E) N_{DBI}(E) dE \quad (C.34)$$

$$Q_{db}^- = \int_{E_v}^{E_c} f^-(E) N_{DBI}(E) dE \quad (C.35)$$

La somme de ces densités de charges nous donne la concentration totale des liaisons pendantes N_{db} .

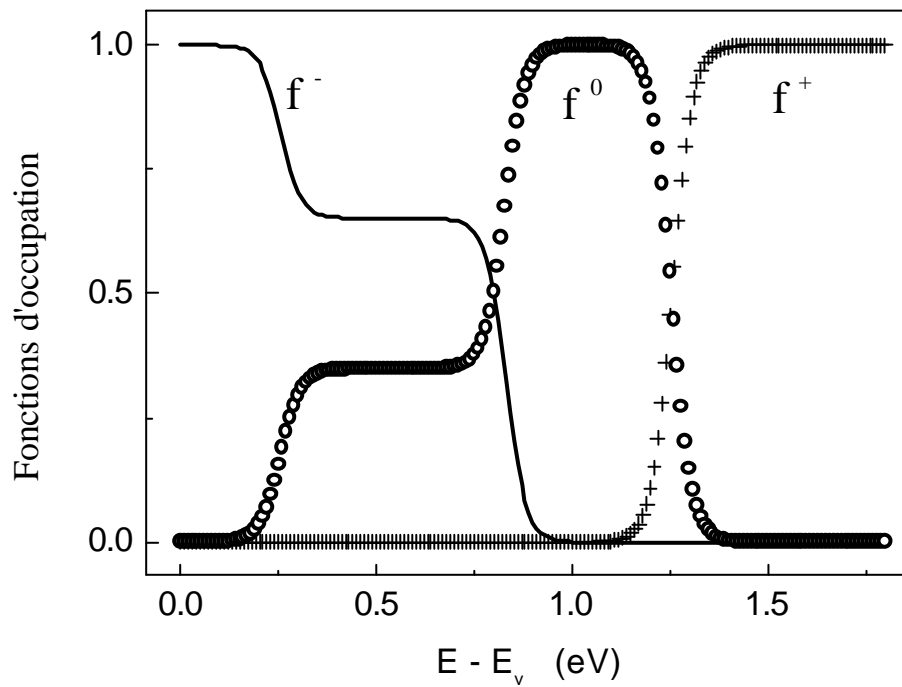


Figure C.5: Tracé des fonctions d'occupation des liaisons pendantes sous éclairage.

II.3. Procédure du calcul des concentrations des porteurs libres n et p et paramètres microscopiques

Après avoir donné les expressions nécessaires pour le calcul des concentrations de charges libres n et p , nous donnons dans ce qui suit l'algorithme du calcul, la méthode numérique et les paramètres qui caractérisent le a-Si:H.

II.3.1. Organigramme du calcul de n et p

Nous donnons dans la figure C.6 l'organigramme de calcul des concentrations des porteurs de charges libres n et p à une énergie de photons $h\nu$. Nous injectons les paramètres propres au matériau et les paramètres extérieurs comme la température et le flux de lumière. Nous rappelons que n et p s'expriment en fonction des quasi-niveaux de Fermi par:

$$n = N_c^0 \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_c}{kT}\right) \quad \text{et} \quad p = N_v^0 \exp\left(\frac{E_v - E_{Fp}}{kT}\right)$$

En raison du grand écart en ordre de grandeur entre n et p , nous avons choisi les variables E_{Fn} et E_{Fp} au lieu de n et p pour faciliter le calcul. En effet, le fait que E_{Fn} et E_{Fp} soient de même ordre de grandeur permet d'assurer et de rendre plus rapide la convergence vers la solution recherchée. Pour cela, il suffit de donner une valeur initiale physiquement significative à E_{Fn} et à E_{Fp} comme, par exemple, la valeur du niveau de Fermi à l'équilibre thermodynamique. Ensuite, des itérations successives sont faites à chaque énergie de photons pour le couple (E_{Fn}, E_{Fp}) . δE_{Fn} et δE_{Fp} sont les pas qui donnent la nouvelle valeur de E_{Fn} et E_{Fp} après chaque itération. Les critères d'arrêt ϵ_n et ϵ_p pour chaque quasi-niveau de Fermi sont choisis de l'ordre de 10^{-4} .

Après avoir calculé n et p , nous pouvons calculer les taux de génération optique dus aux transitions des électrons venant de la bande de valence vers les états localisés. En prenant en compte toutes les transitions optiques possibles entre les différents états localisés et les états étendus des bandes, le coefficient d'absorption optique est alors calculé par la méthode de convolution à chaque énergie de photons.

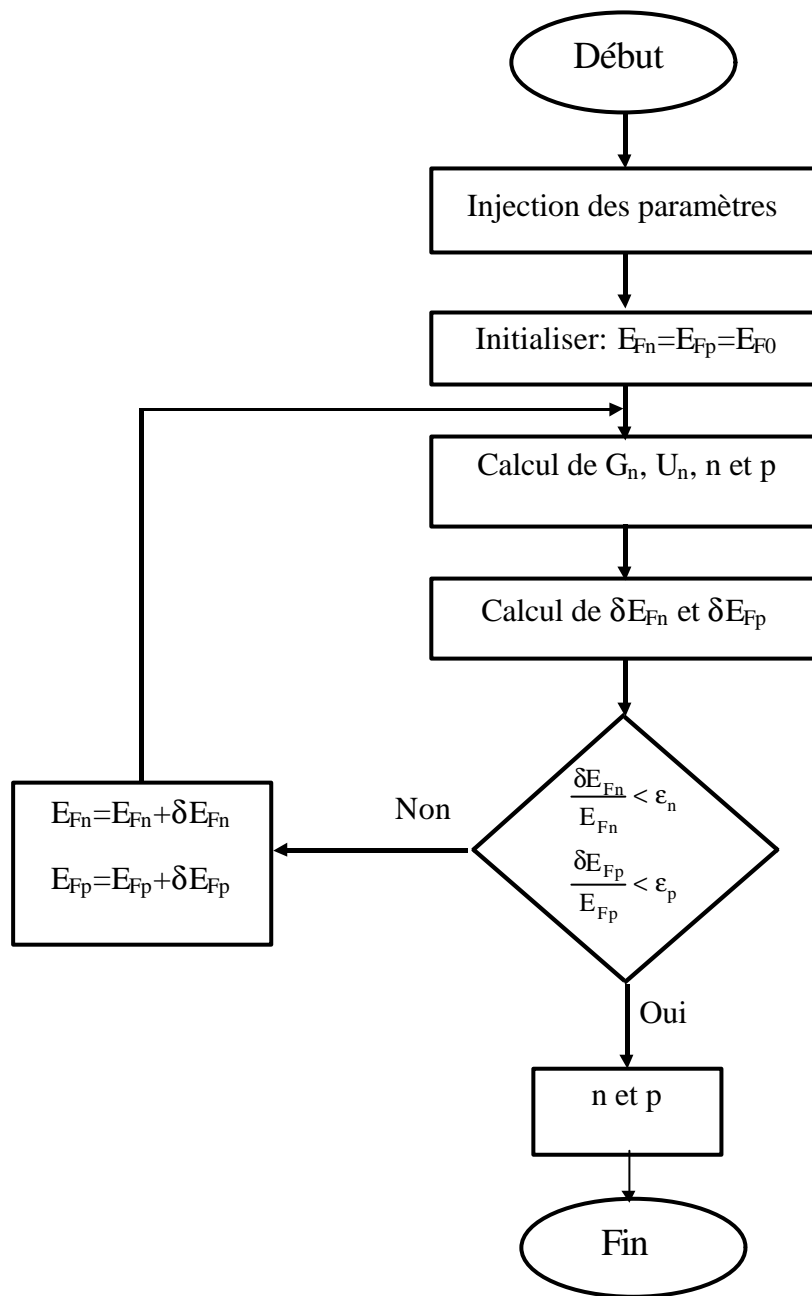


Figure C.6: Organigramme de calcul des concentrations n et p sous éclairement.

II.3.2. Méthode numérique

Nous présentons la méthode numérique permettant le calcul des concentrations des charges libres n et p . Pour le calcul de ces derniers, nous avons présenté dans le § C.III.2.1 les équations (C.16) et (C.17) formant un système d'équations non linéaires et dont les inconnues sont les quasi-niveaux de Fermi E_{Fn} et E_{Fp} . La résolution de ce système nécessite l'utilisation d'un calcul numérique. On a choisi la méthode itérative de Newton dans laquelle seules les dérivées partielles du premier ordre pour les termes fonctions des quasi-niveaux de Fermi sont considérées.

Concernant le calcul d'intégrale où intervient la densité d'états, nous sommes contraints d'utiliser des méthodes numériques. Nous utilisons la méthode d'intégration des trapèzes pour sa simplicité, le pas en énergie choisi est le millième de la largeur du gap. Nous avons préféré l'intégration numérique à l'intégration analytique approchée des densités de charge sur les queues de bande dans laquelle une limitation supérieure dans l'intervalle de température étudiée est imposée [54]. En effet, lorsque la température s'approche de la valeur de T_c ou de T_v , les valeurs de Q_{ct} et de Q_{vt} s'éloignent de leurs valeurs réelles.

A partir de l'algorithme de calcul, nous avons écrit un programme en utilisant le développeur Delphi 5 qui dérive du langage Pascal. Ce développeur permet de manipuler et de stocker des chiffres grâce à la propriété "extended" pour la déclaration des variables. Il permet ainsi d'éviter les problèmes de troncature des variables utilisées dans le calcul. Ce logiciel basé sur la programmation orientée objet offre aussi l'avantage d'élaborer une ou plusieurs interfaces graphiques notamment pour le suivi en temps réel de l'évolution du calcul. Nous donnons sur la figure C.7 une image prise sur le vif de l'interface de notre programme durant le calcul d'un spectre d'absorption optique.

Nous pouvons ainsi résoudre les équations en E_{Fn} et E_{Fp} nécessaires pour le calcul des concentration n et p et donc de la photoconductivité, du coefficient d'absorption total par la méthode de convolution. Le calcul de ces derniers sera adapté par la suite pour la simulation de la CPM et de la DBP.

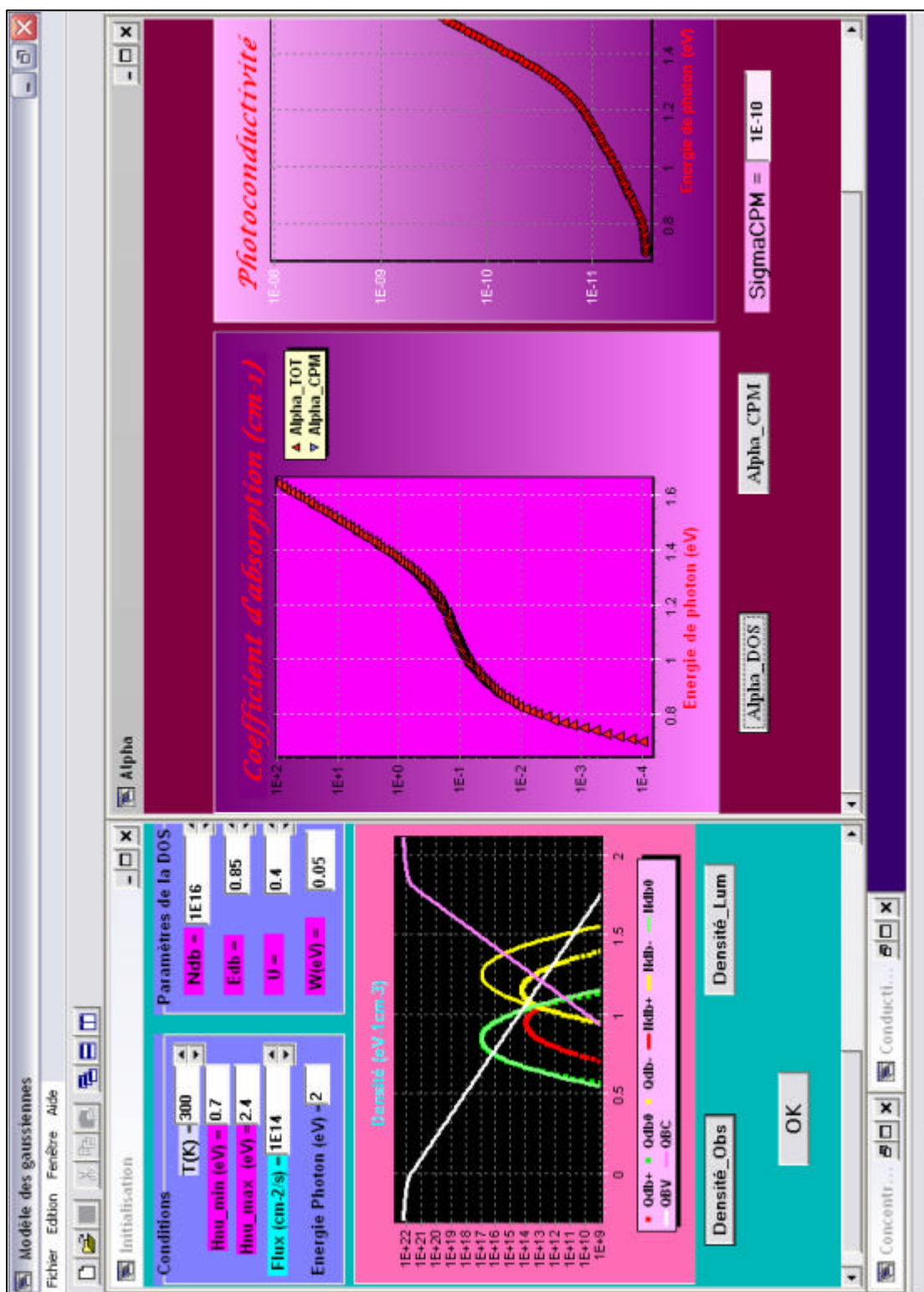


Figure C.7: Interface graphique du code numérique de calcul du coefficient d'absorption optique et de la CPM: capture de l'écran pendant l'exécution du programme.

II.3.3. Choix des paramètres

Après avoir donné l'organigramme de calcul des concentrations n et p , il est nécessaire de donner des valeurs aux paramètres physiques qui définissent le a-Si:H (paramètres de la DOS) et aussi les valeurs des paramètres extérieurs qu'on applique tels que la température, le flux et l'énergie de photons. Nous utilisons dans notre simulation numérique les paramètres usuels de la littérature communément admis pour le a-Si:H de bonne qualité électronique [27,56]. L'ensemble de ces paramètres est donné comme suit (nous prenons le niveau E_v de la bande de valence comme niveau de référence pour les énergies):

- Largeur du gap de mobilité: $E_g = 1.8 \text{ eV}$
- Mobilités des électrons et des trous respectivement: $\mu_n = 10 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$
 $\mu_p = 1 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$
- Masses effectives des électrons et des trous respectivement: $m_n^* = 2.4 m_e$
 $m_p^* = 2.4 m_e$
($m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$)
- Queue de bande de conduction: $kT_c = 30 \text{ meV}$
 $C_n^{\text{ct}} = C_p^{\text{ct}} = 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$
- Queue de bande de valence: $kT_v = 60 \text{ meV}$
 $C_n^{\text{vt}} = C_p^{\text{vt}} = 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$
- Liaisons pendantes: $N_{\text{db}} = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
 $E_{\text{db}} - E_v = 0.85 \text{ eV}$
 $U = 0.4 \text{ eV}$
 $w = 0.05 \text{ eV}$
 $C_n^0 = C_p^0 = 3 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$
 $C_n^+ = C_p^- = 50 C_n^0$

Nous rappelons que N_{db} est la concentration totale des liaisons pendantes, U est l'énergie de corrélation et w est la déviation standard.

- Température: $T = 300 \text{ K}$

III. Expérience virtuelle de la CPM

Dans le chapitre précédent, nous avons décrit le principe de mesure du spectre d'absorption par la technique CPM et les hypothèses sur lesquelles elle repose. Nous présentons dans cette partie la procédure de l'expérience virtuelle de la CPM. Nous développons la modélisation de l'expérience ainsi que l'organigramme de calcul.

III.1. Modélisation et simulation de la CPM

La CPM dépend de la photoconductivité, du taux de génération optique, du flux de photons incidents et du coefficient d'absorption optique. Nous avons vu dans le § B.III.1 que la CPM repose sur la proportionnalité entre la photoconductivité et le taux de génération optique. L'approche que nous avons donnée pour trouver cette proportionnalité consistait à négliger le terme $\mu_p \tau_p$ devant $\mu_n \tau_n$ dans l'expression B.29 de la photoconductivité pour le cas du a-Si:H. Nous pouvons trouver une proportionnalité entre la photoconductivité et le taux de génération optique en utilisant la relation de Rose [49] dont l'expression est la suivante:

$$\sigma_{ph} \propto G^\gamma$$

Pour avoir donc la proportionnalité, on se met dans la gamme de la linéarité de la photoconductivité, c'est à dire pour $\gamma=1$, on obtient alors une proportionnalité entre la photoconductivité et le taux de génération:

$$\sigma_{ph} \propto G \tag{C.36}$$

A partir de cette relation et celle reliant le taux de génération optique au coefficient d'absorption, on peut déduire une relation entre ce dernier et la photoconductivité. L'autre hypothèse de la CPM est de supposer que le produit (αd) soit très inférieur à 1, que le rendement quantique η soit égal à un et que la réflexion R de la lumière à la surface du matériau soit négligeable. L'équation B.27 qui relie le taux de génération total au coefficient d'absorption et au flux de photons incidents ϕ_0 s'écrira dans ce cas:

$$G = \phi_0 \alpha \tag{C.37}$$

En remplaçant cette dernière dans la relation (C.36), on obtient:

$$\sigma_{ph} \propto \phi_0 \alpha \tag{C.38}$$

A partir de la relation précédente, on peut remarquer que si l'on veut maintenir la photoconductivité constante lorsque l'on fait varier l'énergie de photons, il suffit d'ajuster le flux de lumière incidente pour chaque valeur de l'énergie de photons $h\nu$. On obtient ainsi $\phi_{\text{CPM}}(h\nu)$ qui représente le flux de photons permettant le maintien de la valeur constante requise de la photoconductivité. On peut ainsi déterminer le coefficient d'absorption optique qui n'est autre que l'inverse du flux $\phi_{\text{CPM}}(h\nu)$ obtenu multiplié par une constante K_{CPM} . L'évaluation de cette dernière sera explicitée dans le § D.II.1. Le coefficient d'absorption s'écrit alors de la manière suivante:

$$\alpha_{\text{CPM}}(h\nu) = \frac{K_{\text{CPM}}}{\phi_{\text{CPM}}(h\nu)} \quad (\text{C.39})$$

Comme on peut le voir, la CPM suppose que le choix de la valeur de la photoconductivité qu'on maintient constante doit être dans la gamme où $\gamma = 1$.

III.2. Organigramme et méthode numérique de la CPM

Dans le cas de la CPM, les paramètres microscopiques, la procédure pour le calcul de n et p et la méthode numérique pour le calcul de la photoconductivité, sont les mêmes que ceux présentés dans la partie II de ce chapitre. Toutefois, il faut adapter l'organigramme de calcul de n et p à celui de la CPM. Il est présenté sur la figure C.8.

Après l'injection des paramètres nécessaires pour le calcul de la photoconductivité, nous initialisons l'énergie $h\nu$ et le flux de lumière ϕ . Pour une énergie de photons initiale, nous faisons des itérations successives de substitution du flux de lumière jusqu'à trouver la valeur de la photoconductivité constante σ_{CPM} requise. La valeur du flux qui a permis d'obtenir la valeur σ_{CPM} est le flux ϕ_{CPM} qui nous permettra par la suite d'accéder au coefficient d'absorption optique. Puis nous passons à une autre valeur de l'énergie $h\nu$ et nous recalculons le flux ϕ_{CPM} nécessaire pour maintenir σ_{CPM} constante. L'organigramme précédent pour le calcul de n et p est ainsi inclus dans ce nouvel organigramme. Le choix du pas pour les itérations du flux doit être judicieux pour éviter les divergences et les problèmes de stabilité du calcul. Nous obtenons à la fin un flux de lumière ϕ_{CPM} en fonction de l'énergie de photons dans la gamme allant du proche infrarouge jusqu'à l'ultraviolet.

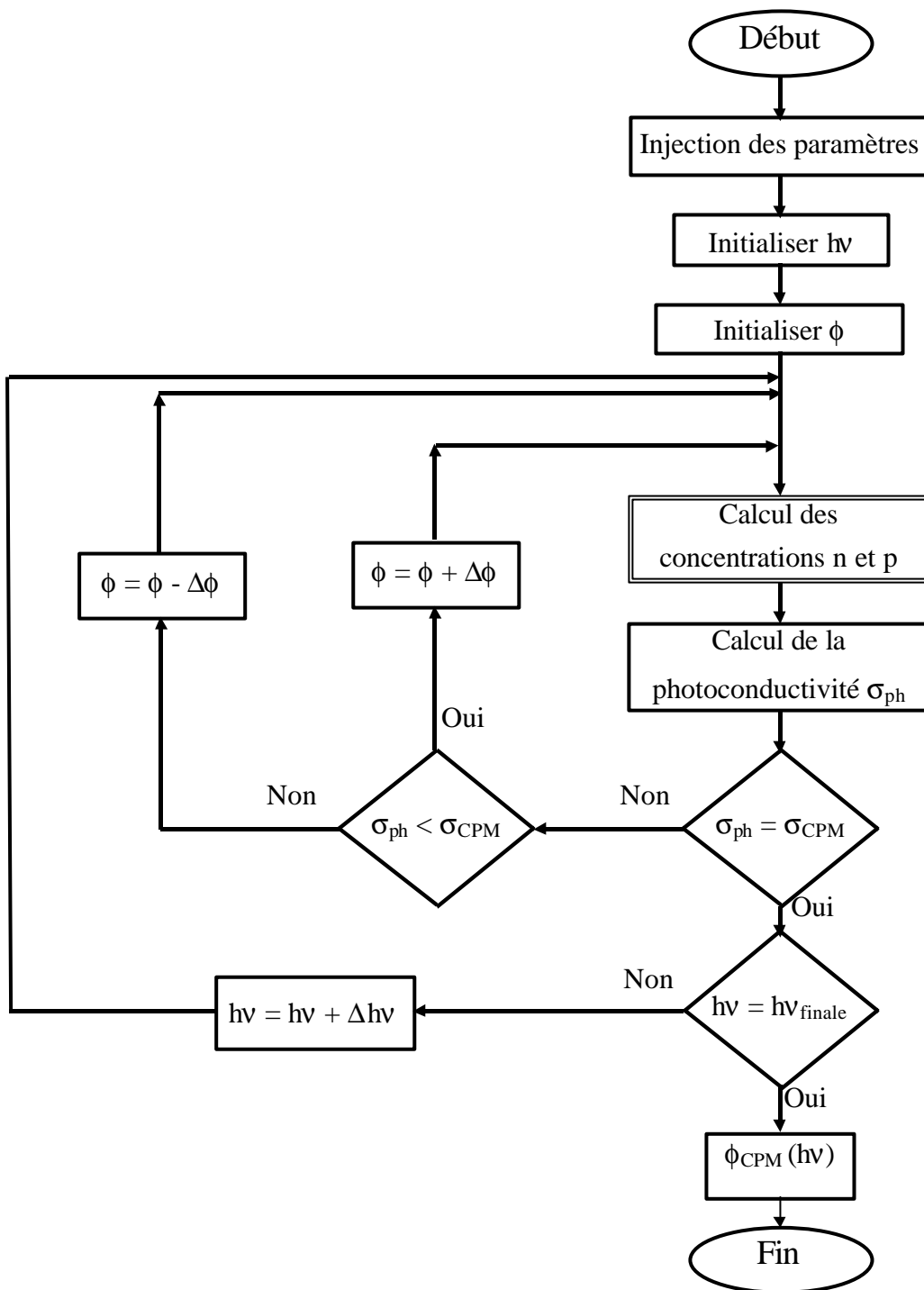


Figure C.8: Organigramme de la simulation de la CPM.

IV. Simulation de la photoconductivité à double faisceau (DBP)

Nous présentons dans cette dernière partie la modélisation de la méthode de la photoconductivité à double faisceau (DBP). Nous rappelons que cette technique consiste à envoyer deux faisceaux lumineux monochromatiques à la surface d'un matériau. Le premier faisceau de flux ϕ_1 , dit primaire, est celui qui engendre une transition interbande G_0^P (VB vers CB). Dans ce cas, l'énergie de photons $h\nu_1$ qui lui est associée doit être supérieure ou égale à l'énergie du gap E_g . Le faisceau secondaire de flux ϕ_2 , continue également, a une énergie de photons $h\nu_2$ qui varie de la gamme infrarouge jusqu'à l'ultraviolet. Il engendre quand à lui des transitions optiques (G_i^S avec $i=0,1\dots 8$) entre les différents états localisés et les états étendus des bandes. Nous représentons sur la figure C.9 les différentes transitions optiques possibles engendrées par les deux flux de lumière. L'originalité de cette étude réside dans l'application de la DBP par la simulation à un semiconducteur amorphe tel que le a-Si:H. En effet, expérimentalement, cette méthode est utilisée généralement pour caractériser les états du gap dans les semiconducteurs cristallins. Elle permet, par la mesure de la réponse spectrale de la photoconductivité, de déterminer la position des niveaux discrets dus aux imperfections comme nous l'avons déjà expliqué dans le § B.VI.1. Dans notre simulation, nous calculons les concentrations des porteurs libres n et p pour le calcul de la photoconductivité en fonction de l'énergie de photons $h\nu_2$. Toutes les expressions analytiques données dans le cas d'un faisceau lumineux unique doivent donc être réadaptées pour le cas de deux faisceaux.

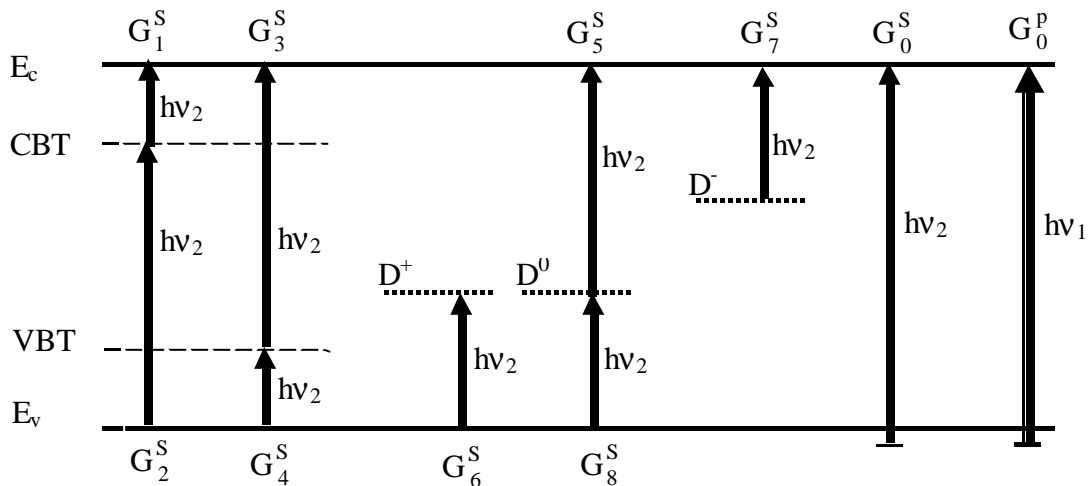


Figure C.9: Représentation de toutes les transitions optiques possibles dues au second flux de lumière (G_i^S) et au flux primaire (G_0^P).

Dans notre modèle nous prenons en compte toutes les transitions optiques possibles qui peuvent être induites par chaque flux de lumière. Ces transitions changent la distribution électronique sur les états localisés dans le gap. Les expressions analytiques des fonctions d'occupation s'écrivent alors en fonction des deux flux ϕ_1 et ϕ_2 et en fonction des énergies $h\nu_1$ et $h\nu_2$. Elles sont données dans ce qui suit.

Les fonctions d'occupation des électrons sur les queues de bande:

$$f_n^j(E) = \frac{e_p^j(E) + nC_n^j + M M 1}{e_n^j(E) + e_p^j(E) + nC_n^j + pC_p^j + M M 2} \quad (C.40)$$

où

$$M M 1 = \phi_1 M(h\nu_1) N_v(E - h\nu_1) [1 - f_v(E - h\nu_1)] + \phi_2 M(h\nu_2) N_v(E - h\nu_2) [1 - f_v(E - h\nu_2)]$$

$$M M 2 = \phi_1 M(h\nu_1) \{N_v(E - h\nu_1) [1 - f_v(E - h\nu_1)] + N_c(E + h\nu_1) [1 - f_c(E + h\nu_1)]\} \\ + \phi_2 M(h\nu_2) \{N_v(E - h\nu_2) [1 - f_v(E - h\nu_2)] + N_c(E + h\nu_2) [1 - f_c(E + h\nu_2)]\}$$

Les fonctions d'occupation sur les états des liaisons pendantes:

$$f^0(E) = \frac{CC1 \times CC3}{CC} \quad (C.41)$$

$$f^+(E) = \frac{CC2 \times CC3}{CC} \quad (C.42)$$

$$f^-(E) = \frac{CC1 \times CC4}{CC} \quad (C.43)$$

avec

$$CC1 = nC_n^+ + e_p^+(E) + \phi_1 M(h\nu_1) N_v(E - h\nu_1) [1 - f_v(E - h\nu_1)] \\ + \phi_2 M(h\nu_2) N_v(E - h\nu_2) [1 - f_v(E - h\nu_2)]$$

$$CC2 = e_n^0(E) + pC_p^0 + \phi_1 M(h\nu_1) N_c(E + h\nu_1) [1 - f_c(E - h\nu_1)] \\ + \phi_2 M(h\nu_2) N_c(E + h\nu_2) [1 - f_c(E + h\nu_2)]$$

$$CC3 = pC_p^- + e_n^-(E) + \phi_1 M(h\nu_1) N_c(E + U + h\nu_1) [1 - f_c(E + U + h\nu_1)] \\ + \phi_2 M(h\nu_2) N_c(E + U + h\nu_2) [1 - f_c(E + U + h\nu_2)]$$

$$CC4 = e_p^0(E) + n C_n^0 + \phi_1 M(h\nu_1) N_v(E - h\nu_1) [1 - f_v(E - h\nu_1)] \\ + \phi_2 M(h\nu_2) N_v(E - h\nu_2) [1 - f_v(E - h\nu_2)]$$

$$CC = CC1 \times CC3 + CC2 \times CC3 + CC1 \times CC4$$

Les expressions des fonctions d'occupation des états étendus de la bande de valence et de la bande de conduction sont celles de Fermi-Dirac comme dans le cas d'un éclairage avec un seul faisceau.

A partir de ces nouvelles expressions nous pouvons calculer les taux de recombinaison sur chaque état localisé et en déduire le taux net de recombinaison des électrons libres U_r . Nous pouvons ainsi calculer les concentrations des électrons et des trous libres en résolvant le système d'équations formé par l'équation de continuité des électrons et l'équation de neutralité. En faisant varier l'énergie de photons du faisceau secondaire, nous déduisons ainsi la photoconductivité en fonction de $h\nu_2$.

A partir de ces nouvelles données, nous calculons les concentrations des électrons et des trous libres en utilisant le système d'équations suivant:

$$\begin{cases} G_0^P + G_0^S + G_1^S + G_3^S + G_5^S + G_7^S + U_n = 0 \\ n - p + Q_{ct} - Q_{vt} + Q_{db}^- - Q_{db}^+ = 0 \end{cases} \quad (C.44)$$

L'organigramme du calcul des concentrations n et p et donc de la photoconductivité est le même que celui présenté dans la partie II.3.1 de ce chapitre. La résolution de ce système d'équations non linéaires s'effectue par l'intermédiaire d'un calcul numérique en utilisant la méthode itérative de Newton.

CHAPITRE D

Présentation des résultats de la simulation numérique et discussion

Le présent chapitre est consacré à la présentation et à la discussion des résultats de notre simulation des propriétés optiques du a-Si:H. Les trois parties de ce chapitre portent sur le spectre d'absorption optique total calculé par la méthode de convolution, sur la simulation de la CPM et sur la variation, en fonction de l'énergie de photons, de la photoconductivité à double faisceau.

Dans la première partie de ce chapitre, nous décrivons le spectre d'absorption optique total calculé à partir du modèle standard de densité d'états pour le a-Si:H. La deuxième partie est consacrée à l'étude de la méthode du photocourant constant (CPM) simulée. Nous présentons le spectre obtenu par la CPM qui est comparé au spectre d'absorption total. Nous présentons des spectres d'absorption obtenus par la CPM pour différentes valeurs de la photoconductivité. Nous vérifions également les conditions de validité de la CPM. La troisième partie porte sur la description des variations de la photoconductivité en fonction de l'énergie de photons obtenue à partir de la méthode de la photoconductivité à double faisceau (DBP) et nous discutons en particulier l'un des résultats les plus originaux de la simulation de la DBP qui est le quenching optique.

I. Description du spectre d'absorption optique calculé

Nous présentons dans cette première partie les résultats du calcul du coefficient d'absorption optique par la méthode de convolution en utilisant les paramètres microscopiques communément admis pour le a-Si:H. Nous retrouvons l'allure générale des spectres expérimentaux habituellement obtenus sur le a-Si:H. Nous commençons par expliquer la nécessité de l'utilisation des états distribués en forme de gaussiennes pour les liaisons pendantes. Nous donnons ensuite la justification du choix de l'expression de la matrice de transition et l'influence de celle-ci sur la détermination du gap optique. Nous étudions en dernier la contribution à l'absorption optique des différents états qui composent la densité d'états du a-Si:H.

I.1. Justification du choix des gaussiennes pour les liaisons pendantes

Dans le calcul de la photoconductivité en fonction de la température, le modèle d'états discrets pour les liaisons pendantes a suffi pour obtenir une allure de la photoconductivité cohérente avec celle de l'expérience [55]. En procédant à divers essais de calcul du coefficient d'absorption optique par la méthode de convolution, nous avons constaté que le modèle d'états discrets conduit à des singularités sur le spectre. Contrairement au cas de la variation de la photoconductivité, en fonction de l'inverse de la température, qui ne présente pas de singularités, celles du spectre d'absorption n'existent pas sur un spectre expérimental.

Dans notre simulation numérique, nous avons mis au point un programme de calcul sur la base du modèle standard de densité d'états (DOS) pour le a-Si:H. Dans ce modèle nous avons considéré deux états discrets corrélés pour les liaisons pendantes. Ensuite nous avons fait un autre programme où nous avons amélioré le modèle de DOS. Cette amélioration consiste à remplacer les deux niveaux discrets par deux gaussiennes comme nous l'avons déjà décrit dans le chapitre C. Les spectres d'absorption optique calculés par chaque programme sont comparés. Nous reportons dans la figure D.1 le tracé du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie de photons dans le cas discret et dans le cas des gaussiennes pour les états des liaisons pendantes. Nous constatons sur le spectre d'absorption optique de la figure D.1(a) l'apparition d'une discontinuité en 0.82 eV et d'un épaulement en 0.93 eV. La valeur 0.82 eV correspond à la différence en énergie entre le niveau D^0 et le haut de la bande de valence. Quant à la valeur 0.93 eV, elle correspond à la différence en énergie entre le niveau D^0 et le bas de la bande de conduction. La figure D.1(b) montre un spectre d'absorption optique dans le cas d'une distribution en gaussienne des états des liaisons pendantes. La disparition des singularités permet de retrouver une allure cohérente du spectre d'absorption optique. Nous pouvons remarquer que les trois zones d'absorption optique (forte, moyenne et faible absorption) sont retrouvées.

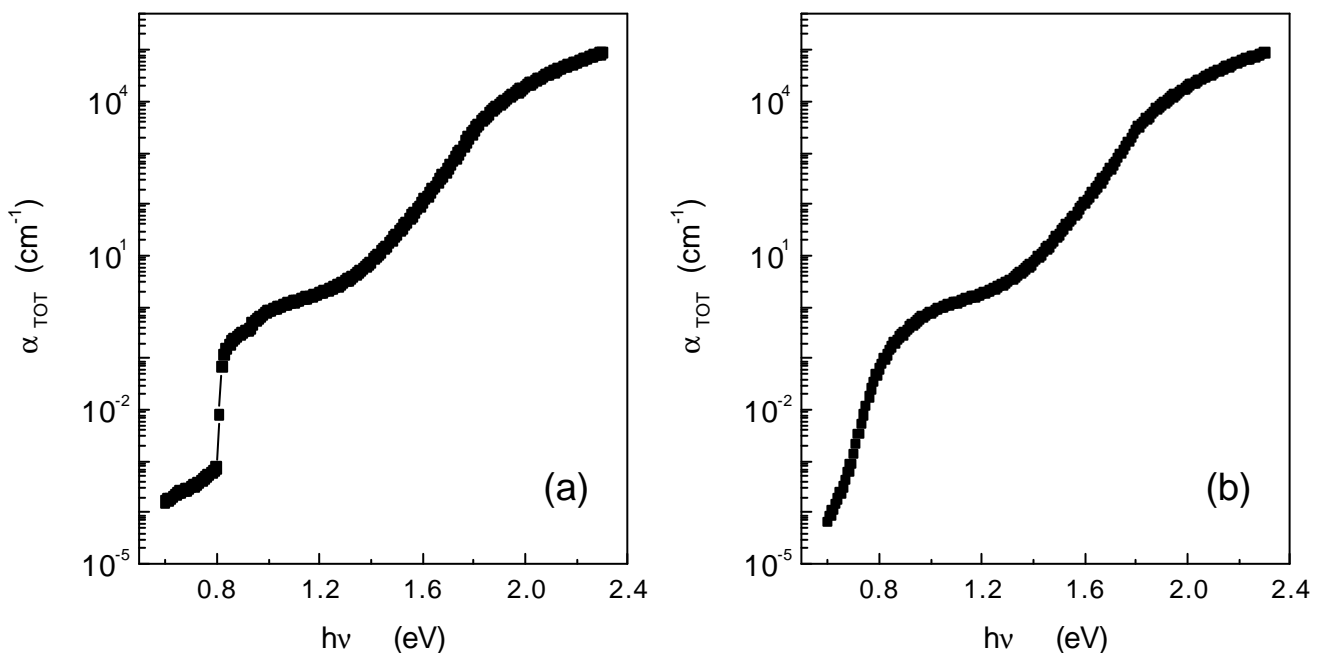


Figure D.1: Spectre d'absorption optique dans le modèle d'états discret (a) et distribués en forme gaussiennes pour les liaisons pendantes (b).

Afin d'apporter une précision sur les états localisés responsables des singularités dans le coefficient d'absorption optique, nous reportons sur la figure D.2 les composantes du coefficient d'absorption optique pour le cas discret. Effectivement, nous remarquons

l'existence de deux discontinuités en 0.82 eV: l'une est sur la composante du coefficient d'absorption α_6 , due à la transition optique de la VB vers le niveau D^0 , l'autre est sur la composante α_8 due à la transition de la VB vers le niveau D^+ . Cependant, la contribution de cette dernière dans l'absorption totale est faible. Nous remarquons aussi l'apparition d'une discontinuité en 0.93 eV traduisant l'apparition brutale de l'absorption α_5 due à la transition d'un électron du niveau D^0 vers la bande de conduction.

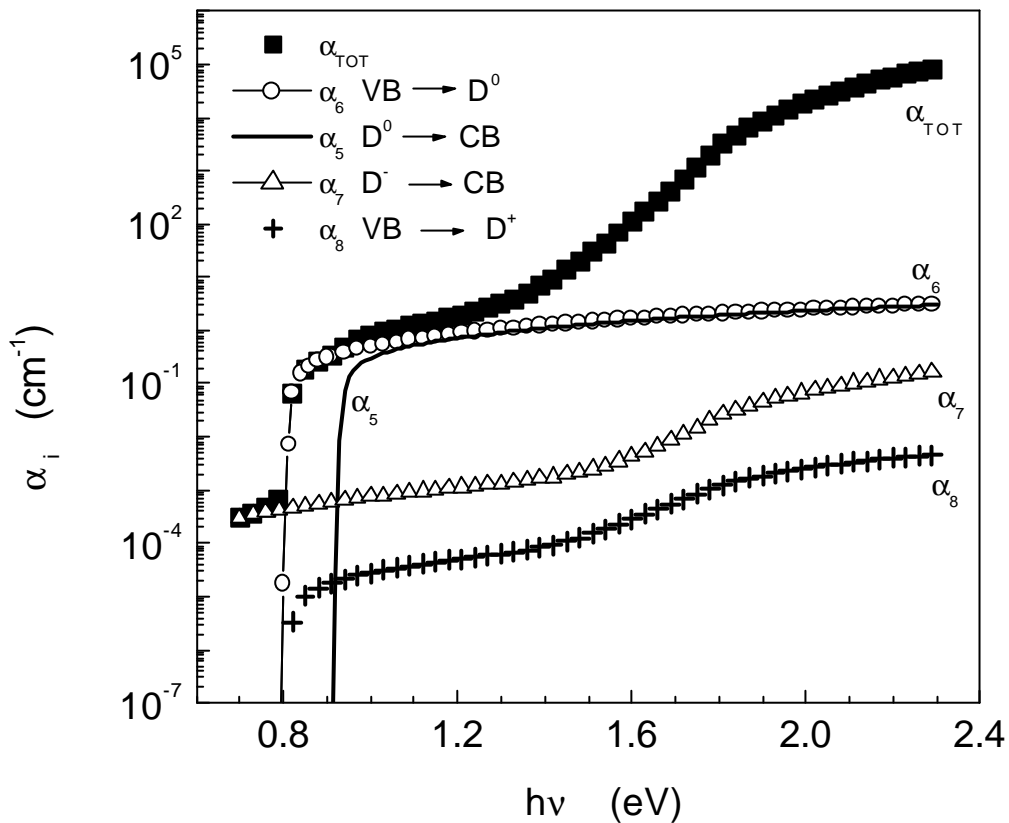


Figure D.2: Composantes du spectre d'absorption optique dans le modèle pour des niveaux discrets des liaisons pendantes.

On voit bien que l'intervention abrupte des niveaux discrets des liaisons pendantes entraîne des singularités dans le spectre d'absorption optique. En utilisant le modèle des gaussiennes pour les liaisons pendantes, avec une largeur à mi-hauteur de 0.1 eV, ces singularités disparaissent. En effet, la présence d'un continuum d'états engendre l'intervention des transitions optiques de manière graduelle.

Afin de vérifier que ces discontinuités sont bien dues au fait de considérer des niveaux discrets, nous avons réduit la largeur des gaussiennes à 0.01 eV et nous avons calculé le

coefficient d'absorption total à partir du second programme (Figure D.3). Le résultat de ce calcul est que les deux singularités réapparaissent.

Il est vrai que le modèle des gaussiennes rend le calcul plus long en terme de temps et rend la convergence vers les solutions recherchées plus délicate. Cependant, ce modèle a plus de sens physique et donne des résultats plus réalistes pour le calcul du coefficient d'absorption optique par la méthode de convolution.

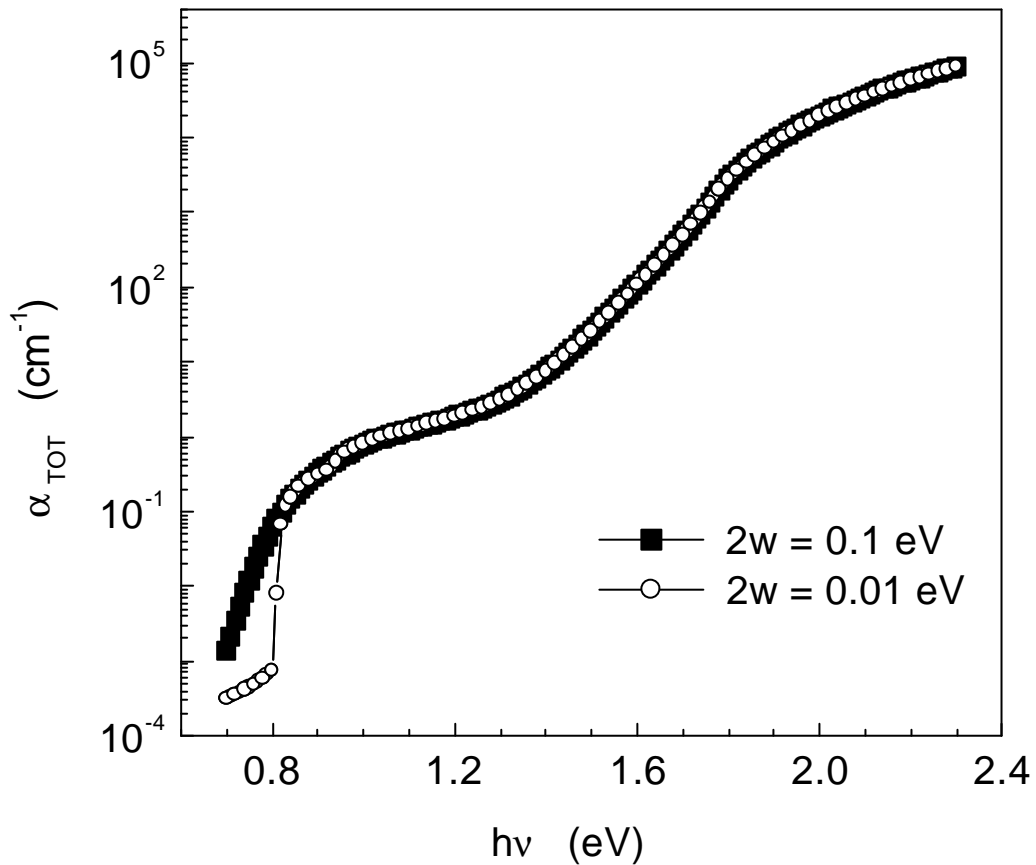


Figure D.3 : Spectre d'absorption pour deux valeurs de la déviation standard w .

I.2. Expression de la matrice de transition et gap optique

Nous avons vu dans le § B.I.4 les différentes expressions de la matrice de transition $M(h\nu)$ qui peut être inversement proportionnelle à $h\nu$ d'après Tauc [15], comme elle peut être proportionnelle à l'énergie de photons $h\nu$ d'après Cody *et al.* [30].

Afin de voir l'influence de l'expression de la matrice de transition sur l'allure du spectre d'absorption optique, nous avons tracé sur la figure D.4 le spectre d'absorption total par la méthode de convolution pour les deux approches de la matrice de transition dont les expressions sont les suivantes:

$$\begin{array}{lll} \text{Tauc:} & M(h\nu) = K / h\nu & \text{avec } K = C_1 P^2 \\ \text{Cody:} & M(h\nu) = C h\nu & \text{avec } C = C_0 R^2 \end{array}$$

où C_1 et C_0 sont des constantes dont les valeurs numériques sont calculées en utilisant les relations B.12 et B.15 respectivement.

En utilisant les deux expressions de la matrice de transition, nous retrouvons l'allure du coefficient d'absorption optique généralement observé pour le cas du a-Si:H (voir figure D.4). Cependant, nous remarquons un décalage entre les deux spectres. Dans la forte et la moyenne absorption, le décalage est approximativement d'une décade. Alors que dans la gamme de la faible absorption la différence peut aller jusqu'à deux décades.

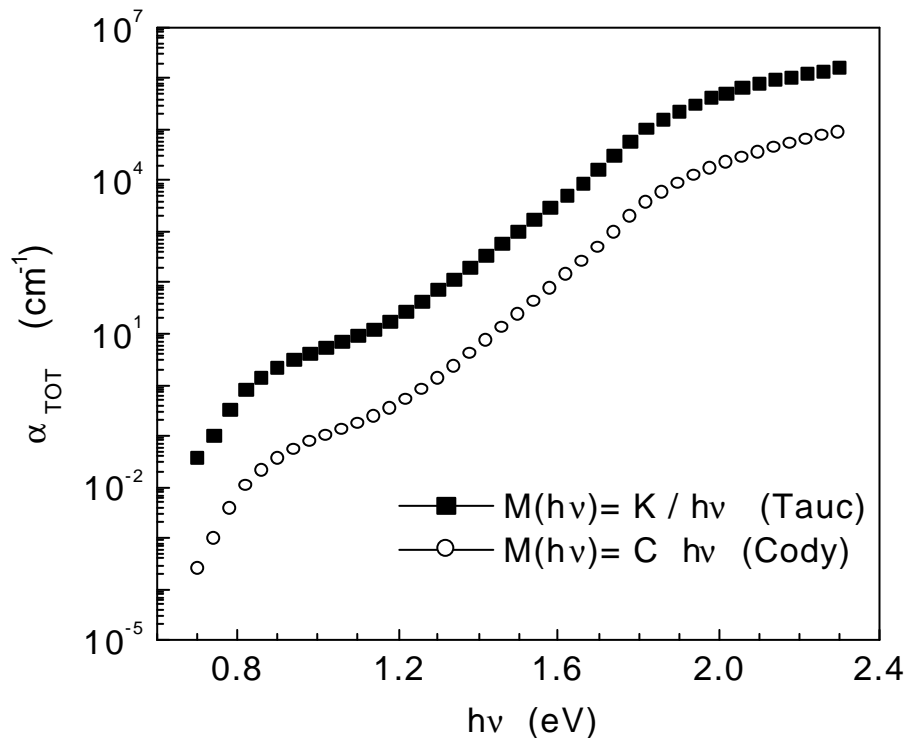


Figure D.4: Spectres d'absorption optique en utilisant la matrice de transition de Tauc et celle de Cody.

La valeur numérique du coefficient d'absorption optique calculé en utilisant la matrice de transition proportionnelle à $h\nu$ (expression de Cody) est plus proche des valeurs expérimentales, notamment dans la zone de la forte absorption. Il faut savoir que la valeur de la constante C_0 peut être calculée numériquement puisqu'elle dépend de l'indice de réfraction statique et de la densité atomique du matériau. Quant à la valeur de la constante K , utilisée dans l'expression de Tauc, elle est empirique. Elle est déduite expérimentalement par Vanecek *et al.* [23] sur des échantillons de a-Si:H. Cette constante n'est valable que pour certains échantillons déposés sous certaines conditions. Ce qui nous a conduit à opter dans notre simulation pour la relation de la matrice de transition de Cody.

D'autre part, le choix de l'expression de la matrice de transition influe sur la méthode de détermination du gap. En effet, l'hypothèse des bandes paraboliques de la bande de conduction et de la bande de valence nous permet d'aboutir à une relation entre le coefficient d'absorption et le gap optique. Nous déduisons le gap optique dans la zone de la forte absorption à partir du spectre d'absorption optique calculé par la méthode de convolution en supposant que les fonctions d'occupation sont égales à 1. En effet, pour des énergies supérieures au gap, l'intégration du produit de convolution de la densité d'états initiale et de la densité d'états finale multipliée par la matrice de transition nous permet d'avoir l'expression suivante pour le coefficient d'absorption:

$$\alpha(h\nu) = M(h\nu) \int_{E_c-h\nu}^{E_v} N_v(E) N_c(E+h\nu) dE = M(h\nu) A(h\nu - E_0)^2 \quad (D.1)$$

où E_0 est le gap optique et A une constante.

Il existe plusieurs relations pour extraire le gap optique [61]. Les plus utilisées sont la relation de Tauc [15] que nous avons évoquée dans le chapitre B et celle de Cody [30]. Les deux approches reposent sur l'expression D.1. C'est l'expression de la matrice de transition qui diffère. La méthode de Tauc consiste à tracer $(\alpha h\nu)^{1/2}$ en fonction de l'énergie de photons $h\nu$. A partir de là, on extrapole la partie linéaire dans la zone de la forte absorption jusqu'à zéro et on détermine E_0 . La méthode de Cody consiste à tracer $(\alpha / h\nu)^{1/2}$ en fonction de l'énergie de photons $h\nu$ et on procède à la même extrapolation que celle de Tauc.

Dans notre simulation, c'est l'expression de la matrice de transition qui détermine avec laquelle des deux méthodes nous déduisons le gap optique. A partir des spectres d'absorption optique de la figure D.4, nous rapportons ci-dessous deux tracés montrant la détermination de E_0 .

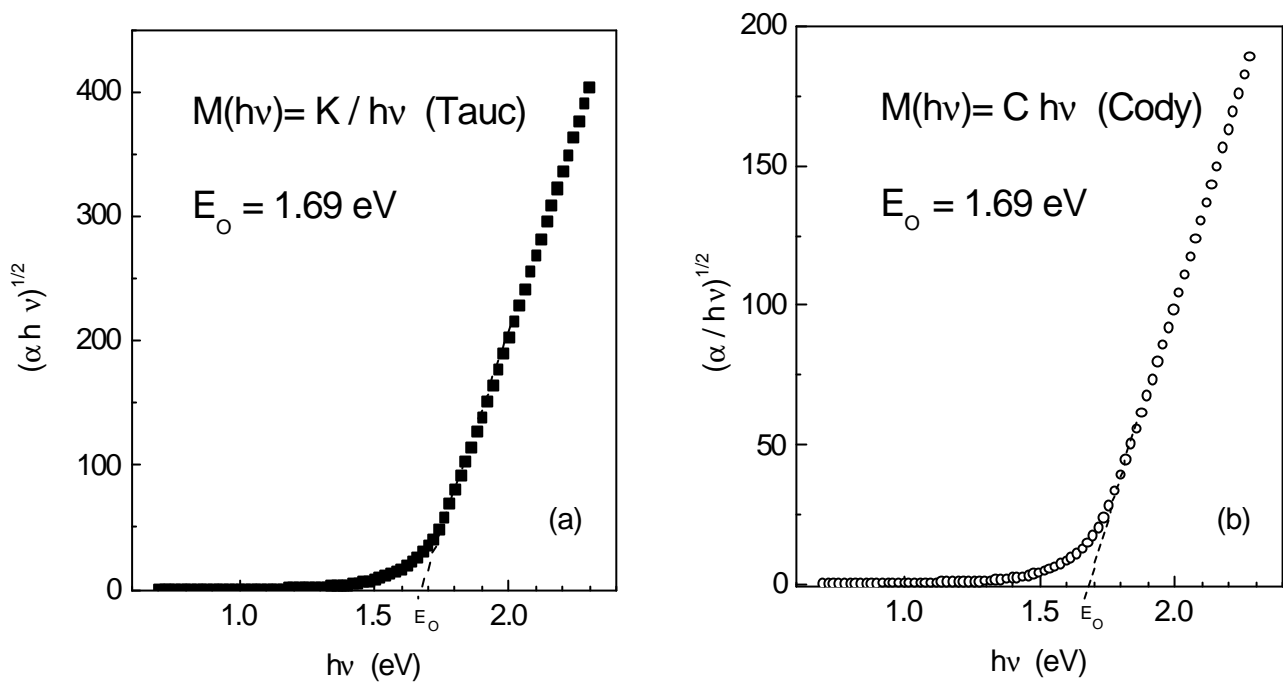


Figure D.5: Tracés montrant la détermination du gap optique par l'approche de Tauc (a) et par celle de Cody (b).

Nous remarquons que lorsque nous utilisons la méthode de détermination du gap optique qui correspond à l'expression de la matrice de transition, nous obtenons le même gap optique. Cependant, le gap optique obtenu en utilisant les deux approches est plus faible que celui ($E_c - E_v$) introduit au départ dans la simulation numérique.

Bien que la définition du gap optique est une question qui n'est pas encore élucidée, l'approche de Tauc ou celle de Cody semble donner une bonne estimation de E_0 . Ces deux façons de déterminer le gap optique, à partir de spectres d'absorptions expérimentaux, sont très utilisées et restent valables.

I.3. Contribution des différents états localisés à l'absorption optique

Comme on vient de le voir, l'allure générale ainsi que les trois zones d'absorption du spectre d'absorption optique du a-Si:H sont retrouvés dans notre calcul (voir figure D.4). Pour voir la contribution des différents états de la densité d'états à l'absorption optique, en particulier les états localisés, nous traçons les composantes α_i du coefficient d'absorption optique total α_{TOT} . Nous rappelons que les indices des composantes α_i correspondent aux différentes transitions élémentaires du taux de génération optique schématisées dans le § C.II.2 (voir figures C.3 et C.4).

Nous reportons sur la figure D.6 le coefficient d'absorption total calculé par la méthode de convolution ainsi que ses composantes qui sont dues à toutes les transitions optiques possibles faisant intervenir les états de la densité d'états du a-Si:H. Nous remarquons que les composantes α_1 , α_4 , α_7 et α_8 sont négligeables devant les autres composantes d'absorption dans toute la gamme spectrale. On y voit clairement qu'à partir de l'énergie du gap, l'absorption α_0 due aux transitions allant de la bande de valence vers la bande de conduction prime sur l'absorption due aux autres transitions venant des états localisés. C'est la zone I de la forte absorption. Par contre dans la zone II de la moyenne absorption, c'est la contribution de la composante α_3 , due à la transition de la VBT vers la CB, qui prime sur les autres transitions. Ce qui confirme la contribution de la VBT à l'absorption optique dans cette zone, comme l'a prévu Urbach [17]. Quant aux états des liaisons pendantes, leur participation à l'absorption optique s'aperçoit dans la zone III de la faible absorption (α_5 à α_8). Nous remarquons ainsi que pour $1 < h\nu < 1.4$ eV, c'est les composantes du coefficient d'absorption faisant intervenir l'état D^0 (α_5 et α_6) qui contribuent le plus dans l'absorption optique par rapport aux autres composantes. En dessous de 1 eV c'est la composante α_6 (VB vers D^0) qui prend le dessus. Quant à la composante α_7 (transition D^- vers CB), elle commence à intervenir pour les énergies de photons en dessous de 0.8 eV. La contribution de l'état de charge D^+ est très faible devant toutes les autres composantes dans toute la gamme spectrale comme l'indique la composante α_8 .

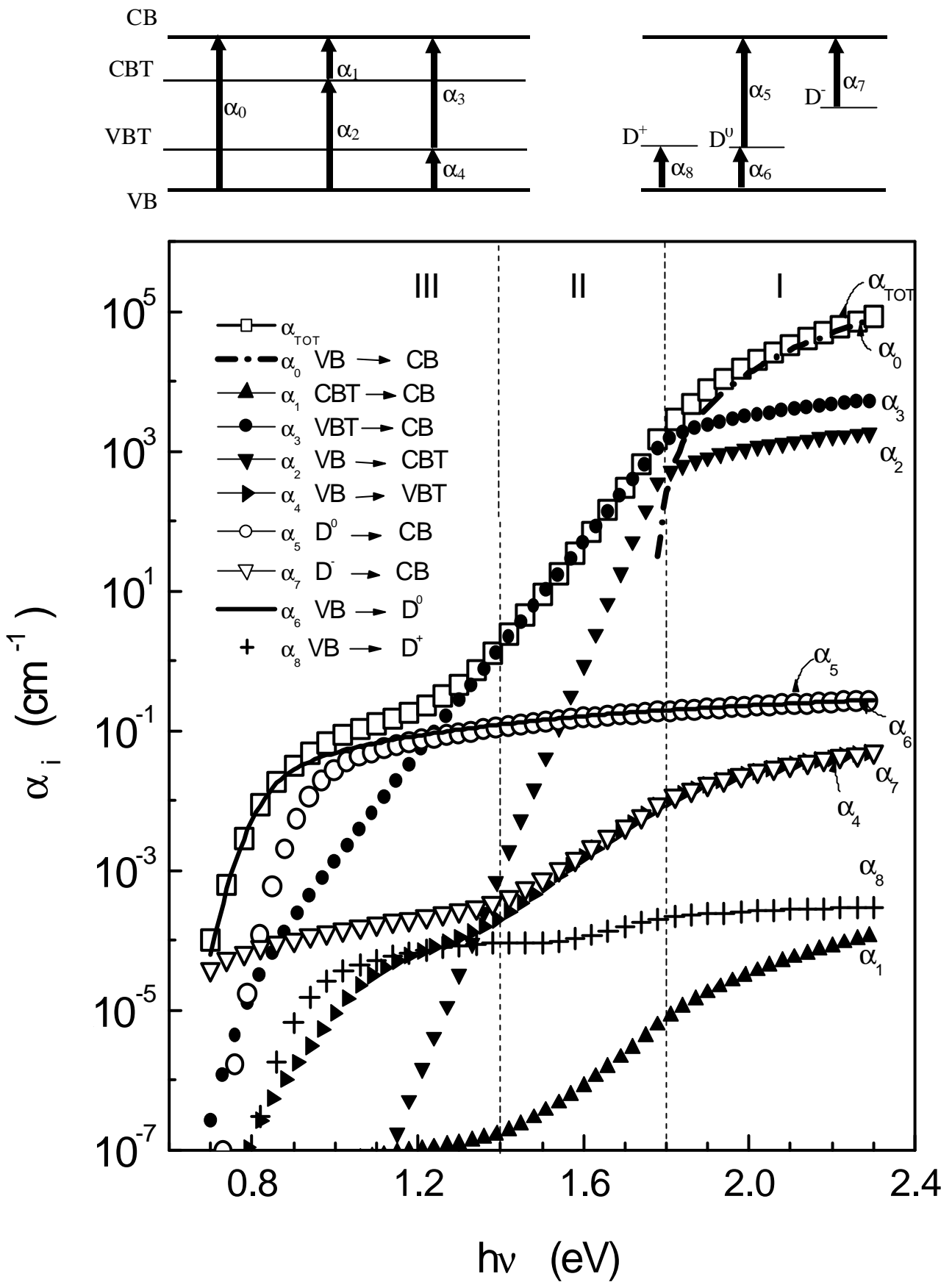


Figure D.6: Composantes du coefficient d'absorption faisant intervenir les différents niveaux de la densité d'états du a-Si:H.

Nous venons de voir la forte contribution des états localisés dans l'absorption optique. La connaissance du spectre d'absorption est donc un moyen intéressant pour accéder aux propriétés du a-Si:H. Notamment la détermination de la pente d'Urbach dans la gamme de la moyenne absorption qui est une indication sur le désordre structural dans le matériau. Quant à la zone de la faible absorption, elle permet d'accéder à la concentration totale des liaisons pendantes. Nous donnons ci-dessous une vérification de la corrélation entre la pente d'Urbach et l'énergie caractéristique kT_v de la VBT ainsi que l'influence de la concentration totale N_{db} des liaisons pendantes sur le spectre d'absorption optique.

Dans la figure D.7, nous avons tracé la pente d'Urbach en fonction de l'énergie caractéristique kT_v pour trois valeurs de l'énergie caractéristique kT_c de la CBT. Nous remarquons que la dépendance forme une quasi-parfaite bissectrice pour des valeurs de kT_v comprises entre 40 et 100 meV. Pour des valeurs de kT_v inférieures à 40 meV, nous remarquons que l'évaluation de la pente d'Urbach est plus grande que celle de kT_v . Ces valeurs de kT_v sont proches de celles de kT_c . Ces valeurs sont irréalistes car les deux queues de bande interviennent à la fois dans l'absorption optique et pour le cas du a-Si:H l'énergie kT_v est toujours supérieure à kT_c .

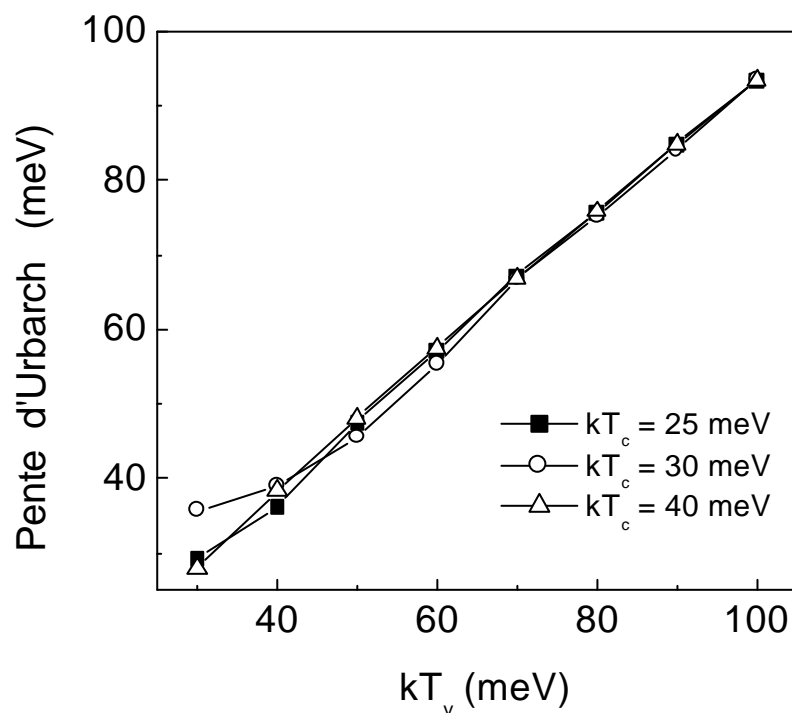


Figure D.7: Energie d'Urbach en fonction de kT_v à différentes valeurs de kT_c

Nous reportons sur la figure D.8 trois spectres d'absorption optique calculés pour trois valeurs de la concentration des liaisons pendantes N_{db} . Nous remarquons l'augmentation du coefficient d'absorption dans la zone de faible absorption lorsque nous augmentons la concentration totale des liaisons pendantes N_{db} . Ceci confirme bien la prédominance des liaisons pendantes dans l'absorption optique dans cette gamme d'énergie.

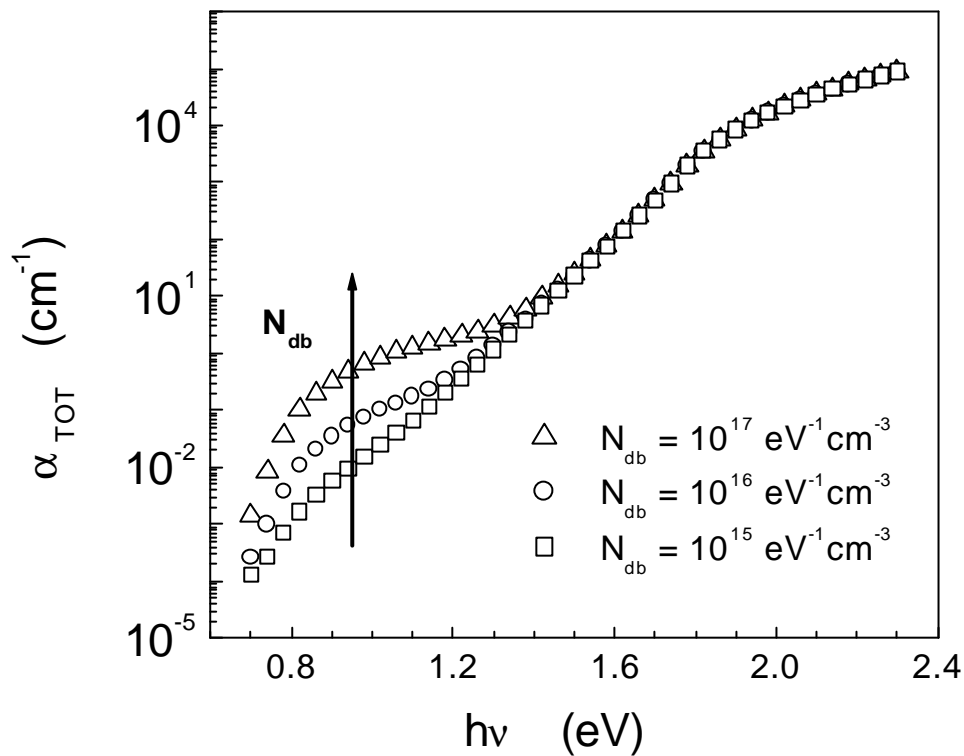


Figure D.8: Coefficient d'absorption total pour différentes valeurs de N_{db}

En conclusion, nous pouvons dire que nous avons retrouvé l'allure générale du spectre d'absorption optique du a-Si:H calculé par la méthode de convolution. En traçant les composantes du coefficient d'absorption optique, nous avons étudié l'intervention des différents états qui composent la densité d'états du a-Si:H dans l'absorption optique. Les transitions interbandes prédominent dans la zone I de la forte absorption. Quant aux états localisés, nous avons confirmé la contribution de la queue de bande de valence dans la zone de la moyenne absorption. Nous avons aussi pu voir la contribution à l'absorption optique des états des liaisons pendantes dans la zone III de la faible absorption.

II. Simulation de la méthode CPM

Dans cette partie, nous présenterons les résultats de l'expérience virtuelle de la CPM sur du a-Si:H non dopé. Cette méthode, basée sur la relation linéaire entre la photoconductivité et le taux de génération (modèle de Rose), nous permet d'accéder au coefficient d'absorption optique. Nous discuterons ainsi les hypothèses et le domaine de validité de cette méthode.

Nous commençons par présenter les variations du flux de lumière incidente, en fonction de l'énergie de photons, qui a permis de maintenir la photoconductivité constante σ_{CPM} . A partir de l'inverse de ce flux ϕ_{CPM} , nous remontons au coefficient d'absorption optique comme nous l'avons déjà expliqué précédemment. Ensuite, nous présentons une comparaison du spectre d'absorption α_{CPM} obtenu par la CPM virtuelle et celui calculé par la méthode de convolution dans la partie I de ce chapitre. Puis, nous rapportons un spectre d'absorption optique obtenu par la CPM pour différentes valeurs de la photoconductivité maintenue constante. Enfin, nous vérifierons les conditions de validité de la CPM.

II.1. Détermination du spectre d'absorption

On rappelle que la CPM est une méthode relative qui nécessite la connaissance d'un autre spectre d'absorption optique pour le calage du spectre d'absorption relatif obtenu par la CPM. Dans notre étude numérique, nous utilisons le spectre d'absorption optique calculé par la méthode de convolution. L'expression de Cody pour la matrice de transition est utilisée dans les deux spectres.

Le principe de la méthode CPM est basé sur la relation entre le coefficient d'absorption optique et le flux de lumière incidente ϕ_{CPM} . Cette relation s'écrit comme suit:

$$\alpha_{\text{CPM}}(h\nu) \propto \frac{1}{\phi_{\text{CPM}}(h\nu)}$$

Nous rappelons que ϕ_{CPM} est le flux de lumière ajusté à chaque énergie de photons pour maintenir la photoconductivité constante. Ainsi, l'inverse du flux obtenu nous donne le spectre d'absorption relatif.

La valeur numérique de la photoconductivité, que nous maintenons constante lors de l'expérience virtuelle de la CPM, est choisie sur le spectre de la photoconductivité. Ce dernier est représenté sur la figure D.9. Il est calculé pour un flux de lumière constant qui est de 10^{14} photons/cm²/s. Nous remarquons que la photoconductivité σ_{ph} augmente lorsque l'énergie de photons augmente. Nous représentons sur la même figure la photoconductivité σ_{CPM}

maintenue constante dans toute la gamme spectrale. La valeur de σ_{CPM} , choisie pour la détermination du coefficient d'absorption par la CPM, est prise égale à $10^{-8} \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$. L'erreur relative sur σ_{CPM} dans le calcul à chaque énergie de photons est de 0.01 %.

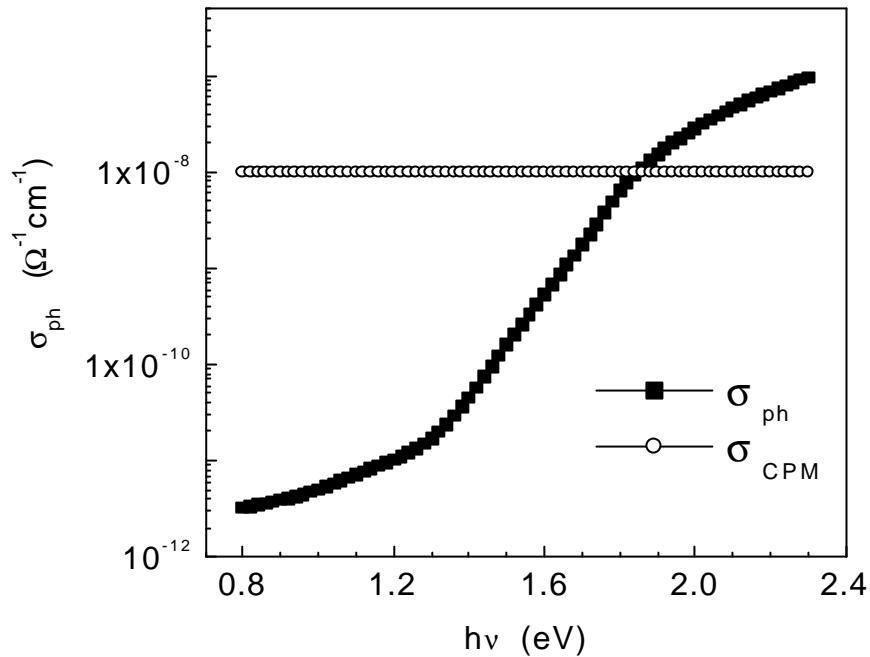


Figure D.9: Réponse spectrale de la photoconductivité totale et celle de la photoconductivité maintenue constante dans la CPM.

Nous représentons sur la figure D.10 le spectre du flux de la CPM qui a permis de maintenir la photoconductivité constante. Nous remarquons que le flux décroît avec la croissance de l'énergie de photons. Ceci indique que l'absorption des photons augmente lorsque l'énergie augmente.

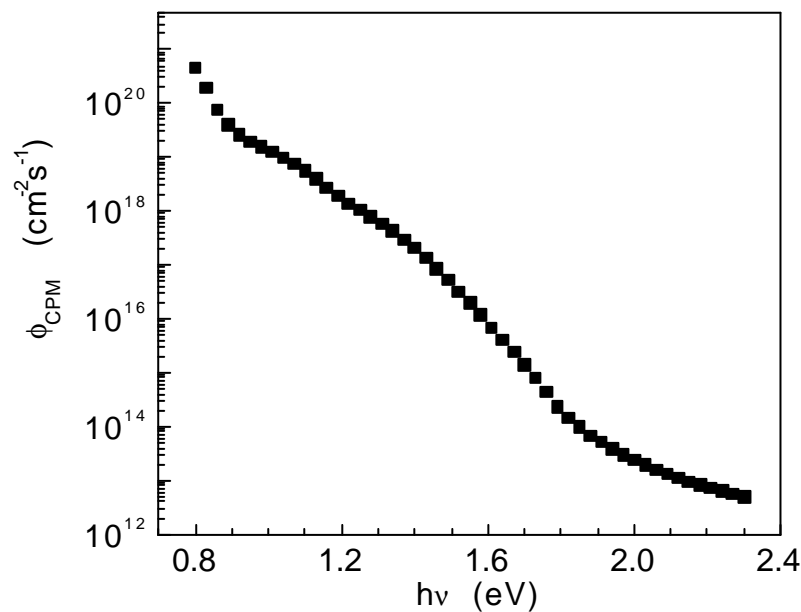


Figure D.10: Représentation du flux de la méthode CPM en fonction de l'énergie de photons.

Pour déterminer le coefficient d'absorption optique, nous inversons le spectre du flux $\phi_{\text{CPM}}(h\nu)$, ensuite nous le calons, à une énergie donnée, au spectre d'absorption total obtenu par l'intégrale du produit de convolution des densités d'états. Expérimentalement, le calage, qui se fait à l'aide d'un spectre d'absorption obtenu avec un spectre de transmission, doit tenir compte du domaine de validité de chaque technique. Dans le cas de notre simulation, nous avons choisi de faire le calage à la limite du domaine spectral de la moyenne et de la forte absorption, qui est l'énergie du gap $E_g=1.8$ eV. La constante K_{CPM} de la formule C.39 se calcule donc comme suit:

$$K_{\text{CPM}} = \phi_{\text{CPM}}(E_g) \alpha_{\text{TOT}}(E_g)$$

Nous pouvons donc déterminer le spectre d'absorption absolu de la CPM. Nous rappelons l'expression du coefficient d'absorption qui s'écrit:

$$\alpha_{\text{CPM}}(h\nu) = \frac{K_{\text{CPM}}}{\phi_{\text{CPM}}(h\nu)}$$

Nous rapportons sur la figure D.11 le spectre d'absorption optique obtenu par la CPM virtuelle.

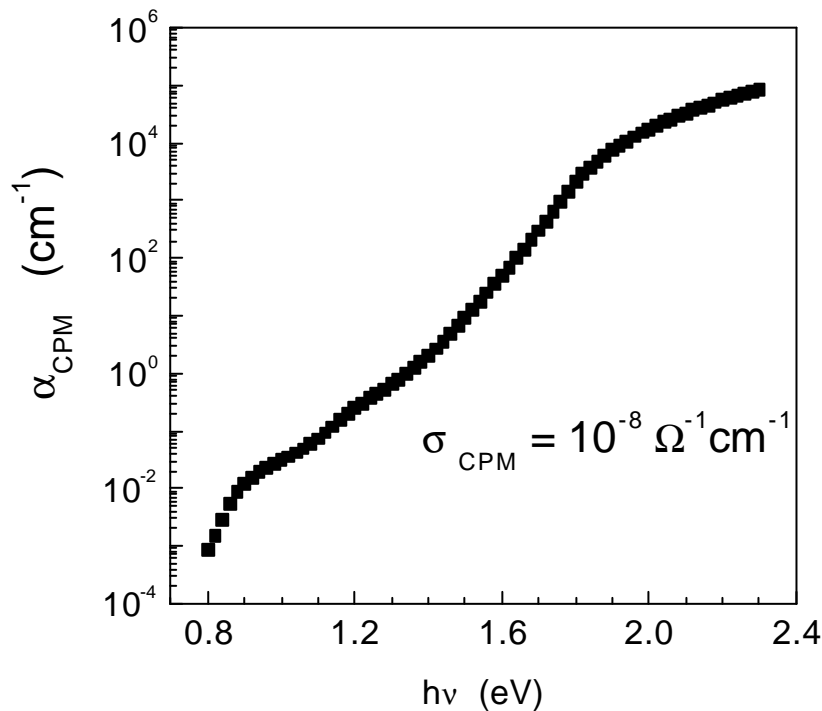


Figure D.11: Variation spectrale de l'absorption optique obtenue par l'expérience virtuelle de la CPM.

II.2. Comparaison entre le spectre d'absorption total et celui obtenu par la CPM

L'intérêt du calcul du spectre d'absorption optique par la méthode de la CPM est d'étudier le domaine de validité de cette méthode expérimentale de caractérisation ainsi que ses limites. Ceci nécessite une comparaison entre le spectre d'absorption optique total et celui obtenu par la CPM virtuelle. Pour cela, nous donnons dans un même graphe (Figure D.12) les deux spectres d'absorption optique déterminés à la même température $T=300$ K. Nous remarquons qu'au dessus de l'énergie 1.6 eV, dans le domaine de la forte et une partie de la moyenne absorption, les deux spectres se superposent. En dessous de 1.6 eV, les deux spectres continuent à décroître d'une manière monotone. Toutefois, pour l'énergie de photons allant de 1.2 à 1.6 eV, le coefficient d'absorption α_{CPM} obtenu par la CPM est légèrement supérieur au spectre d'absorption total α_{TOT} . En dessous de 1.2 eV α_{CPM} est sous-estimé par rapport à α_{TOT} .

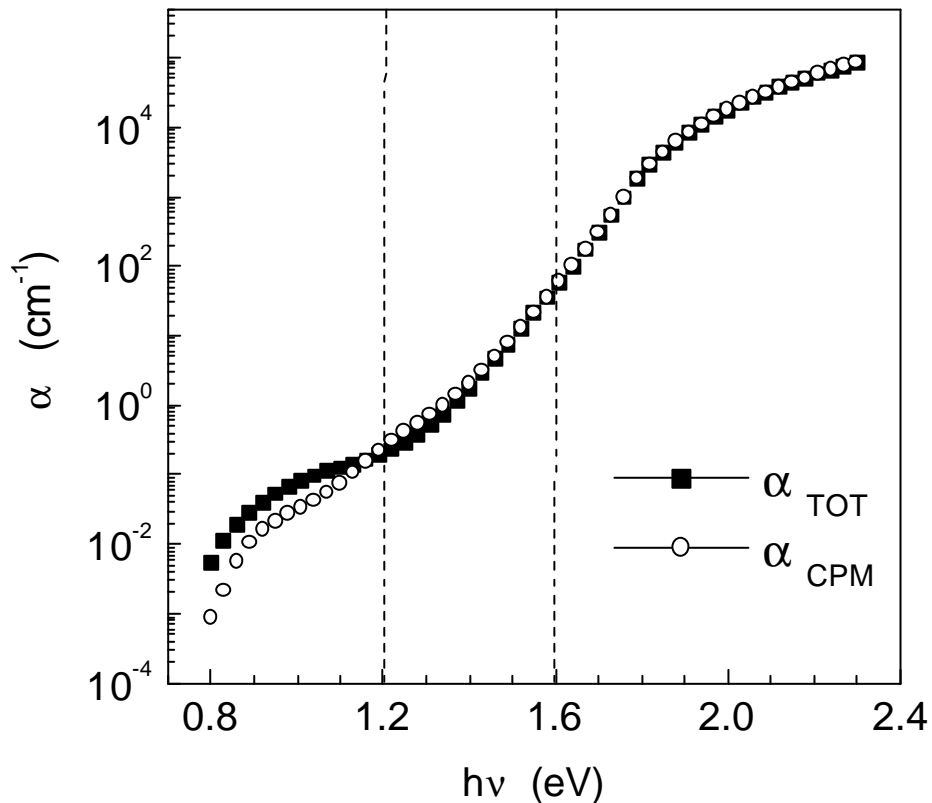


Figure D.12: Comparaison entre le spectre d'absorption total et celui obtenu par la CPM.

II.2.1. Etude des variations des densités de charge dans le cas de la CPM

Afin de bien comprendre la cause de la différence entre le spectre d'absorption total et celui obtenu par la CPM, nous reportons sur la figure D.13(a) les variations en énergie de photons des porteurs de charge libres n et p et sur la figure D.13(b) les densités de charges sur les états localisés du a-Si:H dans le cas de la simulation de la CPM. L'étude des variations des densités de charge nous renseigne sur les différents processus de recombinaison qui se produisent sur ces différents états. La recombinaison des électrons croît avec la croissance de Q_{db}^0 (D^0), Q_{db}^+ (D^+) et Q_{ct} (CBT). Celle des trous croît avec la croissance de Q_{vt} (VBT).

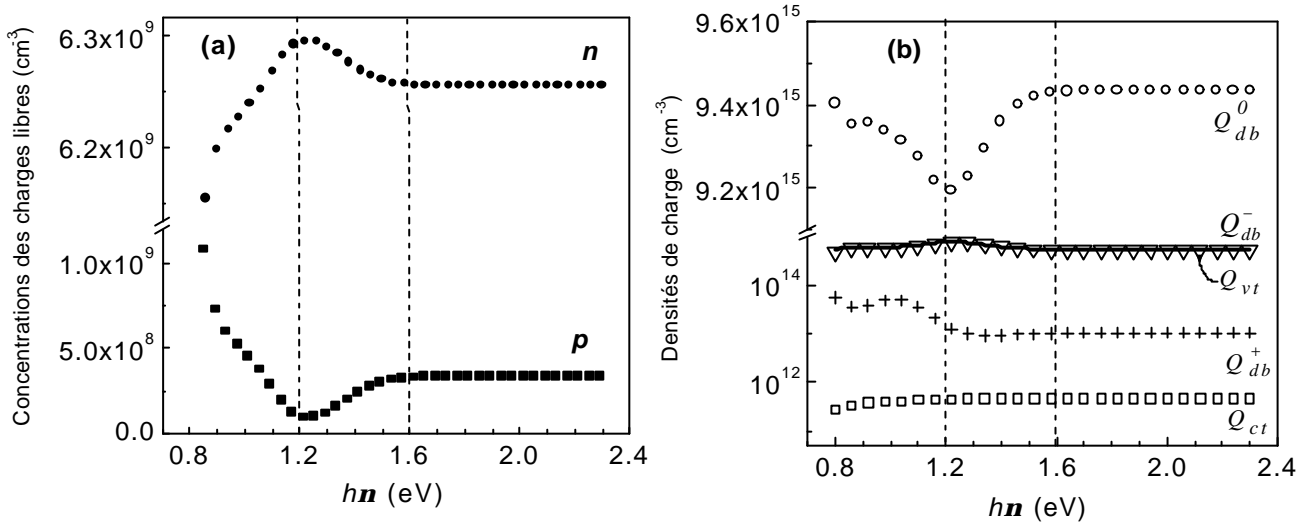


Figure D.13: Variation en énergie de photons, dans le cas de la simulation de la CPM, des
 (a) concentrations des porteurs de charge libres
 (b) densités de charge sur les états localisés.

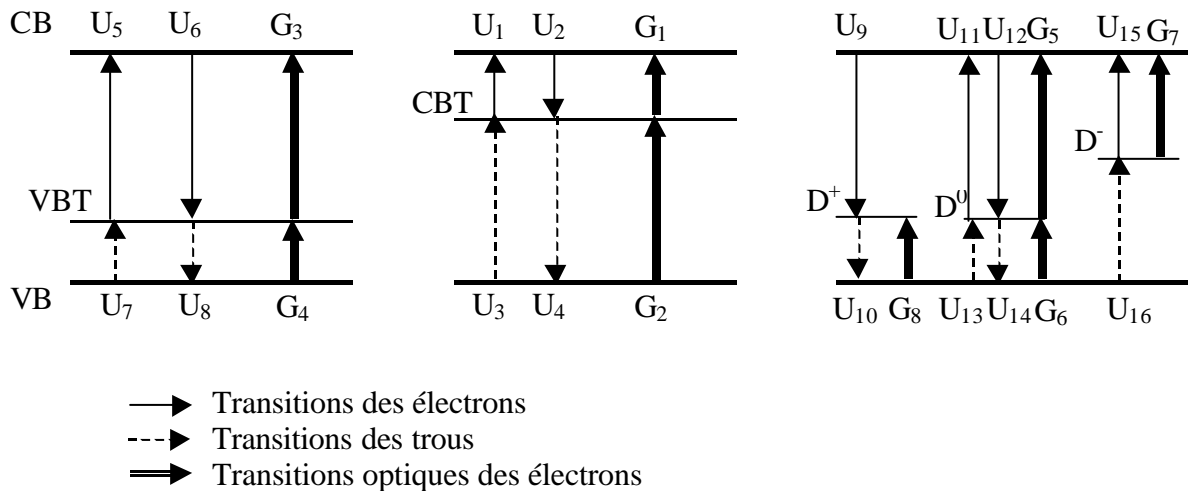
Nous remarquons, sur la figure D.13(a), que les concentrations des charges libres n et p sont constantes dans la gamme d'énergie supérieure à 1.6 eV. Ceci signifie que les durées de vies des électrons et des trous libres τ_n et τ_p sont constantes (équation B.23). C'est l'une des hypothèses de base de la CPM. Alors qu'en dessous de cette énergie, les concentrations n et p varient tout en gardant la photoconductivité constante. C'est la gamme d'énergie dans laquelle on observe des décalages entre le spectre d'absorption total et celui obtenu par la CPM. En effet, dans la gamme 1.2-1.6 eV, la concentration n augmente et p diminue dans le sens décroissant des énergies de photons. Alors que dans la gamme allant de 1.2 à 0.8 eV, n diminue pendant que p augmente. La croissance de la concentration des électrons libres n s'explique par le fait qu'il y a plus d'absorption dans cette zone. Ceci est en accord avec la légère surestimation du coefficient d'absorption de la CPM α_{CPM} . La décroissance de n pour des énergies de photons en dessous de 1.2 eV confirme également la sous-estimation de

α_{CPM} . Par contre, les variations des trous libres p n'expliquent pas la surestimation et la sous-estimation de α_{CPM} dans les gammes d'énergie citées ci-dessus. Ainsi les trous libres ne jouent pas de rôle direct dans la CPM. Dans ce qui suit, nous nous intéresserons uniquement processus de génération optique et de recombinaison faisant intervenir les électrons libres.

Sur la figure D.13(b), comme sur la précédente, au dessus de l'énergie 1.6 eV toutes les densités de charge sur les états localisés restent inchangées et donc les processus de recombinaison aussi. Nous remarquons que la neutralité se fait entre Q_{vt} et Q_{db}^- sur toute la gamme d'énergie. Nous observons une croissance de Q_{vt} dans la gamme d'énergie allant de 1.2 à 1.6 eV (dans le sens décroissant des énergies), ceci se traduit par la croissance du taux d'émission d'électrons ou par la croissance du taux de recombinaison des trous sur les états de la VBT. En regardant les variations de Q_{db}^- et Q_{db}^0 , nous constatons que Q_{db}^- augmente pendant que Q_{db}^0 diminue et que Q_{db}^+ et Q_{ct} restent pratiquement constants et faibles dans la même gamme d'énergie. En dessous de l'énergie 1.2 eV, nous remarquons que les variations précédentes s'inversent où Q_{db}^0 et Q_{db}^+ croissent pendant que Q_{db}^- et Q_{vt} décroissent dans le sens décroissant des énergies. Alors que la densité de charge Q_{ct} reste presque constante. Nous n'allons donc pas nous intéresser aux différents processus faisant intervenir les états de la CBT.

II.2.2. Etude des variations des taux de génération-recombinaison des électrons dans le cas de la CPM

A l'aide du schéma ci-dessous, représentant les différentes transitions électroniques et optiques entre les états localisés et les états paraboliques de la CB et de la VB, nous rappelons les taux de génération optique et les taux de recombinaison des électrons et ceux des trous sur les états de la VBT, la CBT et la DB respectivement.



Nous pouvons donner ainsi les taux nets de recombinaison des électrons U_{vtn} et U_{dbn} sur les états de la VBT et des liaisons pendantes respectivement.

$$U_{vtn} = U_6 - U_5 \quad (D.2)$$

$$U_{dbn} = U_9 - U_{11} + U_{12} - U_{15} \quad (D.3)$$

Nous pouvons remarquer à partir des expressions ci-dessus que si $U_h < 0$, il s'agit d'un centre émetteur d'électrons et que si $U_h > 0$, il s'agit d'un centre de recombinaison d'électrons. Dans ce qui suit, nous représentons les variations des taux de génération et celles des taux de recombinaison des électrons sur les états des liaisons pendantes et sur les états de la VBT obtenues par la simulation de la CPM. La génération optique interbande faisant intervenir la CB et la VB est aussi représenté. Nous pouvons ainsi voir la contribution de chacun de ces états dans les processus de génération-recombinaison vis à vis de la bande de conduction.

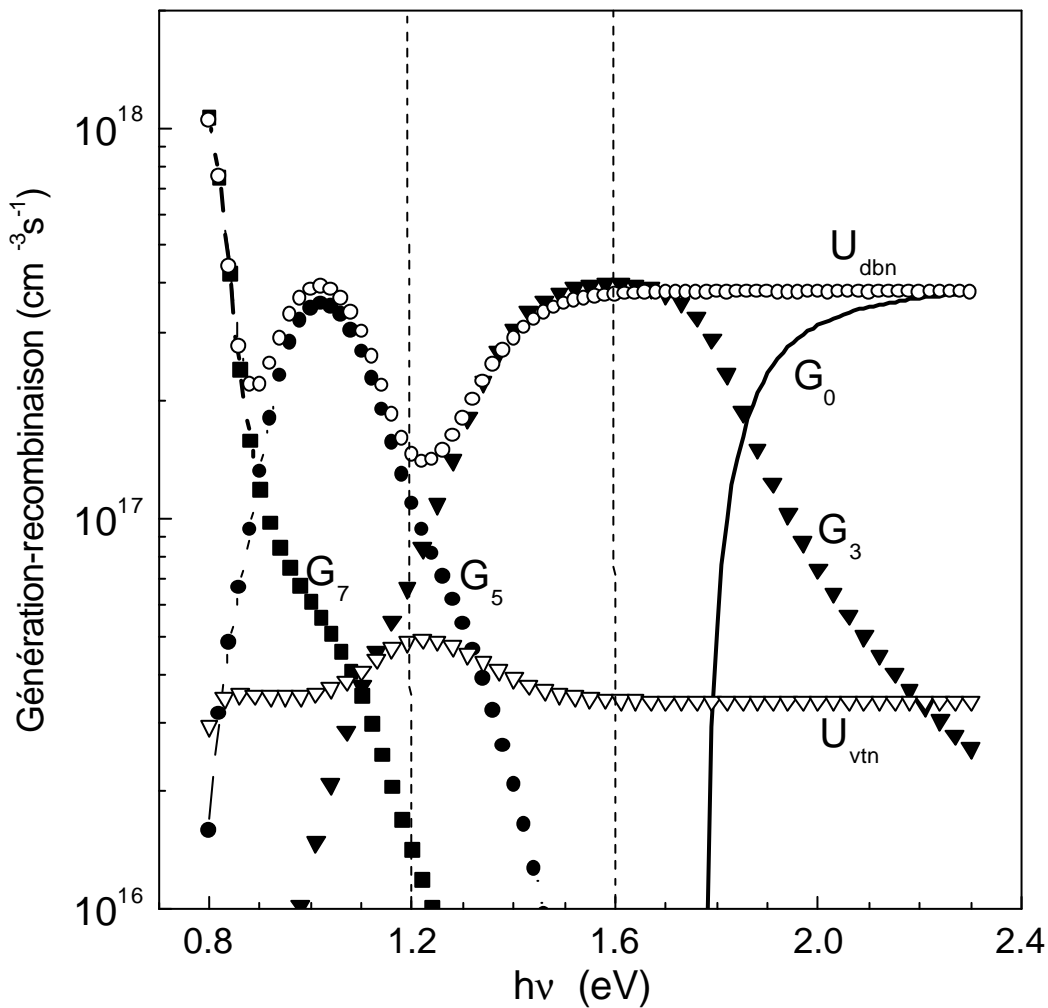


Figure D.14: Variation des taux de génération optique et de recombinaison des électrons sur les états des liaisons pendantes, de la VBT et des états étendus.

Nous représentons sur la figure D.14 les variations des taux de génération optique et de recombinaison sur les états des liaisons pendantes, de la VBT et des états étendus des bandes en fonction de l'énergie de photons. Nous remarquons sur cette figure que les taux nets de recombinaison des électrons U_{vtn} et U_{dbn} sont positifs dans toute la gamme spectrale. Les états de la VBT et ceux des liaisons pendantes sont donc des centres de recombinaison d'électrons. Pour des énergies de photons supérieures à 1.6 eV, les taux nets de recombinaison et la somme des taux de génération G_0 et G_3 sont constants. Ces derniers sont constants dans les gammes d'énergie où les états qui leurs sont associés interviennent. Ces variations sont en accord avec la constance des densités de charges dans cette même gamme d'énergie. Pour les énergies de photons allant de 1.6 à 1.2 eV, nous remarquons la variation des taux de recombinaison. Cependant, la variation de U_{vtn} est faible devant celle de U_{dbn} . La décroissance de U_{dbn} dans le sens décroissant des énergie est due à l'émission d'électrons par les états D^- . Ce qui explique la croissance des électrons libres dans cette gamme d'énergie. En dessous de l'énergie 1.2 eV, U_{dbn} croît dans le sens décroissant des énergies traduisant ainsi la recombinaison des électrons sur les états D^0 et D^+ . Ceci confirme la diminution de la concentration des électrons libres en dessous de cette énergie.

En conclusion, les écarts observés entre le spectre d'absorption total et celui obtenu par la CPM peuvent être expliqués par la prédominance de la contribution des électrons à l'absorption optique dans l'expérience virtuelle de la CPM. En particulier, ces écarts sont attribués aux processus de génération-recombinaison des électrons faisant intervenir les états des liaisons pendantes.

II.3. La CPM à différentes valeurs de la photoconductivité

Nous étudions dans cette partie l'influence de la valeur numérique de la photoconductivité que nous maintenons constante sur le spectre d'absorption optique obtenu par la CPM. Nous reportons sur la figure D.15 la variation de la photoconductivité en fonction du taux de génération optique. Nous montrons sur cette figure la position des différentes valeurs de la photoconductivité de la CPM. Le choix de ces valeurs n'est pas aléatoire. En effet, chaque valeur de la photoconductivité prise dans une gamme du taux de génération correspond à une valeur bien déterminée du facteur de Rose γ qui représente la pente sur cette courbe.

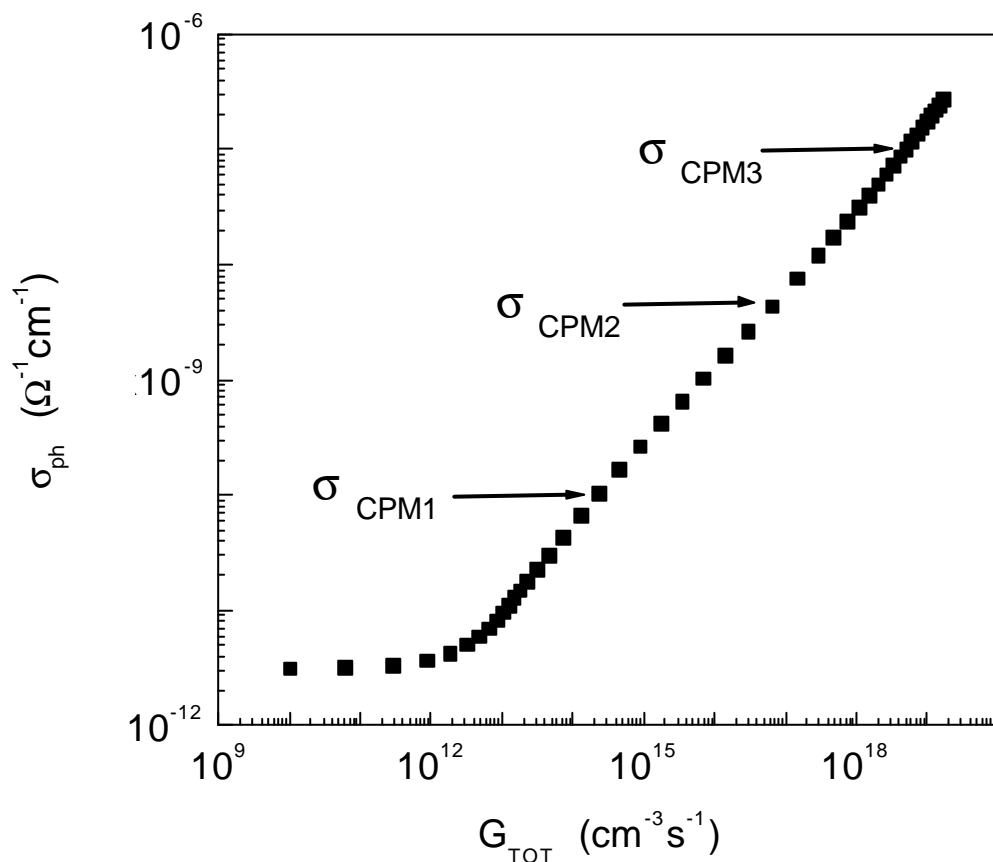


Figure D.15: Variation de la photoconductivité en fonction du taux de génération

Nous reportons sur la figure D.16 la variation spectrale du coefficient d'absorption optique obtenu par la CPM pour les différentes valeurs de la photoconductivité σ_{CPM} . Nous remarquons que dans la gamme d'énergie 1.2-1.6 eV, les trois spectres d'absorption optique obtenus par la CPM se superposent en restant légèrement supérieurs au spectre d'absorption total. Alors qu'en dessous de l'énergie 1.2 eV, lorsque la valeur photoconductivité de la CPM

augmente le coefficient d'absorption obtenu par la CPM est de plus en plus sous-estimé par rapport au spectre d'absorption total calculé par la méthode de convolution. Ceci s'explique par le fait que la croissance de la valeur numérique de la photoconductivité σ_{CPM} induit un fort flux de photons ϕ_{CPM} . Par ailleurs, nous savons que le flux de photons change l'occupation des centres électroniques sur les états localisés, et que si le flux de photons est de plus en plus important alors le changement de l'occupation sur ces états sera de plus en plus important. Par conséquent, pour avoir un spectre d'absorption par la CPM qui se rapproche le mieux du spectre d'absorption total, il est préférable de prendre une valeur de la photoconductivité la plus petite possible.

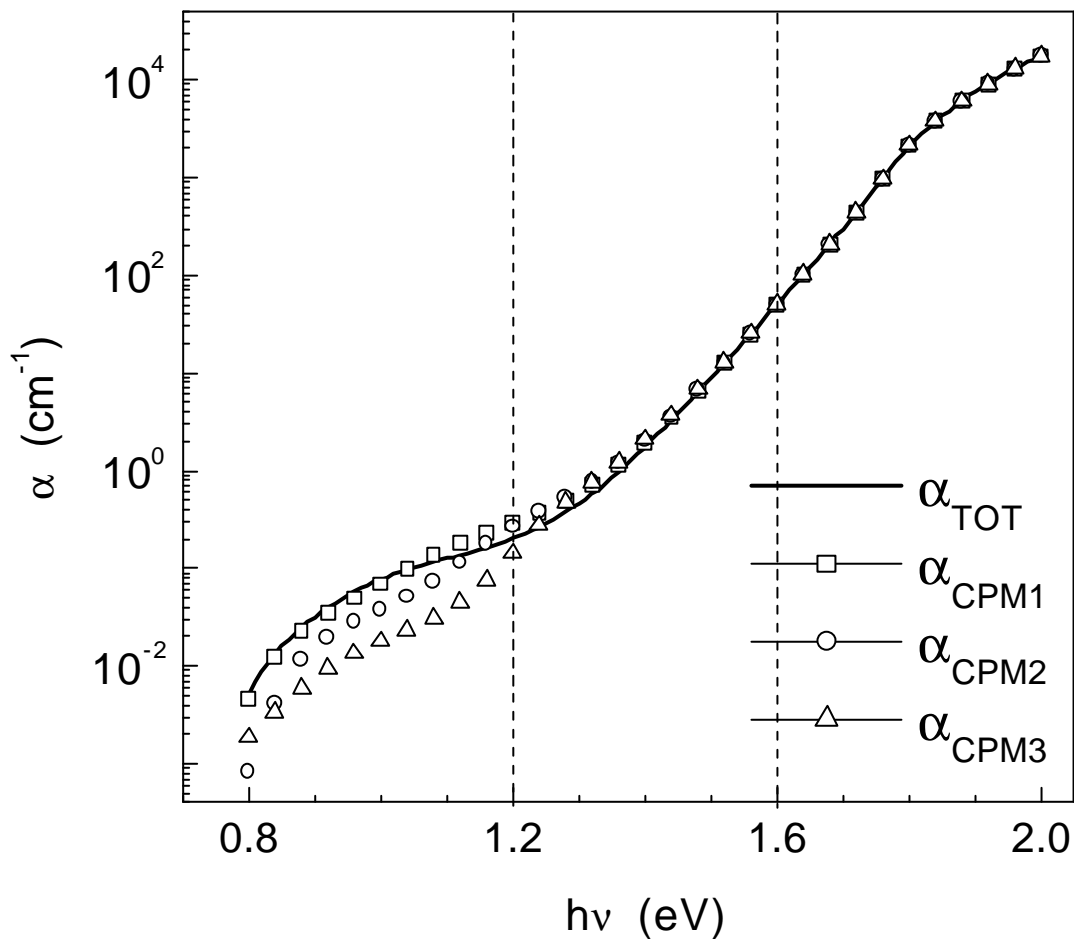


Figure D.16: Spectre d'absorption optique de la CPM pour différentes valeurs de la photoconductivité.

II.4. Vérification des conditions de validité de la CPM

Nous avons présenté dans le § B.III.2 deux conditions de validité que doit vérifier la CPM dites points de fonctionnement. Nous rappelons que ces deux conditions consistent à ce que le taux de génération total G_{TOT} (première condition) et l'exposant de la photoconductivité γ (seconde condition) soient constants.

Dans le but d'apporter d'autres explications au décalage que nous avons vu précédemment entre le coefficient d'absorption total et celui obtenu par la CPM, nous donnons sur la figure D.17 les variations de la photoconductivité σ_{ph} en fonction du taux de génération total G_{TOT} et sur la figure D.18 les variations de l'exposant de la photoconductivité γ en fonction de G_{TOT} pour différentes valeurs de l'énergie de photons $h\nu$. Les valeurs de l'énergie de photons sont prises de façon à couvrir toute la gamme spectrale: la forte, la moyenne et la faible absorption. Le tracé de γ en fonction de G_{TOT} est déduit à partir du tracé de $\sigma_{ph} = f(G_{TOT})$ en utilisant la relation de Rose comme suit:

$$\sigma_{ph} = C^{te} (G_{TOT})^\gamma \quad \Rightarrow \quad \gamma = \frac{d(\text{Ln } \sigma_{ph})}{d(\text{Ln } G_{TOT})}$$

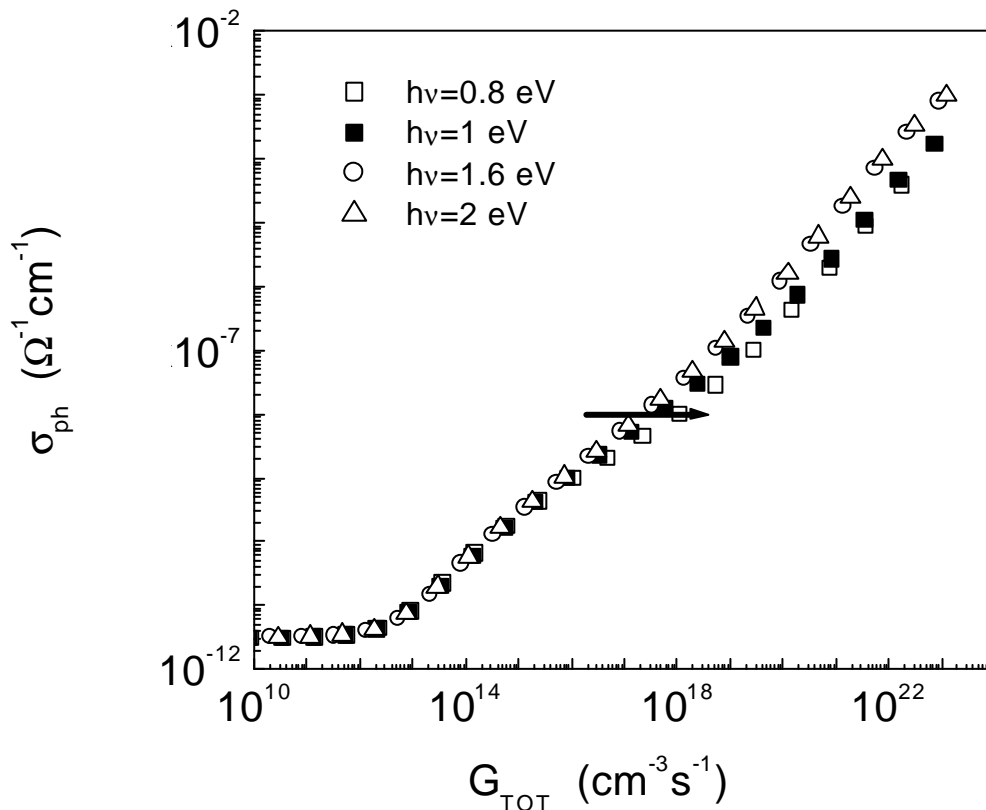


Figure D.17: Variations de la photoconductivité en fonction du taux de génération total pour différentes valeurs de l'énergie de photons.

Nous remarquons sur la figure D.17 qu'en dessous de la valeur $10^{-8} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ de la photoconductivité les différents profils de σ_{ph} se superposent pour les faibles taux de génération, c'est à dire pour un faible flux de photons. Cependant, pour un fort taux de génération optique les différents profils de σ_{ph} ne se superposent pas. En effet, pour une valeur donnée de la photoconductivité on remarque qu'il lui correspond différentes valeurs de G_{TOT} . Néanmoins, nous remarquons que G_{TOT} est constant sur toute la gamme pour des énergies de photons supérieures à 1.6 eV. Pour les énergies de photons $h\nu < 1.6$ eV, la première condition de la CPM ($G_{\text{TOT}}(h\nu) = c^{te}$) n'est pas vérifiée.

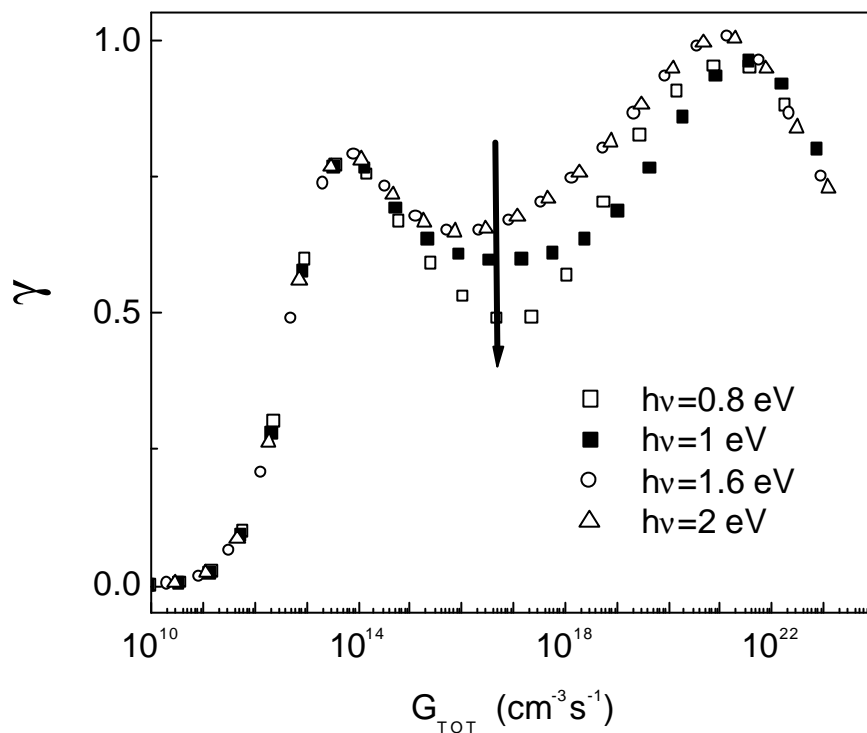


Figure D.18: Variations de l'exposant de la photoconductivité g en fonction du taux de génération total pour différentes valeurs de l'énergie de photons.

Sur la figure D.18, comme pour le tracé de σ_{ph} en fonction de G_{TOT} à des énergies $h\nu > 1.6$ eV, le profil de l'exposant de la photoconductivité γ est le même pour n'importe quelle valeur de G_{TOT} . Alors que pour $h\nu < 1.6$ eV, γ n'est pas constant pour les grands taux de génération. Dans ce cas aussi la seconde condition de validité de la CPM ($\gamma(h\nu) = c^{te}$) n'est pas vérifiée pour des énergies de photons $h\nu < 1.6$ eV.

L'intervention de la CPM dans les gammes de la faible et la moyenne absorption reste encore délicate. En effet, vu la complexité de la densité d'état du a-Si:H, il est difficile de

remonter à tous les paramètres microscopiques. En conclusion, nous pouvons dire qu'en dessous de l'énergie de photons $h\nu < 1.6$ eV, les deux conditions de validité de la CPM ne sont pas vérifiées.

III. Photoconductivité à double faisceau (DBP)

Nous présentons dans cette partie les résultats de la simulation de la photoconductivité à double faisceau (DBP) sur du a-Si:H. En préambule, nous commençons par donner les variations de la photoconductivité stationnaire calculée en fonction de l'inverse de la température pour le cas d'un flux de lumière unique. Cette variation présente un quenching thermique. Ensuite, nous donnons les variations en énergie de photons de la photoconductivité stationnaire dans le cas d'une illumination à double faisceau. Les variations en énergie de photons de la photoconductivité présente un quenching optique. Dans cette partie, nous étudions le quenching optique obtenu. L'étude du quenching optique est similaire à celle du quenching thermique, c'est à dire par l'étude des différents processus de recombinaison engendrant ce phénomène [56, 62].

III.1. Quenching thermique

En proposant un modèle conceptuel basé sur l'existence de deux classes de niveaux dans le gap, Rose [49] a expliqué le quenching thermique (voir § B.IV.2). A partir de ce modèle plusieurs auteurs ont expliqué leurs observations de la photoconductivité mesurée sur des matériaux cristallins ou amorphes. Ainsi, les singularités observées dans la photoconductivité nous renseignent sur la position énergétique des niveaux d'imperfection. En raison de la complexité de la densité d'états dans le a-Si:H, plusieurs travaux expérimentaux et de simulations numériques ont été effectués sur le a-Si:H pour extraire des paramètres propres au matériau.

Nous donnons sur la figure D.19 la variation de la photoconductivité stationnaire, sous lumière et sous obscurité, en fonction de l'inverse de la température pour le a-Si:H. Nous appliquons un flux lumineux de 10^{12} photons/cm²/s et une énergie de photons de 2 eV. Nos résultats sont en parfait accord avec ceux de la littérature [56,60,62].

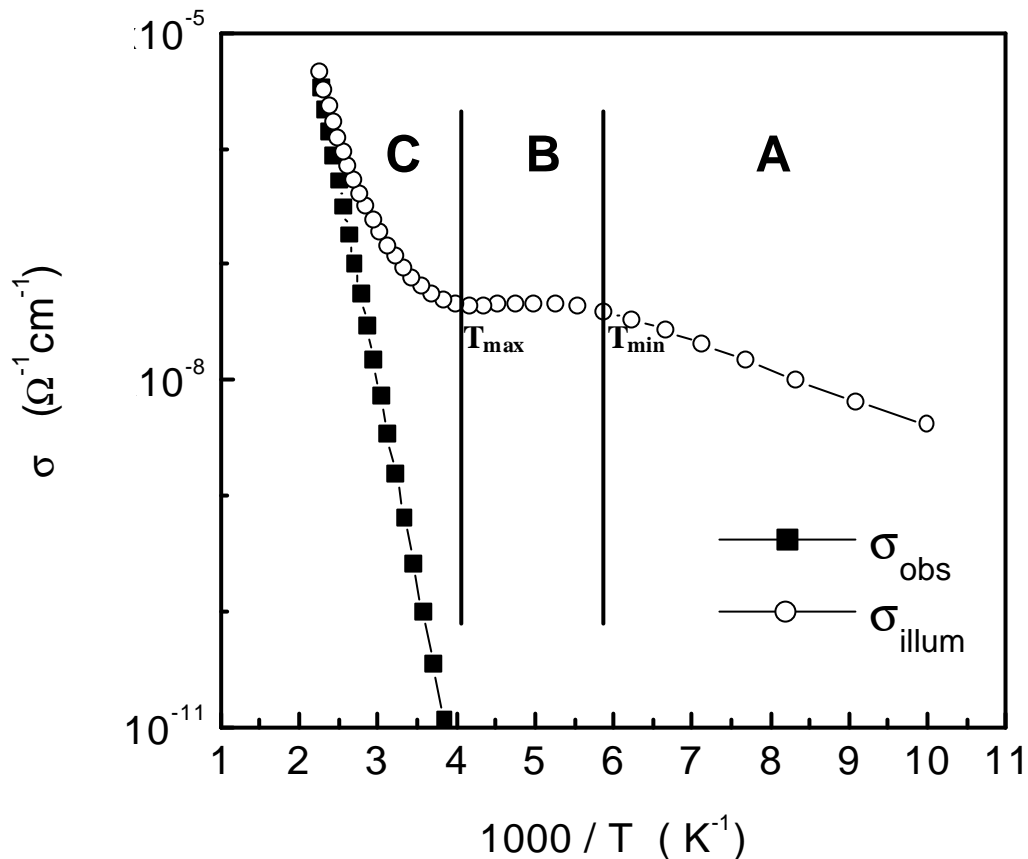


Figure D.19: Variation de la conductivité sous obscurité et sous lumière en fonction de l'inverse de la température.

Nous distinguons sur la figure D.19, trois régions pour la conductivité sous éclairage. Dans la région A, la photoconductivité est activée par une énergie thermique appelée énergie d'activation qui peut varier de 40 meV à 100 meV. La région B se caractérise par une diminution de la photoconductivité lorsque la température augmente, appelée quenching thermique allant d'une température T_{\min} jusqu'à une température T_{\max} . Enfin, la région C s'étend de T_{\max} jusqu'aux hautes températures. Dans cette région la conductivité totale sous lumière a tendance à rejoindre la conductivité sous obscurité. Nous remarquons que cette dernière croît en exponentielle en fonction de la température.

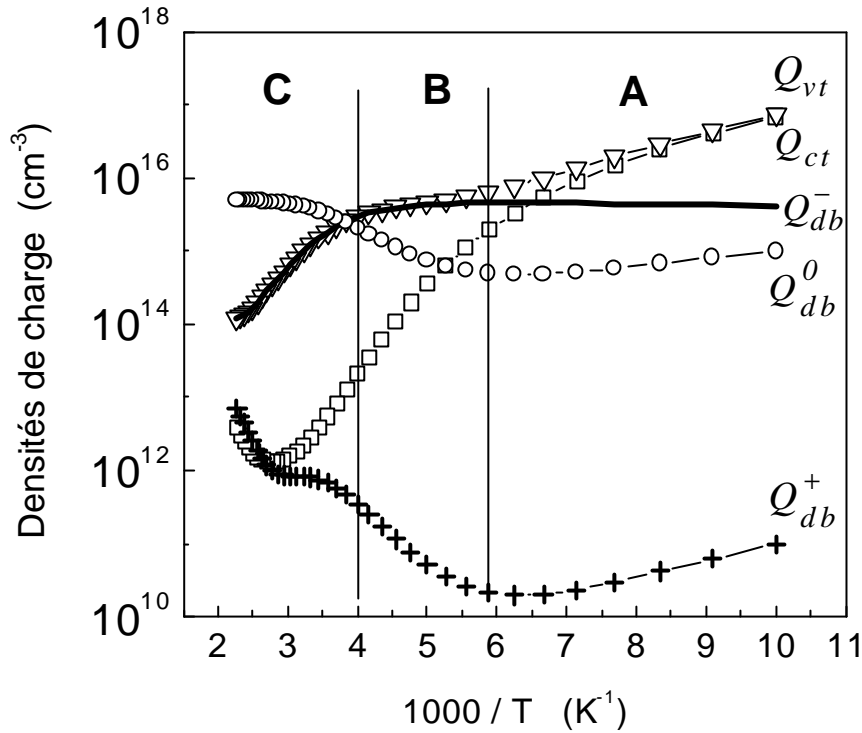


Figure D.20: Variation des densités de charges des états localisés du a-Si:H sous illumination en fonction de l'inverse de la température.

Afin d'expliquer l'allure générale de la conductivité en fonction de la température, plusieurs auteurs [60,62] ont étudié la dépendance des échanges électroniques entre les centres de recombinaison et les bandes étendues. L'étude des densités de charges des différents états localisés en fonction de la température, a montré que le quenching thermique de la conductivité stationnaire sous éclairage résulte de la croissance ou de la décroissance ralentie de la concentration totale des centres de recombinaison. Sur la figure D.20, nous reprenons les zones de température délimitées sur la figure D.19 pour décrire les variations des densités de charge en fonction de l'inverse de la température. En effet, le profil de la diminution de la Q_{vt} lorsque la température augmente concorde avec celui de la croissance de la conductivité sous illumination dans la zone A. Ainsi, c'est la Q_{vt} qui contrôle la recombinaison des électrons dans cette zone. Dans la zone B, nous remarquons l'intervention des liaisons pendantes, en particulier l'état D^0 . Pendant que Q_{db}^0 augmente, Q_{vt} diminue. Cependant, la recombinaison des électrons sur la VBT est plus importante ce qui explique la diminution de la conductivité totale sous illumination. Dans la zone C, nous remarquons que Q_{db}^0 devient plus importante que Q_{vt} et entraîne une diminution des centres de recombinaison, d'où l'augmentation de la conductivité totale sous illumination.

III.2. Quenching optique

Nous présentons dans cette partie les résultats de la simulation de la photoconductivité à double faisceau (DBP). Nous rappelons que cette méthode consiste à envoyer simultanément deux faisceau de lumière d'énergies de photons différentes sur le matériau. Le faisceau primaire est envoyé avec un ϕ_0 et une énergie de photons fixe supérieure au gap. Le faisceau secondaire, est envoyé avec un flux ϕ tel que $\phi \ll \phi_0$ et une énergie de photons dans la gamme située entre le proche infrarouge et l'ultraviolet.

Nous traçons sur la figure D.21 la photoconductivité, calculée à la température $T=300\text{ K}$, en fonction de l'énergie de la lumière secondaire. Nous remarquons l'apparition d'un quenching optique dans le domaine infrarouge. Cette diminution de la photoconductivité est de $9.142 \cdot 10^{-14} \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ soit $3 \cdot 10^{-3} \%$ en 0.7 eV . Ce qui est très faible. Nous reportons sur la figure D.22 les variations en énergie de photons des densités de charges libres des électrons n et des trous p . Nous remarquons que la concentration des trous croît avec la croissance des énergies de photon. Par contre celle des électrons n suit les mêmes variations que la photoconductivité. C'est à dire qu'elle présente aussi une diminution en 0.7 eV . Ceci confirme le type n du silicium amorphe hydrogéné. Cette remarque nous mène à étudier les différents processus de recombinaison qui régissent la concentration des électrons libres sans tenir compte de celles des trous.

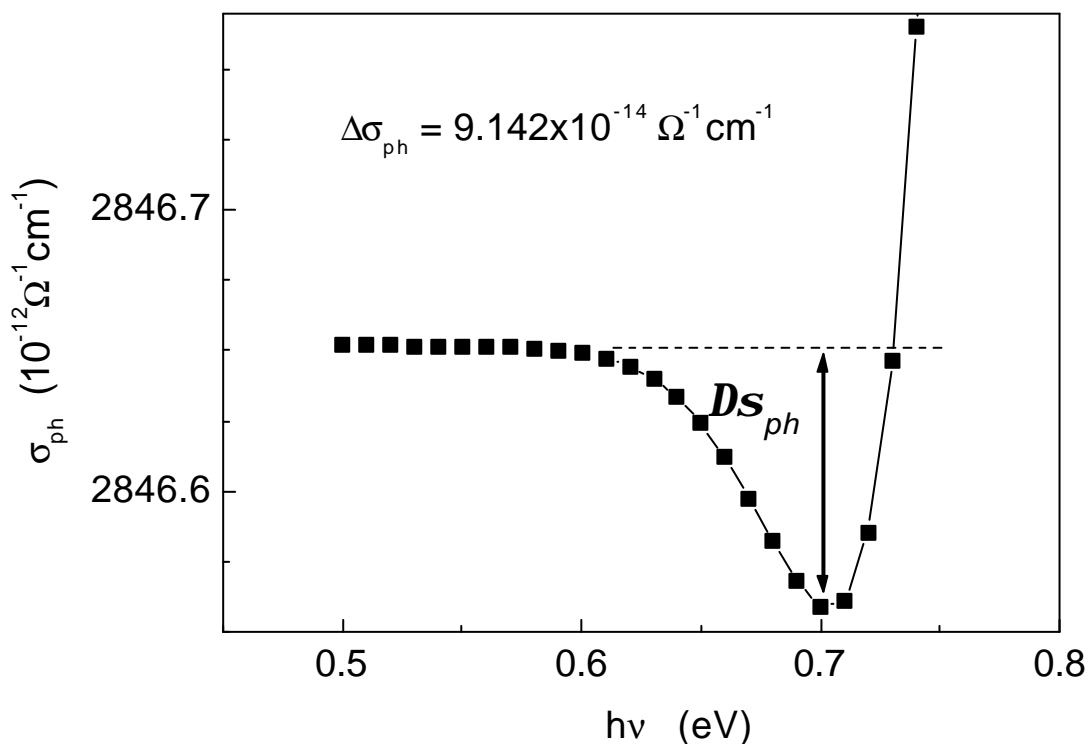


Figure D.21 : Evolution de la photoconductivité en fonction de l'énergie photons de la lumière secondaire.

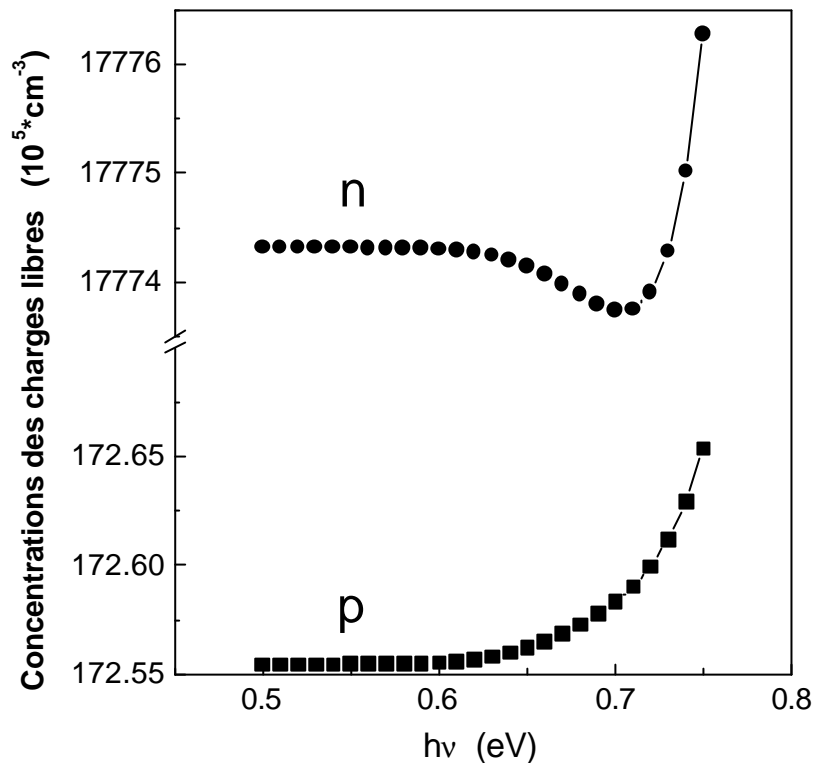


Figure D.22 : Variations en énergie de photons des concentrations des charges libres.

Le quenching optique de la photoconductivité, dans le cas des matériaux cristallins, a été expliqué par le modèle conceptuel de Rose (voir § B.IV.2). Dans ce cas l'énergie de la lumière secondaire où le quenching optique apparaît nous renseigne sur la position du niveau de classe II par rapport à la VB ou à la CB. Pour le cas du a-Si:H, possédant un continuum d'états localisés, la position en énergie où le quenching optique apparaît ne peut être reliée à un niveau précis de la densité d'états. Afin de bien comprendre la cause du quenching optique de la photoconductivité, nous reportons les variations en énergie de photons des densités de charges des états localisés. L'étude des variations des densités de charge nous renseigne sur les différents processus de recombinaison qui se produisent sur les différents états localisés. La recombinaison des électrons croît avec la décroissance de Q_{db}^0 (D^0), Q_{db}^+ (D^+), Q_{vt} (VBT) et avec la croissance de Q_{ct} (CBT).

Nous représentons sur la figure D.23 l'évolution des densités de charge sur les états localisés en fonction de l'énergie de photons $h\nu$ de la lumière secondaire. Nous limitons notre étude à la gamme d'énergie infrarouge où le quenching optique apparaît.

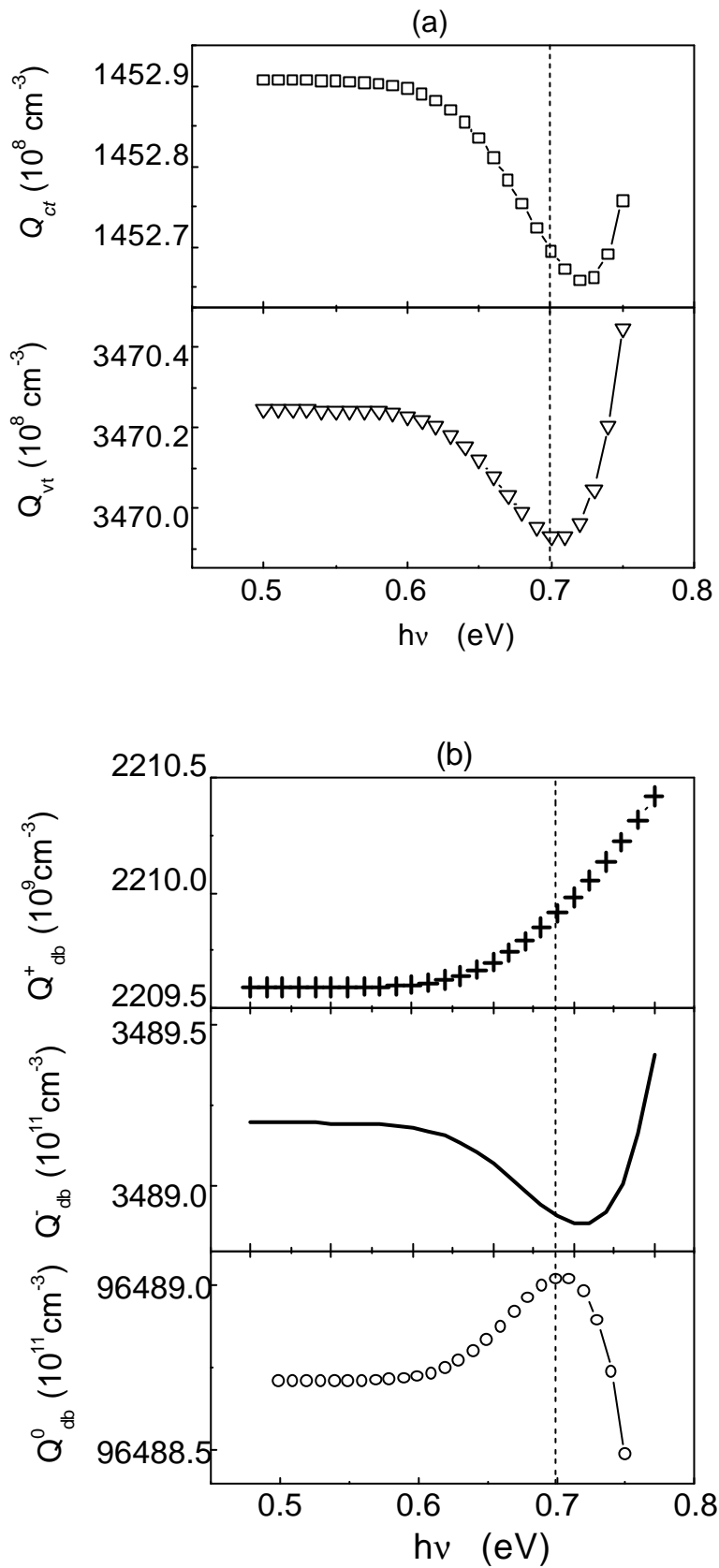


Figure D.23 : Densités de charges en fonction de l'énergie de photons de la lumière secondaire.

Sur la figure D.23(a), nous remarquons une décroissance de Q_{vt} et de Q_{ct} dans la gamme d'énergie de 0.6 eV à 0.7 eV. Ceci se traduit par la recombinaison d'électrons sur les états de la VBT et de la recombinaison des trous sur les états de la CBT.

Sur la figure D.23(b), nous remarquons une croissance de Q_{db}^+ et de Q_{db}^0 dans la gamme entre 0.6 et 0.7 eV. Cette variation de Q_{db}^+ exclue la possibilité de recombinaison des électrons libres sur les états D^+ . Nous observons aussi une diminution de Q_{db}^- dans la même gamme d'énergie. Deux types de transitions électroniques peuvent induire cette variation. Soit la capture d'un trou par l'état D^- : $D^- + t \rightarrow D^0$, soit l'émission d'un électron par D^- donc: $D^- \rightarrow D^0 + e$. Vu que la concentration des trous libres augmente dans cette gamme d'énergie l'émission électronique par les états D^- est plus probable.

Pour mieux comprendre les mécanismes qui engendrent le quenching optique de la photoconductivité du a-Si:H, nous reportons sur la figure D.24 les taux nets de recombinaison sur chaque état localisé vis à vis de la CB. Nous limitons l'étude des échanges électroniques aux transitions thermiques et optiques entre les états localisés et la CB seulement puisque nous avons vu que le quenching optique est dû à la diminution des électrons libres dans la CB. Nous donnons ainsi les taux nets de recombinaison des électrons U_{vtn} , U_{ctn} et U_{dbn} sur les états de la VBT, de la CBT et des liaisons pendantes respectivement.

$$U_{vtn} = U_5 - U_6 \quad (D.4)$$

$$U_{ctn} = U_1 - U_2 \quad (D.5)$$

$$U_{dbn} = U_{11} - U_{12} - U_9 + U_{15} \quad (D.6)$$

Nous pouvons remarquer à partir des expressions ci-dessus que si $U_h > 0$, il s'agit d'un centre émetteur d'électrons et que si $U_h < 0$, il s'agit d'un centre de recombinaison d'électrons.

Nous remarquons sur la figure D.24(a) que U_{vtn} est négatif. Ceci veut dire que la VBT est un centre de recombinaison des électrons, ce qui explique la diminution de la densité de charge des trous Q_{vt} . Sur la figure D.24(b) le taux net de recombinaison sur la CBT est constant en fonction de l'énergie de photons. Cependant, la densité de charge des électrons Q_{ct} décroît. Cette diminution est due à la recombinaison des trous venant de la VB. La description de l'allure de U_{dbn} est plus délicate à cause de la présence de trois états de charges différents. La diminution de U_{dbn} peut être due à la recombinaison des électrons sur l'un des états D^+ et D^0 ou sur les deux. Vu que Q_{db}^+ augmente, nous déduisons que la recombinaison des électrons se fait sur l'état D^0 . Par conséquent, nous pouvons dire que le quenching optique de

la photoconductivité est principalement à la recombinaison des électrons sur les états D^0 et sur les états de la VBT. Néanmoins, en raison du fort coefficient de capture des électrons des l'état D^0 par rapport à ceux de la VBT, la recombinaison des électrons libres est plus probable sur les états D^0 .

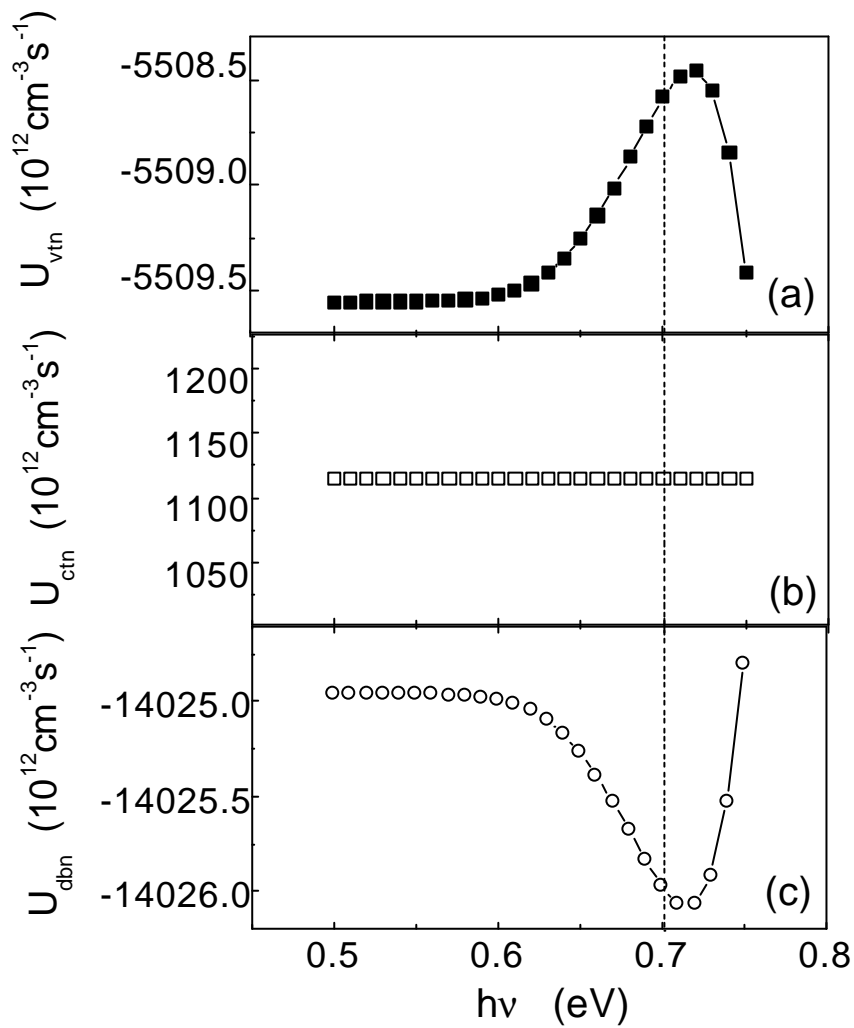


Figure D.24: Variations des taux nets de recombinaison des électrons sur les états localisés vis à vis de la CB.

IV. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté et discuté les résultats de la simulation numérique de la CPM et de celle de la DBP appliquées au a-Si:H. Nous avons décrit dans la première partie le spectre d'absorption optique calculé par la méthode de convolution des densités d'état faisant intervenir toutes les transitions optiques entre les états localisés et les états étendus des bandes. Nous avons donné dans la seconde partie un spectre d'absorption obtenu par la simulation de la CPM. Nous l'avons comparé au spectre d'absorption calculé par la méthode de convolution. Nous y avons relevé trois régions:

- Dans la gamme d'énergie de photons $h\nu > 1.6$ eV, les deux spectres d'absorption optique se superposent.
- Dans la gamme d'énergie de photons 1.2 eV $< h\nu < 1.6$ eV, la surestimation du spectre d'absorption α_{CPM} est due essentiellement à l'émission thermique des états D^- et à la génération optique des états de la VBT vers la bande de conduction.
- Pour $h\nu < 1.2$ eV, α_{CPM} devient inférieur au spectre d'absorption total et cela est dû à la recombinaison des électrons libres sur les états D^+ et sur les états de la VBT.

Nous avons aussi montré dans cette étude que le choix de la valeur numérique de la photoconductivité σ_{CPM} influe sur le spectre d'absorption α_{CPM} . Par ailleurs, nous avons vérifié les conditions de validité de la CPM. Nous avons vu que dans la gamme d'énergie $h\nu < 1.6$ eV, les deux conditions de validité de la CPM ne sont pas vérifiées.

Enfin, pour conclure ce chapitre, nous avons simulé l'expérience DBP et nous avons ainsi retrouvé le quenching thermique et optique de la photoconductivité dans le a-Si:H. L'étude des variations des densités de charges et de leurs taux génération optique et de recombinaison a montré que le quenching optique est dû à la présence des liaisons pendantes et particulièrement aux états D^0 .

Conclusion générale

Ce travail a porté principalement sur l'étude du spectre d'absorption optique obtenu par la méthode de convolution et par la simulation numérique de la méthode du photocourant constant (CPM) appliquée au silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Nous avons en premier calculé le coefficient d'absorption optique total en utilisant la méthode de convolution des densités d'états du a-Si:H. Ensuite, nous avons simulé la CPM. D'autre part, nous avons simulé la méthode de la photoconductivité à double faisceau (DBP) par laquelle nous avons mis en évidence le quenching optique (QO) de la photoconductivité pour le cas du a-Si:H.

Après avoir décrit dans le chapitre A la structure atomique du a-Si:H et les modèles de sa densité d'états, nous avons rappelé dans le chapitre B des généralités concernant le coefficient d'absorption optique et la photoconductivité. Dans ce chapitre, nous avons aussi décrit la CPM et la DBP ainsi que quelques résultats antérieurs de la littérature obtenus par ces deux méthodes.

Dans le chapitre C consacré à la modélisation, nous avons d'abord décrit le modèle de densité d'états (DOS) du a-Si:H utilisé dans notre simulation. Dans ce modèle nous avons pris soin de vérifier les conditions de raccordement entre chaque bande d'états étendus et sa queue de bande. Ensuite, nous avons présenté les expressions des taux de recombinaison et des taux de génération optique sur tous les états constituant la DOS du a-Si:H. Les expressions des fonctions d'occupation sont adaptées aux cas sous obscurité et sous lumière. Toutes ces expressions sont nécessaires pour le calcul des concentrations de charges libres n et p . Le modèle et la procédure de calcul ainsi employés dans la simulation nous ont permis de déterminer les spectres d'absorption optique par l'expression de convolution et par la CPM. En utilisant la même procédure pour n et p , nous avons simulé la DBP en réadaptant toutes les expressions pour le cas de deux faisceaux lumineux.

Le chapitre D est consacré aux résultats de la simulation numérique et à leurs discussions. Dans la première partie, nous avons présenté l'étude de l'absorption optique par la méthode de convolution. Nous avons d'abord justifié l'utilisation de la forme en gaussienne des états des liaisons pendantes. Par l'étude du formalisme de l'absorption, nous retrouvons l'allure générale du spectre d'absorption optique en utilisant l'expression de la matrice de transition de Cody. Nous avons ensuite étudié l'intervention dans l'absorption optique des différents états qui composent la densité d'états du a-Si:H.

La partie importante du travail que nous avons présenté est consacrée à l'étude de la CPM. En effet, nous avons montré par le calcul en utilisant les hypothèses de la CPM, que cette méthode permettait de retrouver une partie du spectre d'absorption. En effet, la comparaison entre le spectre d'absorption total et celui obtenu par la CPM virtuelle montre qu'au dessus de l'énergie 1.6 eV, les deux spectres se superposent parfaitement. En dessous de cette énergie, des décalages entre les deux spectres apparaissent. L'étude des variations en

énergie de photons des densités de charge dans les états localisés et de leurs taux nets de recombinaison et de génération optique nous a permis d'expliquer ces différences. Par ailleurs, nous avons remarqué qu'en dessous de cette énergie l'ordre de grandeur du flux de photons ϕ_{CPM} est important et par conséquent il change l'occupation des états localisés. Les courbes d'absorption α_{CPM} , à différentes valeurs de la photoconductivité σ_{CPM} maintenue constante, ont montré que α_{CPM} a tendance à plus se rapproché du spectre d'absorption total lorsque σ_{CPM} diminue. D'autre part, les tracés de la photoconductivité et de son exposant en fonction du taux de génération ont permis de vérifier les conditions de validité de la CPM.

Dans la dernière partie du chapitre D, nous nous sommes intéressés à l'influence d'un second flux de lumière sur la photoconductivité en fonction de l'énergie de photon sur le matériau a-Si:H. C'est la simulation de la méthode de la photoconductivité à double faisceau. Cette méthode utilisée généralement sur les semiconducteurs cristallins nous a permis de mettre en évidence le QO de la photoconductivité. Contrairement au cas des semiconducteurs cristallins qui présentent des états discrets particuliers dans le gap, il est difficile d'expliquer le QO par le modèle de Rose dans le a-Si:H à cause de la complexité de sa densité d'états. Dans notre travail, nous avons expliqué le QO par l'étude des densités de charge, des taux de génération optique et des taux nets de recombinaison des électrons en fonction de l'énergie de photons. Nous avons attribué l'apparition du QO à l'existence des états des liaisons pendantes. D'autre part, il est à signaler que ce QO est très faible pour les paramètres que nous avons utilisés, tels que principalement le flux et la température.

Pour conclure, nous pouvons dire que nous avons réalisé un programme numérique permettant le calcul du coefficient d'absorption optique par la méthode de convolution et la simulation de la CPM et de la DBP appliquée au a-Si:H. Nous avons ainsi étudié le domaine de validité de la CPM. L'étude de la CPM peut être plus poussée en regardant l'influence de la température sur l'écart entre le spectre d'absorption total et celui obtenu par la CPM, particulièrement aux basses températures.

Il serait aussi intéressant de voir l'influence de la température, de la concentration de défauts et du flux de photons appliqué de la lumière primaire et secondaire sur le QO. Cependant, la faisabilité de l'expérience réelle de la DBP sur du a-Si:H n'est pas garantie à cause de l'effet Staebler-Wronski (apparition d'effets métastables suite à une exposition prolongée à la lumière). Néanmoins, il existe des semiconducteurs plus ordonnés présentant des structures de densités d'états proches du a-Si:H, tel que le silicium microcristallin ($\mu\text{c-Si:H}$) par exemple, qui semblent présenter une meilleure stabilité.

Bibliographie

- [1] R. C. Chittik, J. H. Alexander, H. F. Sterling, *J. Electrochemical Soc.* 116 (1969) 77.
- [2] W. E. Spear, P. G. Lecomber, *Phil. Mag.* 33 (1976) 935.
- [3] W. E. Spear, R. J. Loveland, A. Alsharbaty, *J. of Non-Cryst. Sol.* 15 (1974) 410.
- [4] M. M. Brodsky, R. S. Tittle, K. Weiser, G. D. Petit, *Phys. Rev. B* 1 (1970) 2632.
- [5] W. Paul, A. J. Lewis, G. A. N. Connel, T. D. Monstakas, *Sol. stat. Comm.* 20 (1979) 969.
- [6] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* 109 (1958) 1492.
- [7] N. F. Mott, E. A. Davis, "Electronic Process in Non Crystalline Solids Materials" (1979).
- [8] M. Cohen, H. Fritzche, S. R. Ovshinsky, *Phys. Rev. Lett.* 22 (1969) 1065.
- [9] N. F. Mott, *Phil. Mag.* 19 (1969) 835.
- [10] M. Cohen, S. R. Ovshinsky, *J. Non-Cryst. Sol.* 4 (1970) 391.
- [11] H. Okamoto, H. Kida, Y. Hamakawa, *Phil. Mag.* B49 (1984) 231.
- [12] K. Chew, Rusli, S. F. Yoon, J. Ahn, Q. Zhang, V. Ligatchev, *J. Appl. Phys.* 91 (2002) 4319.
- [13] T. S. Moss, G. J. Burrell, B. Ellis, "Semiconductor Opto-Electronics", Butterworths (London 1973).
- [14] A. S. Ferlauto, G. M. Ferreira, J. M. Pearce, C. R. Wronski, R. W. Collins, *J. Appl. Phys.* 92 (2002) 914.
- [15] J. Tauc, R. Grigorovici, A. Vancu, *Phys. Stat. Sol.* 15 (1966) 627.
- [16] R. S. Crandel " Photoconductivity and transport in hydrogenated amorphous silicon", *Solar Cells* 2, (1980) 319.
- [17] F. Urbach, *Phys. Rev.* 92, (1953) 1324.
- [18] W. B. Jackson, N. M. Amer, *Phys. Rev. B* 25, (1982) 5559.
- [19] N. Wyrch, F. Finger, J. J. McMahon, M. Vanecek, *J. Non-Cryst. Sol.* 137 (1991) 347.
- [20] Y. Bouizem, A. Belfedal, J. D. Sib, L. Chahed, *Optics Comm.* 178 (2000) 111.
- [21] T. Globus, G. Ganguly, P. R. I. Cabarrocas, *J. of Appl. Phys.* 88, (2000) 1907.

- [22] H. G. Grimmeis, Lebedo, *J. Appl. Phys.* 46 (1975) 2155.
- [23] M. Vanecek, J. Kocka, J. Stuchlik, A. Triska, *Sol. Stat. Comm.* 39 (1981) 1199.
- [24] J. A. Schmidt, R. R. Koropecski, R. D. Arce, F. A. Rubinelli, R. H. Buitrago, *Thin Solids Films* 376 (2000) 267.
- [25] A.V.Fenukhin, A.G.Kazanski, A.G.Kolosko, E.I.Terukov, A.V.Ziminov, *J. Non-Cryst. Sol.* 352 (2006) 1668.
- [26] J. D. Joannopoulos, Marvin L. Cohen, *Phys. Rev. B* 7 (1973) 2644.
- [27] P. Lawaetz, *Phys. Rev. B* 1, 4 (1971) 3460.
- [28] M. Vanecek, J. Kocka, J. Stuchlik, . Kozisek, O. Stika, A. Triska, *Sol. Energy Mater.* 8 (1983) 411.
- [29] I. Sakata, M. Yamanaka, S. Numase, Y. Hayashi, *J. Appl. Phys.* 71 (1992) 4344.
- [30] G. D. Cody, B. G. Brooks, and B. Abeles, *Sol. Energy Mater.* 4 (1982) 231.
- [31] N. K. Hindley, *J. Non-Cryst. Sol.* 5 (1970) 17.
- [32] W. B. Jackson, S. M. Kelso, C. C. Tsai, J. W. Allen, S. J. Oh, *Phys. Rev. B.* 31 (1985) 5187.
- [33] A. Mettler, N. Wyrsh, A. Shah, *J. Non-Cryst. Sol.* 164 (1993) 427.
- [34] Saad M. Malik, Stephen K. O'Leary, *Appl. Phys. Lett.* 80 (2002) 790
- [35] S. Karrer O'Leary, *Appl. Phys. Lett.* 82 (2003) 2784.
- [36] I. M. P. Aarts, M. C. M. Van de Sanan, W. M. M. Kessels, *J. of Non-Cryst. Sol.* 338 (2004) 408.
- [37] R. N. Hall, *Phys. Rev.* 87 (1952) 387 and W. Shockley, W. T. Read, *Phys. Rev.* 87 (1952) 835.
- [38] A. Fedala, Thèse de Magister en Physique, USTHB, Alger (2002).
- [39] K. Pierz, W. Fuhs, H. Mell, *Phil. Mag. B* 63 (1991) 123.
- [40] F. Siebke, H. Stiebig, R. Carius, *Sol. Energy Mater.* 49 (1997) 7.
- [41] L. Chahed, M. L. Thèye, *Phys. Rev.* 43 (1991) 1448.
- [42] K. Hattori, S. Fukuda, K. Nishimura, H. Okamoto, Y. Hamakawa, *J. Non-Cryst. Sol.* 164 (1992) 4344.

- [43] R. Platz, R. Bruggemann, G. H. Baner, *J. Non-Cryst. Sol.* 71 (1993) 355.
- [44] J. A. Schmidt, F. A. Rubinelli, *J. Appl. Phys.* 83 (1998) 339.
- [45] T. Mohammed-Brahim, Thèse de Doctorat ès Sciences Physiques, Université de Paris Sud (1982).
- [46] Y. Almeriouh, J. Bullo, P. Cordier, M. Gauthier, G. Mawawa, *Phil. Mag. B*, 63 (1991) 1015.
- [47] P. D. Persans, H. Fritzsche, *Phys. Rev. C* 4, 42 (1981) 597.
- [48] R. H. Bube, "Photoconductivity of solids", (John Wiley and Sons, Inc., 1978).
- [49] A. Rose, "Concepts in Photoconductivity and Allied Problems" (Wiley, New York, 1963).
- [50] I. Balberg, R. Naidis, *Phys. Rev. B*. 57 (1998) 6783.
- [51] J. G. Simmons, G. W. Taylor, *Phys. Rev. B*. 4 (1971) 502.
- [52] A. Rose, *Phys. Rev.* 97 (1955) 322.
- [53] C. R. Wronski, B. Abeles, T. Tiedje, G. D. Cody, *Sol. Stat. Comm.* 44 (1982) 1423.
- [54] F. Vaillant, D. Jousse, J. -C. Bruyere, *Phil. Mag. B*. 57 (1988) 649.
- [55] T. Smail, Thèse de Magister en Physique, USTHB, Alger (1991).
- [56] T. Smail, T. Mohammed-Brahim, *Phil. Mag. B*. 64 (1991) 675.
- [57] L. Jiao, I. Chen, R. Collins, C. R. Wronski, N. Hata, *J. Appl. Phys.* 72 (1998) 1057.
- [58] Stephen. K. O'Leary, Saad M. Malik, *J. Appl. Phys.* 92 (2002) 4276.
- [59] L. Ley, in *Topics in Applied Physics*, "Hydrogenated Amorphous silicon II", edited by J. D. Joannopoulos and G. Lukovisky, (Springer Verlag, 1984) p61.
- [60] T. Smail, M. Aoucher, Mohammed-Brahim, *Rev. Energ. Ren. :ICPWE* (2003) 87.
- [61] F. Demichelis, E. Minetti-Mezzetti, A. Tagliaferro, E. Tresso, *J. Appl. Phys.* 59 (1986) 611.
- [62] Minh Q. Tran, *Phil. Mag. B*. 72 (1995) 35.