

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE HOUARI BOUMEDIENE
FACULTÉ DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de Magister

En: PHYSIQUE

Spécialité: PHYSIQUE DES MATÉRIAUX

*Par: **BOUGCHICHE-SAHEB Djamila***

Sujet

Simulation et modélisation de la méthode du photocourant
modulé (MPC) appliquée au silicium amorphe hydrogéné

Soutenu publiquement, le 28 octobre 2009, devant le jury composé de:

Mme CHAFA Fawzia	Professeur à l'USTHB	Présidente
Mme SMAIL Tania	Maître de Conférences/A à l'USTHB	Directrice de mémoire
M. NEMOUCHI Messaoud	Maître de Conférences/A à l'USTHB	Examineur
M. KELLOU Abdelhafid	Maître de Conférences/A à l'USTHB	Examineur
Mme RAHAL Abba	Maître de Conférences/A à l'USTHB	Examinatrice

Remerciements

Ce travail a été effectué au Laboratoire de Physique des Matériaux, au sein de l'Equipe Couches Minces et Semiconducteurs de la Faculté de Physique de l'U.S.T.H.B.

J'exprime ma gratitude à feu Professeur Moussa AOUCHER pour m'avoir acceptée dans son laboratoire, et de m'avoir initiée à la recherche. Je lui suis reconnaissante de m'avoir permis de travailler avec lui et me permettre d'apprécier ses qualités aussi bien en tant que chercheur qu'humaines.

Je tiens particulièrement à remercier madame Tania SMAIL, Maître de Conférences à l'U.S.T.H.B., qui a dirigé ce travail, pour les discussions fructueuses que nous avons eues au sujet des interprétations physiques des résultats de ce travail, auxquelles j'ai pris un réel plaisir, pour sa patience et son soutien.

J'exprime ma profonde gratitude à madame Fawzia CHAFA, Professeur à l'U.S.T.H.B., pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

Que messieurs Messaoud NEMOUCHI et Abdelhafid KELLOU, Maîtres de Conférences à l'U.S.T.H.B., trouvent ici l'expression de ma respectueuse reconnaissance pour avoir accepté de faire partie de mon jury.

Je remercie également madame Abla RAHAL, Maître de Conférences à l'U.S.T.H.B., pour ses encouragements, ses conseils, et pour avoir accepté d'être dans mon jury.

J'adresse mes remerciements à tous les membres de l'Equipe "Couches Minces et Semiconducteurs" pour leur aide et leurs encouragements.

Enfin, je témoigne toute ma gratitude envers ma famille pour leur soutien, et leur patience.

Je dédie cette thèse à ma mère,

Abdelkrim, Yacine et Zineddine.

Table des matières

INTRODUCTION.....	1
<u>Chapitre A: Généralités sur le matériau.....</u>	3
A.1. Le matériau a-Si:H.....	3
A. 1. 1. Arrangement atomique du silicium amorphe.....	3
A. 1. 2. Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) et effet de l'hydrogénation.....	4
A. II. Modèles de densité d'états des semiconducteurs amorphes.....	5
A. II. 1. Modèle de C.F.O.....	6
A. II. 2. Modèle de Mott et Davis.....	6
A. II. 3. Notion de gap de mobilité.....	8
A. III. Modèle standard de densité d'états du a-Si:H.....	8
<u>Chapitre B: Description de la technique du photocourant modulé.....</u>	10
B. I. La photoconductivité.....	10
B.I.1. Génération-Recombinaison.....	11
B.I.1.a. Génération optique.....	11
B.I.1.b. Mécanismes de Recombinaison.....	12
B.I.2. Formulation et définition de la Photoconductivité.....	14
B. II. Méthodes de détermination de la densité d'états.....	15
B. II. 1. La Méthode du photocourant constant (MPC).....	16
B. II. 2. Spectroscopie de déflexion photo thermique (PDS).....	16
B. II. 3. La méthode du transitoire du photocourant (TPC).....	17
B.III. Méthode du Photocourant modulé (MPC).....	18
B. III. 1. Description.....	18
B. III. 2. Rétrospective des travaux antérieurs sur le MPC.....	19

<u>Chapitre C: Modélisation et mise en équations</u>	23
C.I. Introduction	23
C.II. Modèle de densité d'états utilisé pour le a-Si:H	23
C.II.1. Densité des queues de bandes.....	24
C.II.2. Densité des liaisons pendantes.....	25
C.III. Bilans des échanges électroniques via les états localisés	25
C.III.1. Bilans sur les queues de bandes.....	25
C.III.2. Bilans sur les liaisons pendantes.....	27
C.III.3. Equilibre thermodynamique.....	29
C.IV. Formulation théorique du photocourant modulé	31
C.IV.1. Introduction.....	31
C.IV.2. Occupation des états localisés dans les deux régimes (dc et ac).....	33
C.IV.3. Calcul du MPC.....	37
C.IV.4. Formules de reconstruction de la densité d'états.....	38
C.VI. Paramètres et procédure de calcul	41
<u>Chapitre D: Simulation numérique du MPC et reconstruction de la densité d'états</u>	44
D. I. Introduction	44
D. II. Reconstruction de la densité d'états en régime HF	44
D. III. Densité d'états et occupation des queues de bandes	49
D. IV. Effets des états localisés	50
D. IV. 1. Les queues de bandes.....	50
D. IV. 2. Les liaisons pendantes.....	56
D. IV. 2. a. Effet de la concentration N_{db}	56
D. IV. 2. b. Effet du niveau E_{db}	58

D. V. Le MPC et le taux de génération.....	60
D. V. 1. Influence du taux de génération sur $N(E_{\text{con}})$	60
D. V. 2. Transition du régime BF au régime HF.....	63
D. VI. Discussion.....	71
CONCLUSION.....	73
ANNEXE A.....	75
ANNEXE B.....	76
REFERENCES.....	79

Introduction

Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) est un matériau issu de la famille des semiconducteurs amorphes constituée principalement par les semiconducteurs à coordination tétraédrique et par les chalcogénures [1]. Cette forme de semiconducteurs a été découverte vers le début des années soixante. Dans un premier temps, elle n'était pas utilisable car elle avait beaucoup trop de défauts, mais vers la fin des années soixante, Chittick [2] observa qu'en déposant le silicium amorphe à l'aide d'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. Dès cette découverte, il fit l'objet de recherches intensifiées et il a été montré que ce matériau avait de bonnes propriétés de transport électrique [3] et une forte photoconductivité dues aux faibles densités de défauts [4]. Ainsi, il suscite l'intérêt des scientifiques et des industriels, car il présente plusieurs applications industrielles notamment dans la technologie photovoltaïque (cellules solaires en couches minces) et dans celle des écrans plats LCD (*liquid crystal display*) à cristaux liquides contrôlés par des transistors en couches minces TFT (*thin film transistors*). Il est aussi utilisé dans la photodétection et dans la xérographie (photocopieurs, imprimantes, imagerie médicale...). Le a-Si:H, comme le silicium cristallin (c-Si), présente d'autres avantages car il peut être déposé en couches minces sur de grandes surfaces, sur des surfaces souples non planes, et être fabriqué à faible coût. La recherche de nouvelles ressources énergétiques ainsi que de nouvelles applications technologiques font du a-Si:H et des semiconducteurs de structures voisines des matériaux actuellement en pleine évolution.

Les propriétés optoélectroniques du a-Si:H dépendent fortement de sa densité d'états. Le transport est dominé par les états localisés à des énergies comprises entre le bas de la bande de conduction et le haut de la bande de valence. L'étude des phénomènes de transport doit donc augmenter notre compréhension et notre connaissance de ces états localisés. L'expérience du photocourant modulé (MPC: *modulated photoconductivity*) permet d'obtenir une spectroscopie d'une grande partie de la densité d'états localisés. Elle offre ainsi la possibilité de caractériser la qualité d'un dépôt de silicium amorphe hydrogéné de façon précise.

Le présent travail est consacré à la simulation numérique du MPC. Nous avons mis au point un programme permettant de retrouver, à partir du MPC calculé, l'allure de la densité d'états dans la partie supérieure du gap en utilisant des formules analytiques simples établies à des fréquences suffisamment élevées.

Le chapitre A est consacré à la présentation du matériau a-Si:H et de ses propriétés électroniques et structurales. Nous présentons aussi quelques modèles de densité d'états du a-Si:H.

Le chapitre B est subdivisé en deux parties. Dans la première partie nous rappelons les mécanismes de la recombinaison et de la photoconductivité et dans la deuxième partie, nous présentons quelques méthodes de caractérisation de la densité d'états. En particulier, nous nous approfondirons sur la méthode du MPC ainsi que sur les résultats antérieurs s'y rapportant.

Le chapitre C est consacré à la modélisation et à la simulation numérique du MPC. Nous donnerons le modèle de densité d'états utilisé dans le calcul, nous déterminerons les fonctions d'occupations, et finalement l'analyse théorique du courant MPC. Les expressions analytiques concernant la reconstruction de la densité d'états localisés seront présentées, explicitées et commentées.

Enfin, le chapitre D est consacré à la simulation numérique du MPC et à la reconstruction de la densité d'états en régime haute fréquence. Nous décrirons les résultats obtenus par la simulation numérique et discuterons les domaines d'utilisation des formules utilisées. L'effet des paramètres microscopiques les plus significatifs sur les résultats sera présenté. Nous terminerons par une discussion récapitulative sur les résultats obtenus.

Chapitre A

Généralités sur le matériau

Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) est un semiconducteur amorphe à coordination tétraédrique. Il a connu un grand essor du point de vue de ses applications industrielles et il est toujours très étudié afin d'améliorer ses propriétés électroniques. Nous rappelons brièvement dans ce chapitre quelques-unes des propriétés structurales et électroniques du a-Si:H. Nous décrivons ensuite les modèles de densités d'états, généralement admis, en introduisant la notion de "gap de mobilité". Enfin, nous présentons le modèle standard de la densité d'états qui est utilisé dans la simulation numérique de ce travail.

A. I. Le matériau a-Si:H

A. I. 1. Arrangement atomique du silicium amorphe

Le silicium cristallin (c-Si) est décrit par un réseau dont la maille fondamentale est de type diamant. Les atomes sont arrangés périodiquement aux sommets de cellules tétraédriques d'arrête 2.35\AA et d'angle de liaison $109^{\circ}28'$ (Figure A.1). Toutes ces liaisons sont équivalentes. Nous avons dans ce cas un ordre à la fois à courte et à longue distance.

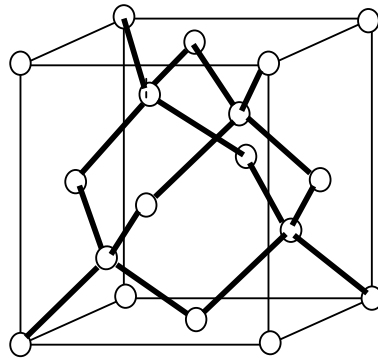


Figure A.1: Maille cubique conventionnelle de la structure diamant montrant les cellules tétraédriques.

Dans le silicium amorphe (a-Si), l'ordre à longue distance n'existe plus: nous n'avons plus de périodicité du réseau mais la cellule tétraédrique élémentaire est conservée. Le désordre provient à la fois de la désorientation des tétraèdres de silicium (variation d'angles) et de la variation des distances entre atomes. Les contraintes dans la structure cause la rupture des liaisons faibles entraînant l'apparition de liaisons pendantes.

Le désordre structural du silicium amorphe (variation des longueurs et des angles de liaison) et la concentration importante de liaisons pendantes donnent lieu à des états localisés dans la bande interdite. Des mesures de résonance paramagnétique électronique (RPE) montrent que la densité d'états est de l'ordre de 10^{19} à 10^{20} $\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$. Par conséquent les propriétés électroniques du a-Si sont peu intéressantes, rendant inutilisable ce matériau dans les applications industrielles et en particulier pour la fabrication de dispositifs électroniques.

A. I. 2. Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) et effet de l'hydrogénation

Une méthode pour diminuer la quantité de défauts consiste en l'hydrogénation du silicium amorphe lors de sa fabrication (Figure A.2). L'hydrogène passive une partie des liaisons pendantes d'une part et casse des liaisons faibles d'autre part. Ceci permet une relaxation du réseau et réduit ainsi la densité d'états qui décroît à 10^{15} - 10^{16} $\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ pour des échantillons de a-Si:H de bonne qualité électronique.

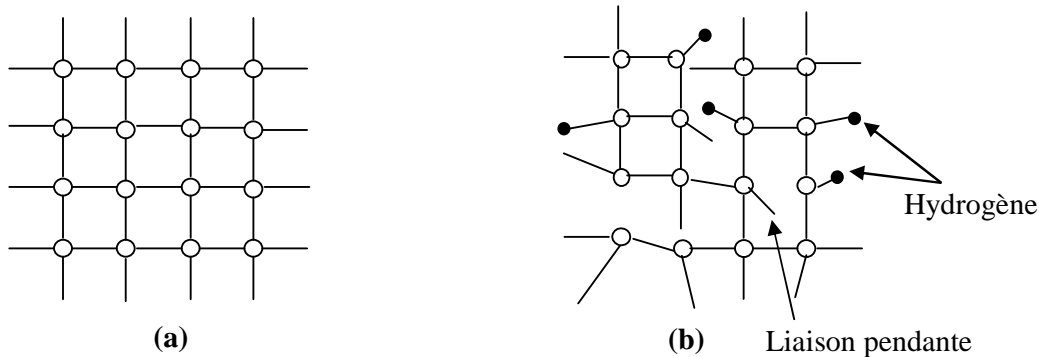


Figure A.2: Illustration schématique de l'arrangement atomique du silicium cristallin (a) et du silicium amorphe hydrogéné (b).

A. II. Modèles de densité d'états des semiconducteurs amorphes

Les propriétés électroniques d'un semiconducteur amorphe dépendent principalement de ses défauts car ils introduisent un grand nombre d'états localisés dans la bande interdite. Ces états sont caractérisés par leur densité $N(E)$ par unité de volume et par unité d'énergie. Ils peuvent être soit occupés, soit vides. Le nombre d'états occupés par unité de volume ayant une énergie comprise entre E et $E+dE$ est donné par l'expression $N(E)f(E)dE$, où $f(E)$ est la fonction de distribution.

L'interaction des fonctions d'ondes des électrons avec un potentiel périodique (théorème de Bloch) conduit à la notion de bandes permises et de bande interdite. Aux bords de la bande de conduction (BC) et de valence (BV), la densité d'états électroniques varie de façon parabolique avec l'énergie. Ce cas correspond aux semiconducteurs cristallins (Figure A.3). La présence de défauts dans la structure amorphe tétracoordinée engendre les états d'énergie. Elle se manifeste par la formation d'un profil d'états localisés à l'intérieur de la bande interdite. Cette situation rend difficile la définition exacte d'une bande interdite séparant les états étendus de la bande de conduction et de ceux de la bande de valence.

Anderson aborde pour la première fois le concept de localisation en 1958 [5]. Il considère dans son modèle un réseau périodique de puits de potentiel de profondeur aléatoire. En se basant sur les premières idées d'Anderson, Cohen *et al.* [6], puis Mott [7], ont développé un modèle pour la structure électronique des semiconducteurs amorphes. Ils montrent que la structure avec les bandes de conduction et de valence persiste et introduisent le concept d'états localisés sous forme d'un continuum d'états dans toute la bande interdite.

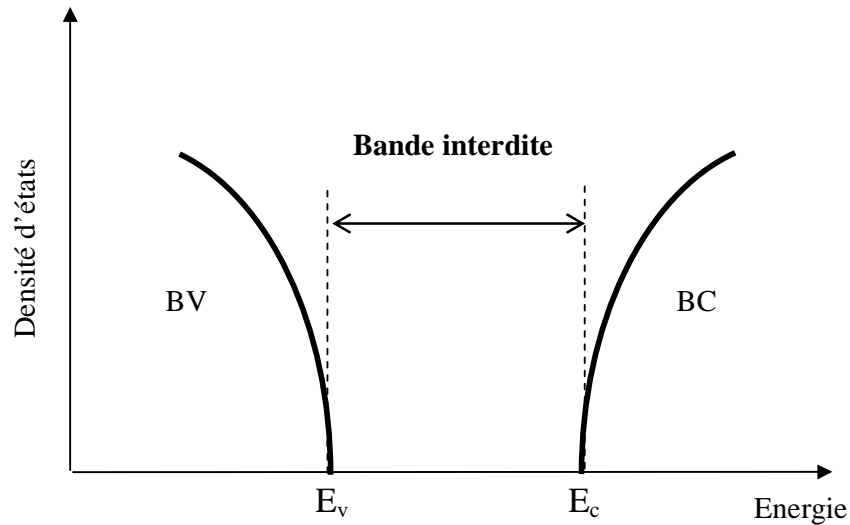


Figure A.3: Diagramme de bandes d'énergie dans un semiconducteur cristallin.

A. II. 1. Modèle de C.F.O.

Dans le modèle de densité d'états de Cohen, Fritzsche et Ovshinsky (C.F.O.) [6] (Figure A.4), les fluctuations du potentiel dues au désordre donnent des queues de bandes. Ces dernières se prolongent et se recouvrent à l'intérieur du gap. Les états issus de la bande de conduction jouent le rôle d'accepteurs pour $E < E_F$. De même que les états issus de la bande de valence jouent le rôle de donneurs pour $E > E_F$. Le recouvrement des deux queues de bandes fixe le niveau de Fermi par l'équilibre électrique des états de charge en respectant la neutralité macroscopique du matériau.

A. II. 2. Modèle de Mott et Davis

En se basant sur des résultats expérimentaux, Mott et Davis [8,9] ont prévu une densité d'états localisés finie au voisinage du niveau de Fermi, dont la valeur est relativement plus faible que celles des bords de bandes. Les défauts de la structure amorphe introduisent une densité d'états localisés aux bords de bandes qui se prolongent sous forme de deux queues de bandes à l'intérieur du gap de mobilité en décroissant à partir de E_c et de E_v , les bords des bandes de conduction et de valence respectivement. Ces auteurs introduisent le concept de "défauts", spécifiques aux semiconducteurs amorphes et dépendant des conditions de préparation. Ils se manifestent par l'apparition de pics jumeaux, assimilés à des états donneurs et accepteurs (Figure A.5). Le niveau de Fermi est situé entre ces deux pics.

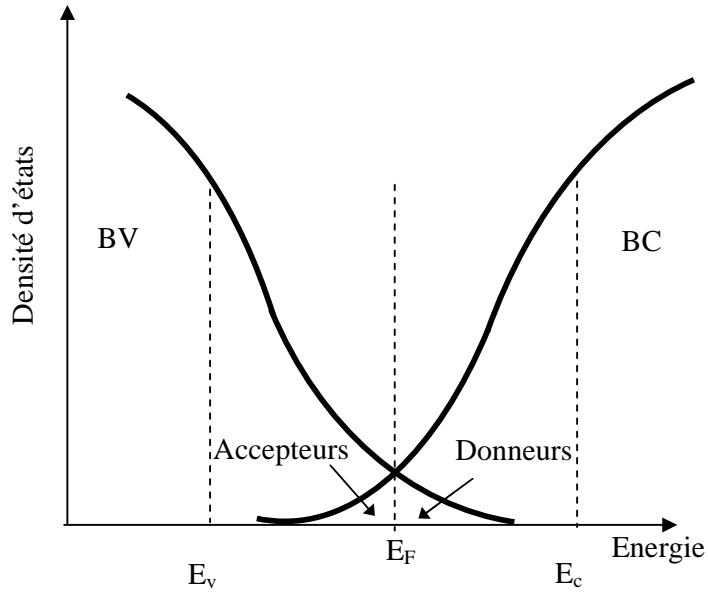


Figure A.4: Diagramme de bandes selon le modèle C.F.O.

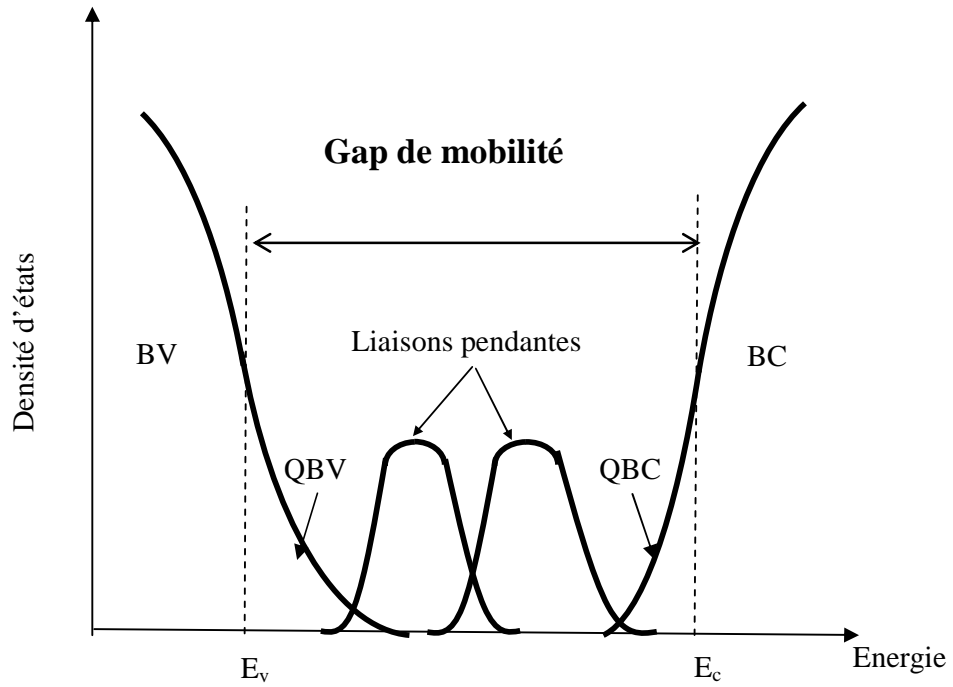


Figure A.5: Diagramme de bandes selon le modèle de Mott et Davis.

A. II. 3. Notion de gap de mobilité

La notion de "gap de mobilité" dans le a-Si:H vient se substituer naturellement à la notion de bande interdite dans le silicium cristallin car des états existent à l'intérieur de cette bande d'énergie. Mott [7] et, d'autre part, Cohen *et al.* [6] ont montré que la mobilité des porteurs varie de plusieurs décades au zéro absolu lorsqu'on passe des états étendus vers les états localisés. L'énergie critique qui marque cette transition est appelée seuil de mobilité. Elle permet de définir le "gap de mobilité" ($E_g = E_c - E_v$). Cette variation de la mobilité en fonction de l'énergie est connue sous le nom du modèle de Mott-CFO.

A. III. Modèle standard de densité d'états du a-Si:H

Les premiers profils de densités d'états ont été obtenus par Madan *et al.* [10] en utilisant la technique d'effet de champ sur du a-Si:H obtenu par décharge de silane. Depuis, d'autres profils pour des échantillons sous forme de diode Schottky ou de structure MOS à base de a-Si:H ont été déterminés. Les premiers profils obtenus ne paraissent plus maintenant comme universels. Dans tous les cas, les densités d'états obtenues confirment à posteriori l'existence d'un continuum d'états dans toute la bande interdite du a-Si:H.

Le modèle standard de densité d'états du a-Si:H (Figure A.6) communément admis est basé sur le modèle de Mott et Davis [9]. Nous distinguons les états étendus de la bande de valence et de la bande de conduction. Leurs densités d'états $N_{BV}(E)$ et $N_{BC}(E)$ correspondantes peuvent être décrites, comme pour les semiconducteurs cristallins, par une allure parabolique. Les états localisés se répartissent en deux catégories: les états de queues de bandes représentés par une décroissance exponentielle depuis les bords de bande de conduction et de valence. Ces états, appelés respectivement queue de bande de conduction (QBC) et queue de bande de valence (QBV), sont dus à la variation des angles de liaisons et des distances interatomiques. Par des mesures expérimentales, il est généralement admis que la QBV est plus large que la QBC. Les pentes de ces queues de bandes se traduisent par les énergies caractéristiques $k_B T_c$ et $k_B T_v$ de la QBC et de la QBV respectivement. Les valeurs varient entre 25 et 60 meV pour $k_B T_c$ et entre 45 et 90 meV pour $k_B T_v$. Les états profonds entre ces deux queues de bandes sont dus aux liaisons pendantes (LPs) qui sont les liaisons non saturées du silicium. La forme de la densité d'états profonds est toujours sujette à controverse. Toutefois, on peut en faire une approche simple avec deux gaussiennes.

La liaison pendante peut se présenter selon trois états d'occupation. Elle peut être vide et de charge positive (centre D^+), occupée par un électron et être neutre (centre D^0), et occupée par deux électrons et de charge négative (centre D^-). Les LPs D^+ et D^0 se situent au même niveau énergétique E_{db} dont la valeur est généralement prise entre 0.8 et 0.9 eV par rapport à E_v . Quant aux états D^- , leur position énergétique est élevée par rapport à celle de $D^{0/+}$ par une énergie de corrélation U dite de Hubbard. Il est généralement admis que U est positive et vaut entre 0.3 et 0.4 eV [11,12]. Cependant certains auteurs considèrent une valeur négative de U [13].

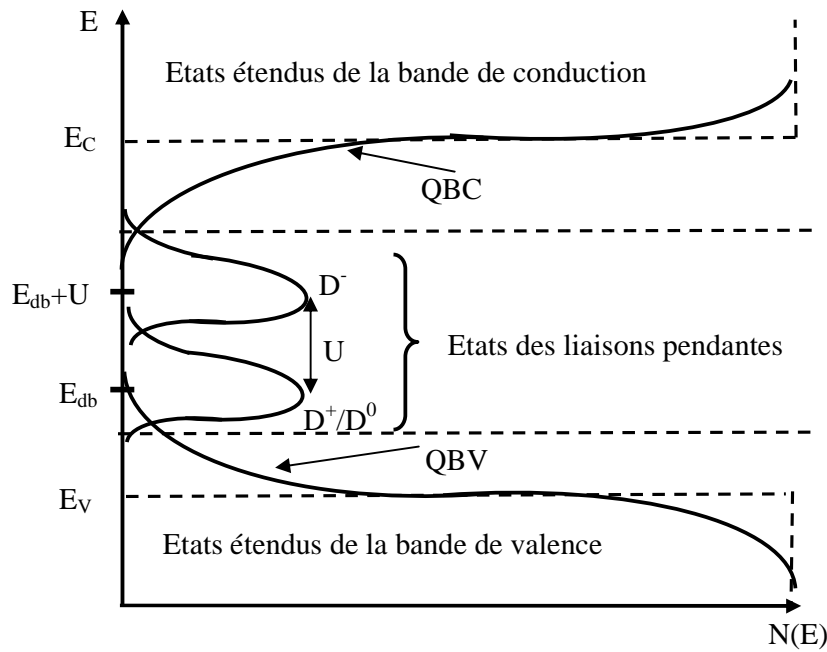


Figure B.6 : Modèle standard de densité d'états du a -Si:H.

Chapitre B

Description de la technique du photocourant modulé

La photoconductivité est une propriété optoélectronique importante, elle est exploitée dans de multiples applications: les photorésistances, les photodiodes, les cellules solaires, les phototransistors, etc. Il existe aussi plusieurs méthodes de caractérisation du a-Si:H basées sur la photoconductivité. Dans ce chapitre, nous commencerons par énoncer la théorie de la photoconductivité ainsi que les mécanismes de génération et de recombinaison. Ensuite nous décrirons rapidement quelques méthodes utilisées pour la détermination de la densité d'états, et en particulier nous présenterons en détail la méthode du photocourant modulé (MPC: *modulated photocurrent*) dont la simulation numérique fait l'objet de ce travail.

B. I. La photoconductivité

Si la conductivité électrique d'un semiconducteur augmente lorsqu'on l'éclaire on dit qu'il y a photoconductivité. Pour que ce phénomène se produise et qu'on puisse l'observer, deux conditions doivent être remplies: la première est l'absorption de la lumière pour générer les porteurs libres et la seconde est que l'augmentation de la conductivité, produite par l'éclairement, soit notable vis à vis de la conductivité d'obscurité à la même température. Les porteurs photogénérés contribuent ainsi au transport. La concentration de ces porteurs est contrôlée par les phénomènes de génération et de recombinaison.

B. I. 1. Génération-Recombinaison

En communiquant à un électron une énergie suffisante pour l'exciter vers un niveau de la bande de conduction, la concentration des porteurs libres augmente dans le a-Si:H: c'est le mécanisme de génération. L'excès de porteurs libres doit disparaître lorsque la source de génération est supprimée. Il existe donc des mécanismes assurant la recombinaison des porteurs en excès. Celle-ci se produit dans le volume du matériau, et également en surface. Nous nous intéressons dans ce travail à la recombinaison en volume.

B. I. 1. a. Génération optique

Dans le cas du a-Si:H, l'absorption de photons d'énergie $h\nu$ supérieure au gap provoque simultanément l'accroissement de la population d'électrons dans la bande de conduction et celle de trous dans la bande de valence: on dit qu'il y a génération de porteurs. On parle dans ce cas d'une génération bande à bande. Le taux de génération de paires électron-trou, à une distance x , pour un matériau homogène éclairé uniformément par une onde monochromatique s'écrit:

$$G(x) = \alpha \eta \phi(x) \quad (\text{B.1})$$

où α est le coefficient d'absorption, η est le rendement quantique qui est la probabilité pour qu'un photon crée une transition (η est pris égal à 1) et $\phi(x)$ est le flux de photons à une profondeur x , qui s'exprime à l'aide de la loi de Lambert- Bouguer:

$$\phi(x) = \phi_0 (1 - R) e^{-\alpha x} \quad (\text{B.2})$$

où ϕ_0 est le flux de photons incidents, R est le facteur de réflexion, et α est le coefficient d'absorption. Le taux de génération en volume est déduit en intégrant l'équation (B.1) sur toute l'épaisseur d du matériau:

$$G = \frac{1}{d} \int_0^d G(x) dx = \eta \phi_0 (1 - R) \left(\frac{1 - e^{-\alpha d}}{\alpha} \right) \quad (\text{B.3})$$

B. I. 1. b. Mécanismes de recombinaison

Les processus de recombinaison se classent en deux grandes catégories: recombinaison directe et indirecte. Dans la recombinaison directe l'électron retourne dans la bande de valence en libérant une énergie supérieure ou égale à la bande interdite (le processus inverse de l'absorption intrinsèque). La recombinaison indirecte se fait en deux étapes par l'intermédiaire de niveaux d'énergie situés dans la bande interdite. L'électron est capturé dans un premier temps par un centre piège, ensuite le centre capture un trou de la bande de valence. Remarquons que les états localisés de la bande interdite ne sont pas tous des centres de recombinaison. Il y a également des centres pièges où un électron ou un trou piégé a une plus grande probabilité d'être réexcité thermiquement vers une bande permise que de se recombiner.

Ce processus de recombinaison indirecte prédomine dans le a-Si:H du fait de la densité de défauts importante qui existe dans le gap. Nous décrivons ci-dessous le travail de Hall-Shockley-Read (H.S.R.) [14,15] fait en 1952 qui décrit les échanges entre un piège monovalent dans la bande interdite et les bandes de conduction et de valence au moyen de quatre processus. L'extension de cette statistique à une distribution arbitraire de pièges a été décrite par Simmons et Taylor [16]

Un centre monovalent est un état qui ne peut admettre que deux états de charge. Ce niveau introduit un seul centre de recombinaison qui peut être occupé par un électron ou vide. La statistique traduisant la recombinaison sur ce type d'états est celle de Hall-Shockley-Read [14,15]. 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. Pour cela on considère un seul état situé à une énergie E_t et de densité N_t . Les quatre processus thermiques d'interaction possibles des porteurs libres avec cet état, sont représentés sur la figure B.1.

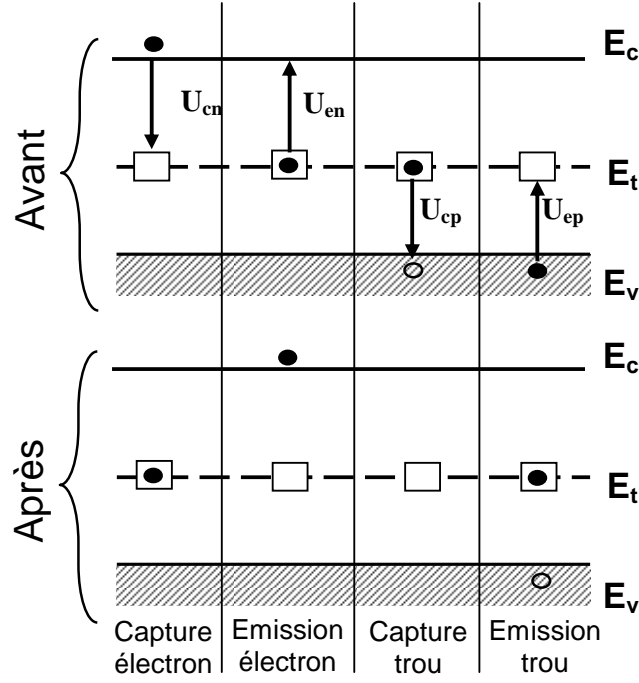


Figure B.1: Processus de recombinaison sur un état monovalent.

Les expressions des taux de capture et d'émission, des électrons (trous), U_{cn} (U_{cp}) et U_{en} (U_{ep}) respectivement par le centre monovalent sont données par:

$$U_{cn} = n C_n N_t (1-f) \quad (B.4)$$

$$U_{en} = e_n N_t f \quad (B.5)$$

$$U_{cp} = p C_p N_t f \quad (B.6)$$

$$U_{ep} = e_p N_t (1-f) \quad (B.7)$$

où n (p) est la concentration des électrons (trous) libres, C_n (C_p) est le coefficient de capture d'électrons (trous), e_n (e_p) est le coefficient d'émission des électrons (trous) et f

est la fonction d'occupation du centre dont l'expression à l'équilibre thermodynamique est donnée par $f(E_t) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_t - E_F}{k_B T}\right)}$ où E_F est l'énergie de Fermi et k_B est la constante

de Boltzmann.

Sachant qu'à l'équilibre thermodynamique $U_{cn} = U_{en}$, on trouve que:

$$e_n(E_t) = C_n n_1(E_t) \quad (\text{B.8})$$

$$e_p(E_t) = C_p p_1(E_t) \quad (\text{B.9})$$

avec $n_1(E_t) = N_c \exp \frac{E_t - E_c}{k_B T}$ et $p_1(E_t) = N_v \exp \frac{E_v - E_t}{k_B T}$ où N_c et N_v sont les densités effectives en E_c et E_v respectivement.

A partir des expressions des taux d'émission et de capture, les taux nets de recombinaison pour les électrons et les trous, U_n et U_p s'écrivent:

$$U_n = n C_n N_t (1-f) - e_n N_t f \quad (\text{B.10})$$

$$U_p = p C_p N_t f - e_p N_t (1-f) \quad (\text{B.11})$$

Nous pouvons ainsi déduire à partir des deux relations précédentes l'expression du taux net de recombinaison U_{net} sous excitation et en régime permanent. Sachant qu'en régime permanent on a $U_n = U_p$, on obtient donc:

$$f_t = \frac{n C_n + e_p}{n C_n + e_n + p C_p + e_p} \quad (\text{B.12})$$

$$U_{\text{net}} = N_t \frac{C_n C_p n p - e_n e_p}{n C_n + e_n + p C_p + e_p} \quad (\text{B.13})$$

où U_{net} est le taux net de recombinaison sur E_t et f_t est le taux d'occupation du centre en régime permanent.

B. I. 2. Formulation et définition de la photoconductivité

Dans les semiconducteurs amorphes, le modèle de Mott [9] prévoit trois types de conduction thermiquement activée: à haute température les porteurs excités dans les états étendus sont responsables de la conduction, aux températures intermédiaires la conduction se fait par sauts dans les états des queues de bandes, et à très basse température la conduction se fait par sauts entre états localisés autour du niveau de Fermi.

Dans le cas où la conduction se fait essentiellement dans les états étendus, l'expression de la conductivité est donnée par:

$$\sigma = q \mu_n n + q \mu_p p \quad (\text{B.14})$$

où q est la valeur absolue de la charge de l'électron, n et p sont les concentrations totales des électrons et des trous, et μ_n et μ_p leurs mobilités respectives dans les états étendus. D'autre part, dans le a-Si:H non dopé, les électrons sont les porteurs majoritaires et ont une mobilité supérieure à celle des trous, Dans ce cas, l'inégalité $\mu_n n \gg \mu_p p$.

La conductivité sous obscurité s'écrit en fonction des concentrations des porteurs de charges libres n_0 et p_0 à l'équilibre thermodynamique:

$$\sigma_0 = q \mu_n n_0 + q \mu_p p_0 \quad (\text{B.15})$$

La différence entre la conductivité totale sous lumière et la conductivité à l'obscurité est appelée photoconductivité et qui s'écrit:

$$\sigma_{ph} = \sigma - \sigma_0 = q \mu_n \Delta n + q \mu_p \Delta p \quad (\text{B.16})$$

où Δn et Δp sont les concentrations excédentaires des porteurs de charges.

B. II. Méthodes de détermination de la densité d'états

Connaître la densité d'états dans le gap des semiconducteurs amorphes est d'une grande importance car les phénomènes de transport dépendent beaucoup des états localisés. Ces états agissent comme des centres pièges ou de recombinaison et contrôlent ainsi la population des porteurs libres. Nous avons vu précédemment que les défauts présents dans le a-Si:H sont les distorsions des liaisons et les liaisons insatisfaites. Ces défauts se manifestent par des centres électroniques dont les niveaux d'énergie se situent dans le gap. Les caractéristiques des queues de bandes et la densité des défauts profonds peuvent être déterminées par plusieurs méthodes. Pour la caractérisation de ces états, il existe des méthodes basées sur la mesure du photocourant transitoire ou du photocourant stationnaire. En effet, le photocourant reflète la densité de porteurs de charge libres lesquels à leurs tours dépendent de la densité d'états. Les méthodes couramment utilisées sont la méthode du photocourant constant (CPM) [17], la méthode de spectroscopie de déflexion photothermique (PDS) [18], la méthode du transitoire du photocourant (TPC), et la méthode du photocourant modulé (MPC) [19]. Nous consacrons la partie III de ce chapitre à la description de cette dernière méthode, puisque celle-ci est l'objet de notre présente étude.

B. II. 1. La méthode du photocourant constant (CPM)

La méthode du photocourant constant (CPM: *constant photocurrent method*) a été proposée pour la première fois par Grimmeis et Lebedo [20] et a été appliquée à l'étude du a-Si:H par Vanecek *et al.* [17] en 1981. Elle fait intervenir le transport des porteurs photogénérés et renseigne uniquement sur les transitions qui contribuent à la génération du photocourant. La CPM permet d'accéder aux faibles valeurs du coefficient d'absorption optique α et à certains paramètres de la densité d'états tel que la pente d'Urbach $k_B T_V$ et la densité des liaisons pendantes N_{db} . Dans cette méthode on suppose l'occupation d'un état inchangée pendant l'illumination avec des photons d'énergie différente si le photocourant ne varie pas. Afin de le maintenir constant, l'intensité du flux de photons est variée. Dans de telles conditions, le photocourant ne dépend que du nombre de photons incidents et du coefficient d'absorption et s'écrit alors:

$$\alpha(h\nu) = \frac{Cste}{\phi(h\nu)}$$

où $\phi(h\nu)$ est le nombre de photons incidents par unité de surface et de temps nécessaire pour maintenir le photocourant constant.

B. II. 2. Spectroscopie de déflexion photothermique (PDS)

La technique de la spectroscopie de déflexion photothermique (PDS: *photothermal deflection spectroscopy*) a été mise au point par Baccara *et al.* [18] en 1980 et a été étudiée théoriquement ainsi qu'expérimentalement par Jackson *et al.* [21]. Elle permet de déterminer l'absorption d'un corps qui est en contact avec un milieu fluide. On désigne par effet photothermique l'ensemble des phénomènes liés à la transformation en chaleur de la lumière absorbée par un système donné. Cette technique utilise l'effet mirage, c'est-à-dire la déflexion d'un faisceau lumineux par un milieu avec gradient de l'indice de réfraction. Ce gradient s'établit lors d'une variation de température.

Le principe de cette méthode consiste à éclairer une couche de a-Si:H plongée dans un fluide transparent par un faisceau monochromatique d'énergie $h\nu$, sous incidence normale. L'énergie lumineuse est entièrement absorbée par l'échantillon et transformée d'une façon périodique en chaleur (gradient de température) par désexcitation non radiative. Il se crée ainsi un gradient de l'indice de réfraction dans le fluide près de la surface de la couche du a-Si:H. Ce gradient d'indice défléchit aussi de façon périodique un

faisceau laser sonde rasant la surface de l'échantillon. Cette déviation est transformée en signal électrique $S(h\nu)$ mesuré par une détection synchrone. Cette déviation est transformée en signal électrique et donne directement le coefficient d'absorption:

$$\alpha(h\nu) = -\frac{1}{d} \log \left(1 - \frac{S(h\nu)}{S_0} \right)$$

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

B. II. 3. La méthode du transitoire du photocourant (TPC)

Une large variété d'expériences basées sur la réponse transitoire à une excitation lumineuse a été utilisée telle que la technique du transitoire du photocourant (TPC: *transient photocurrent*) appliqué sur des structures en contact ohmique [22-24] et sur des structures Schottky [25,26].

Les mesures du transitoire du photocourant dans le a-Si:H nous permet d'extraire ses paramètres caractéristiques notamment la largeur de la queue de bande de conduction ou la densité d'états localisés dans le gap.

Le principe de cette technique consiste à éclairer le matériau avec une lumière monochromatique pendant un laps de temps, puis à prélever la décroissance du photocourant juste après la rupture de l'éclairement. La réponse du transitoire du photocourant est relevée.

Deux principales méthodes d'analyse des résultats de mesure de la technique du transitoire du photocourant sont proposées. La première fait appel à l'étude de la décroissance pour la détermination de la largeur de la bande de conduction. La deuxième analyse repose sur l'application de la transformée de Fourier sur les décroissances du photocourant. Les données de cette dernière nous permettent la détermination de la densité d'états localisés dans le gap.

B. III. Méthode du photocourant modulé (MPC)

L'expérience du photocourant modulé (MPC: *modulated photocurrent*) est une puissante méthode de caractérisation de la densité d'états dans une moitié de la bande

interdite des semiconducteurs amorphes. Elle permet de remonter à la distribution énergétique des états localisés à partir de l'analyse du photocourant modulé.

Dans ce qui suit, nous commencerons par décrire les concepts de base de la méthode du photocourant modulé dans le but d'avoir une spectroscopie de la densité d'états localisés dans le gap. Ensuite, nous rappellerons les résultats les plus remarquables sur les travaux antérieurs du MPC.

B. III. 1. Description

Le principe de l'expérience consiste à éclairer l'échantillon avec une lumière dont l'intensité est une fonction périodique dans le temps, modulée à la fréquence ω . Un montage constitué principalement par un amplificateur de courant, un convertisseur courant/tension et une détection synchrone (Figure B.3) permet de déterminer le module de la composante alternative du photocourant $|I_{ac}|$ ainsi que son déphasage ϕ par rapport à la lumière d'excitation. Cette différence de phase est due aux interactions des porteurs libres avec les états localisés de la bande interdite. Le rapport $\sin\phi/|I_{ac}|$ permet de remonter à la densité d'états à par exemple l'aide de l'expression simplifiée de Brüggemann [27].

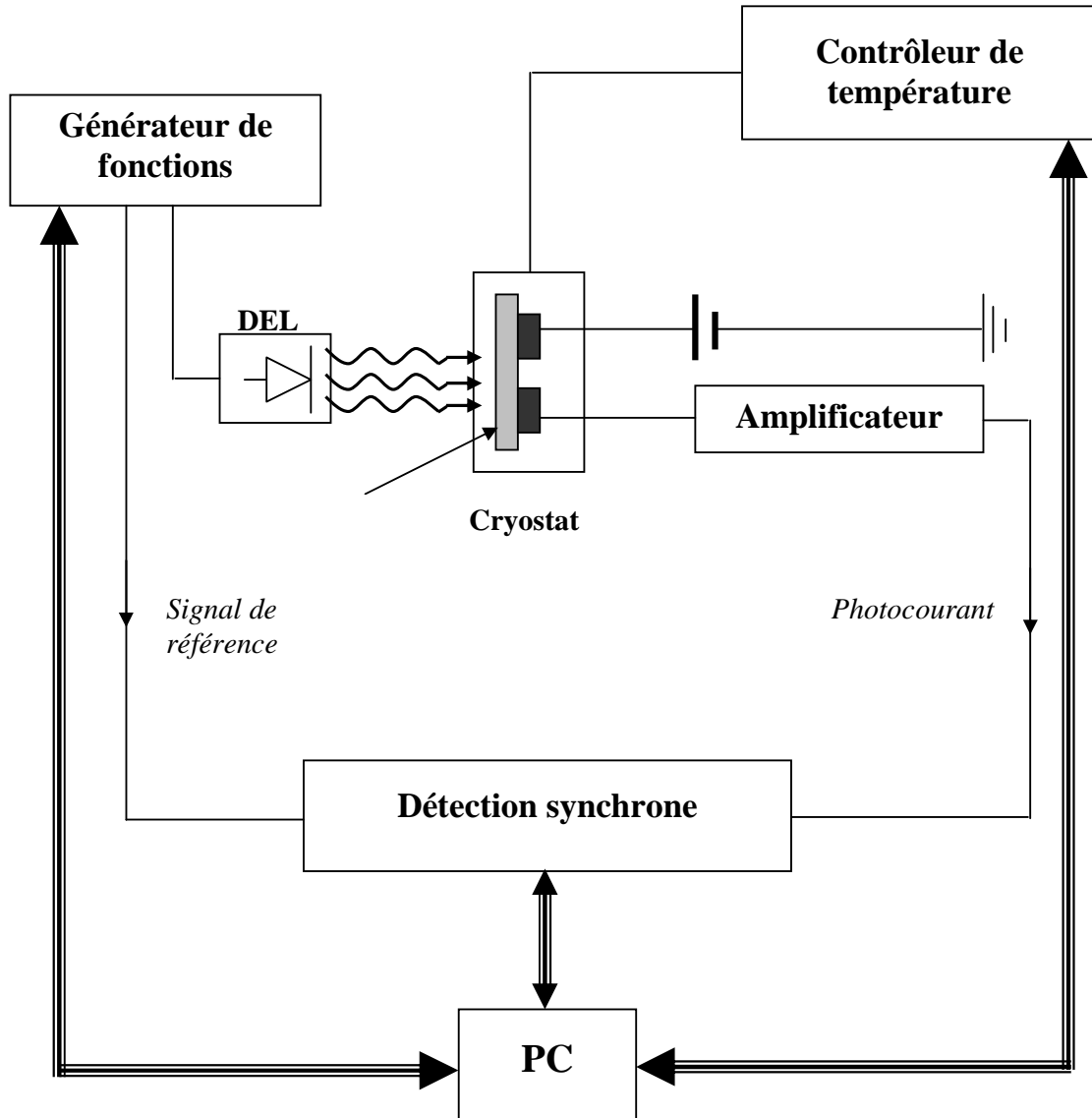


Figure B.2: Schéma du montage typique de la technique de mesure du photocourant modulé.

B. III. 2. Rétrospective des travaux antérieurs sur le MPC

L'expérience du photocourant modulé a suscité un grand intérêt dans la communauté scientifique car elle figure parmi l'une des méthodes puissantes de caractérisation. Cette méthode appliquée au a-Si:H est toujours utilisée et fait encore l'objet de différentes études [28,29].

Oheda [19] fut le premier à développer une analyse originale de la technique du MPC dans laquelle il a tenu compte de l'interaction d'un seul type de porteurs (les électrons) avec une distribution limitée d'états localisés dans le gap. Il a proposé une analyse du déphasage et de son évolution avec la fréquence de modulation par le moyen d'un procédé récursif pour éliminer des expressions la durée de vie des électrons. Il a mesuré ainsi une densité d'états relative des états pièges vides dans le gap du CdS, puis a appliqué cette méthode pour les semiconducteurs amorphes [30].

En utilisant les équations de base de Oheda, Brüggemann *et al.* [27] ont montré que la détermination de la densité d'états serait plus simple en tenant compte aussi bien du module du MPC que de son déphasage. En ne tenant compte dans la conduction que des électrons, des formules analytiques simples sont obtenues lorsque les mesures sont faites à une fréquence suffisamment élevée en virant 50KHz. La densité d'états à une énergie donnée est directement reliée au rapport entre le sinus du déphasage et le module de la partie alternative du photocourant. Cette méthode a été appliquée à des échantillons de As_2Se_3 . Par la suite, ces équations ont été largement utilisées pour la détermination de la distribution des états localisés dans les semiconducteurs amorphes.

Longeaud et Kleider ont développé un calcul théorique plus général du photocourant modulé, qui inclut l'interaction des deux types de porteurs: les électrons et les trous. Ils ont tenu compte dans leur calcul d'une distribution arbitraire d'états monovalents dans le gap [31]. Ces mêmes auteurs ont complété cette étude par un traitement plus général, incluant des états corrélés en forme de gaussiennes, dus généralement aux liaisons pendantes dans les semiconducteurs amorphes [32]. Comme les expressions obtenues sont compliquées, le MPC et son déphasage ont été calculés par le moyen d'une simulation numérique. La formule de Brüggemann a été ensuite utilisée pour déterminer la densité d'état.

En pratique, des mesures à plusieurs températures sont effectuées pour obtenir plusieurs spectres de MPC-DOS (DOS: *Density Of States*). L'enveloppe supérieure peut être considérée représentative de la forme de la vraie DOS. A titre d'illustration, nous présentons dans la figure B.3 une reconstruction, sous certaines conditions, de la densité d'états avec une énergie de corrélation positive [32].

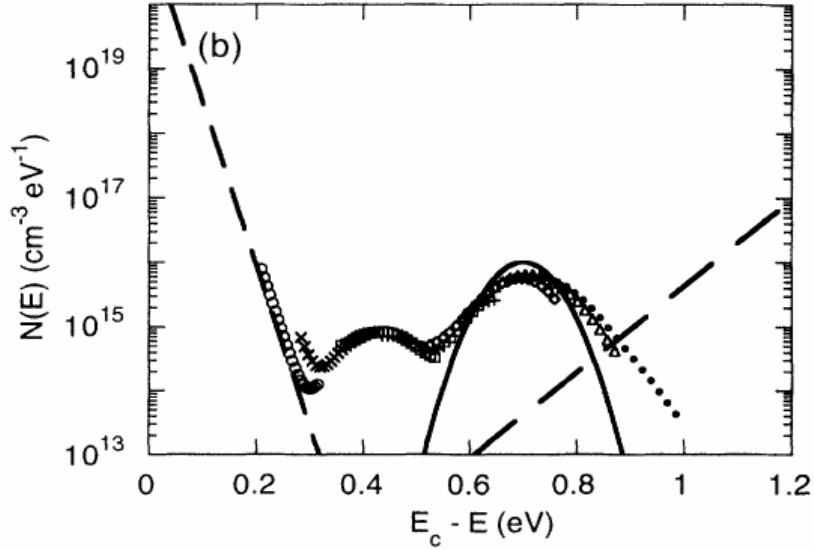


Figure B.3: Densité d'états introduites dans le calcul (lignes) et celle reconstruite à partir de la MPC (symboles) [32]

Ils ont notamment montré que deux régimes distincts existaient: le régime de haute fréquence (HF) et le régime de basse fréquence (BF). Dans le régime haute fréquence le photocourant modulé est contrôlé par le processus de piégeage et dépiégeage. La fréquence et la température déterminent la position énergétique des états localisés sondés près des seuils de mobilité. En basse fréquence, le photocourant modulé est contrôlé par le processus de recombinaison. Nous notons un autre résultat important qui est de pouvoir remonter au coefficient de capture des pièges qui interagissent avec les porteurs majoritaires en utilisant la fréquence de coupure, c'est-à-dire la fréquence qui marque la transition entre les deux régimes, et nous la déduisons des tracés de $\cos\phi/|I_{ac}|$ en fonction de la fréquence en faisant varier le flux.

La technique du MPC a été aussi appliquée avec succès à différents types de semiconducteurs comme par exemple les alliages amorphes (a-SiGe:H) microcristallins ($\mu\text{c-Si:H}$) et polycristallins. Des échantillons en configuration coplanaire aussi bien qu'en structures sandwich ont été utilisés [33-41]. Il faut noter que dans tous ces travaux, il n'y a que le régime haute fréquence qui est utilisé. En 2001, Kounavis [42] a publié une analyse générale de la technique du MPC qui montre notamment que la transition entre le régime BF et le régime HF permet d'estimer le coefficient de capture des pièges. Ceci avait été souligné également par d'autres auteurs [40,43]. Cependant, personne ne s'est attaché à

obtenir une expression de la densité d'états en régime basse fréquence du photocourant modulé jusqu'à la publication de Koropecki *et al.* [44]. Ces auteurs proposent une formule analytique simple reliant la densité d'états au MPC en régime basse fréquence et leurs résultats expérimentaux sont comparables à ceux obtenus par la méthode en régime haute fréquence.

Pour finir cette rétrospective, nous donnons sur la figure B.4 un résultat expérimental de reconstruction de la densité d'états obtenu à partir de mesures expérimentales du MPC et de son déphasage réalisées dans notre laboratoire pour un échantillon de a-Si:H déposé par pulvérisation DC magnétron [45]. La formule de Brüggemann pour la MPC a été utilisée.

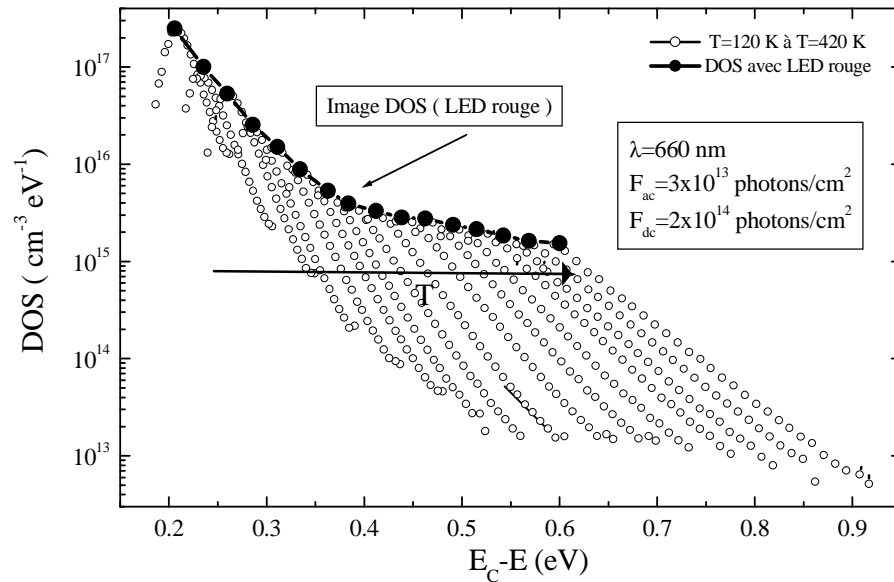


Figure B.4: Densité d'état reconstruite à l'aide de la formule de Brüggemann pour des températures comprises entre 120 et 420 K à partir d'un MPC expérimental [45].

Chapitre C

Modélisation et mise en équations

C. I. Introduction

Dans la première partie de ce chapitre, nous allons commencer par la description du modèle de densité d'états standard du a-Si:H utilisé dans nos calculs. Ensuite, nous expliciterons toutes les expressions des taux de capture et d'émission résultant des échanges entre les états localisés et les états étendus. Dans la troisième partie, nous développerons la modélisation de la technique du photocourant modulé (MPC) à partir des équations cinétiques en régime continu et alternatif. Nous calculerons les fonctions d'occupation des états des queues de bandes et des états des liaisons pendantes pour les deux régimes ainsi que les composantes respectives du courant MPC. Nous finirons ce chapitre par une présentation des valeurs choisies pour l'ensemble des paramètres microscopiques nécessaires aux différents calculs et la description du traitement numérique.

C. II. Modèle de densité d'états utilisé pour le a-Si:H

Nous avons vu précédemment dans le chapitre A qu'il existe un grand nombre d'états localisés dans le gap du a-Si:H. Ils se distinguent par leur nature et leur répartition en énergie à savoir les queues de bandes considérées comme une distribution d'états monovalents et les états corrélés des liaisons pendantes. La connaissance de la densité d'états est importante pour le calcul des propriétés électrique et optique du matériau car elle contrôle la population des porteurs libres. La forme de la densité d'états standard généralement utilisée pour le a-Si:H est basée sur le modèle de Mott et Davis [9]: elle est constituée des états des deux queues de bandes et ceux des liaisons pendantes comme le montre la figure C.1.

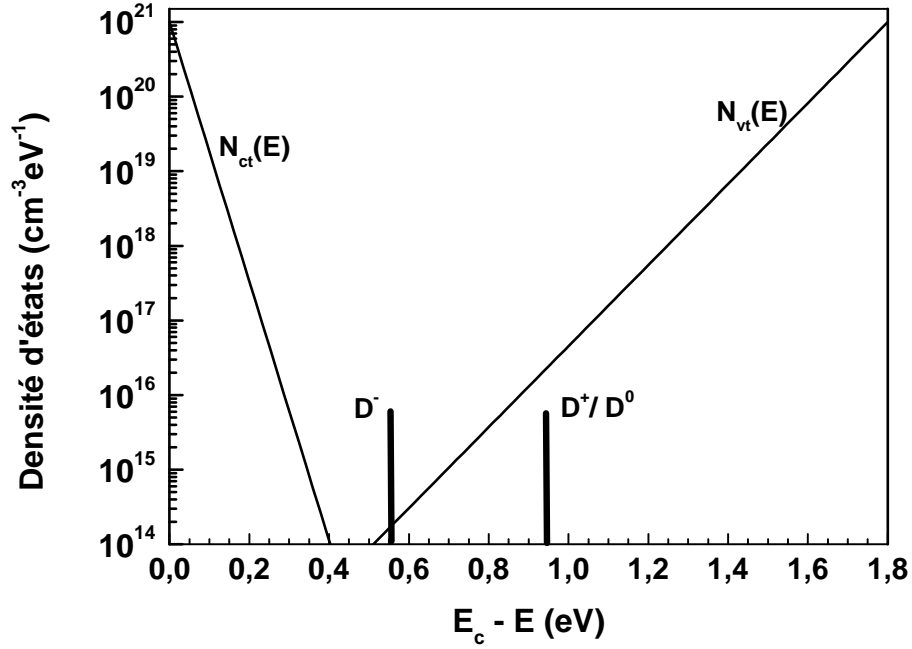


Figure C.1: Modèle de densité d'états introduit dans le calcul.

C. II. 1. Densité des queues de bandes

Le désordre structural engendre les états des queues de bandes: la queue de bande de conduction (QBC) et la queue de bande de valence (QBV). Elles sont décroissantes à partir du bord de la bande de conduction et de la bande de valence suivant une allure exponentielle. Leurs expressions sont données par:

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

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

où N_{ct}^0 et N_{vt}^0 sont les densités d'états aux bords de bande, T_c et T_v sont les températures caractéristiques de la QBC et de la QBV respectivement et k_B est la constante de Boltzmann. Les termes $k_B T_c$ et $k_B T_v$ sont habituellement appelés énergies caractéristiques des deux queues de bandes.

C. II. 2. Densité des liaisons pendantes

Les états profonds sont dus à l'existence des liaisons pendantes non satisfaites. La liaison pendante peut avoir trois états de charge possibles: neutre D^0 , négative D^- et positive D^+ . Nous considérons dans notre modèle des états discrets. L'état D^- joue un rôle de donneur. Son énergie est élevée par rapport à l'énergie E_{db} de $D^{0/+}$ par une énergie U appelée énergie de corrélation.

C. III. Bilans des échanges électroniques via les états localisés

Comme nous l'avons rapporté précédemment au § B I.1.b, la statistique de HSR permet de décrire l'occupation d'un centre monovalent qui peut échanger un électron ou un trou avec la bande de conduction ou de valence respectivement. Simmons et Taylor ont montré que cette statistique peut s'appliquer à une distribution continue arbitraire de pièges monovalents [16].

C. III. 1. Bilans sur les queues de bandes

Les diverses transitions thermiques possibles relatives aux queues de bandes sont représentées sur la figure C.2

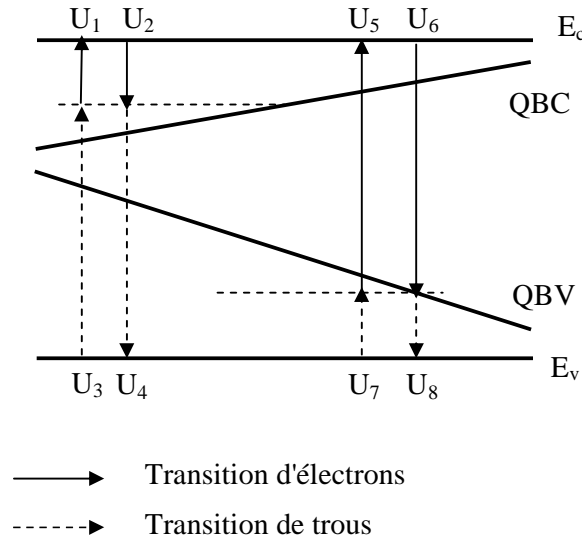


Figure C.2: Schéma représentatif des transitions thermiques prises en compte entre les queues de bandes et les états étendus.

Les différents taux de capture et d'émission des électrons et des trous, entre les états des queues de bandes et les bandes de conduction et de valence, sont récapitulés dans le tableau C.1.

Tableau C.1: Taux de capture et d'émission entre états des queues de bandes et les états étendus.

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

$f^x(E)$: fonction d'occupation des électrons

e_n^x et e_p^x : coefficients d'émission des électrons et des trous

C_n^x et C_p^x : coefficients de capture des électrons et des trous

($x \equiv ct$ pour la QBC et $x \equiv vt$ pour la QBV)

Pour les deux queues de bandes, les équations cinétiques pour un niveau E s'écrivent:

$$\begin{aligned} \frac{d [N_{ct}(E)f^{ct}(E)]}{dt} &= U_2 - U_1 + U_4 - U_3 = \\ &= nC_n^{ct} N_{ct}(E)[1-f^{ct}(E)] - e_n^{ct}(E)N_{ct}(E)f^{ct}(E) + \\ &\quad + e_p^{ct}(E)N_{ct}(E)[1-f^{ct}(E)] - pC_p^{ct} N_{ct}(E)f^{ct}(E) \end{aligned} \quad (C.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{d [N_{vt}(E)f^{vt}(E)]}{dt} &= U_6 - U_5 + U_8 - U_7 = \\ &= nC_n^{vt} N_{vt}(E)[1-f^{vt}(E)] - e_n^{vt}(E)N_{vt}(E)f^{vt}(E) + \\ &\quad + e_p^{vt}(E)N_{vt}(E)[1-f^{vt}(E)] - pC_p^{vt} N_{vt}(E)f^{vt}(E) \end{aligned} \quad (C.4)$$

C. III. 2. Bilan sur les liaisons pendantes

Les transitions électroniques qui impliquent les états des liaisons pendantes sont représentées sur la figure C.3.

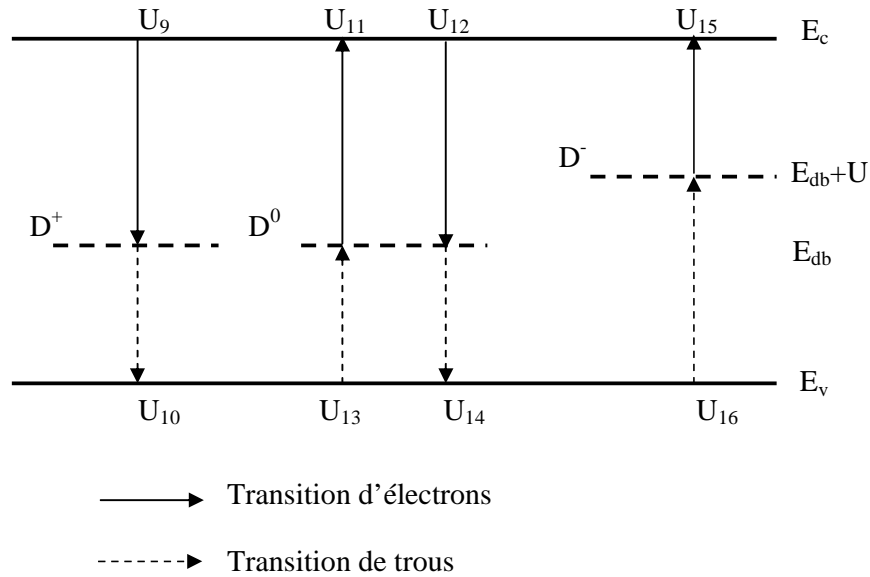


Figure C.3: Représentation des transitions thermiques sur les liaisons pendantes.

Les taux de capture et d'émission des électrons et des trous entre les liaisons pendantes et les deux queues de bandes sont résumés dans le tableau C.2.

Transition	Sens	Notation	Taux de transition
$D^+ + e \rightarrow D^0$	Capture d'un électron de la BC par D^+	U_9	$nC_n^+ N_{db} f^+$
$D^+ \rightarrow D^0 + t$	Emission d'un trou de D^+ vers la BV	U_{10}	$e_p^+ f^+ N_{db}$
$D^0 \rightarrow D^+ + e$	Emission d'un électron de D^0 vers la BC	U_{11}	$e_n^0 N_{db} f^0$
$D^0 + e \rightarrow D^-$	Capture d'un électron de la BC par D^0	U_{12}	$nC_n^0 N_{db} f^0$
$D^0 + t \rightarrow D^+$	Capture d'un trou de la BV par D^0	U_{13}	$pC_p^0 N_{db} f^0$
$D^0 \rightarrow D^- + t$	Emission d'un trou de D^0 vers la BV	U_{14}	$e_p^0 N_{db} f^0$
$D^- \rightarrow D^0 + e$	Emission d'un électron de D^- vers la BC	U_{15}	$e_n^- N_{db} f^-$
$D^- + t \rightarrow D^0$	Capture d'un trou de la BV par D^-	U_{16}	$pC_p^- N_{db} f^-$

f^y : fonction d'occupation relative à l'état de charge y de la LP

e_n^y et e_p^y : coefficients d'émission des électrons et des trous

C_n^y et C_p^y : coefficient de capture des électrons et des trous

N_{db} : concentration totale des liaisons pendantes

Tableau C.2: Les différents taux de capture et d'émission entre les états corrélés des LPs et les états étendus.

Les équations cinétiques régissant les concentrations des LPs dans les différents états de charges sont données par:

$$\begin{aligned} \frac{d[N_{db} f^+]}{dt} &= U_{11} + U_{13} - U_9 - U_{10} = \\ &= e_n^0 N_{db} f^0 + pC_p^0 N_{db} f^0 - nC_n^+ N_{db} f^+ - e_p^+ N_{db} f^+ \end{aligned} \quad (C.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{d[N_{db} f^-]}{dt} &= U_{12} + U_{14} - U_{15} - U_{16} = \\ &= nC_n^0 N_{db} f^0 + e_p^0 N_{db} f^0 - e_n^- N_{db} f^- - pC_p^- N_{db} f^- \end{aligned} \quad (C.6)$$

$$\frac{d[N_{db} f^0]}{dt} = - \left[\frac{d[N_{db} f^+]}{dt} + \frac{d[N_{db} f^-]}{dt} \right] \quad \text{car} \quad f^0 + f^+ + f^- = 1 \quad (C.7)$$

C. III. 3. Equilibre thermodynamique

A l'équilibre thermodynamique, la probabilité d'occupation d'un niveau E d'une queue de bande, est donnée par la fonction de Fermi-Dirac:

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F0}}{k_B T}\right)} \quad (\text{C.8})$$

où E_{F0} est le niveau de Fermi.

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

$$n_0 = N_c \exp\left(\frac{E_{F0} - E_c}{k_B T}\right) \quad (\text{C.9.a})$$

$$p_0 = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_{F0}}{k_B T}\right) \quad (\text{C.9.b})$$

où N_c et N_v sont les densités d'états équivalentes aux bords de la bande interdite et qui s'écrivent: $N_c = (k_B T) N_{ct}^0$ et $N_v = (k_B T) N_{vt}^0$. Pour déterminer n_0 et p_0 pour chaque température, nous avons besoin du niveau de Fermi correspondant. Pour cela, nous devons résoudre l'équation de neutralité qui s'écrit de la manière suivante:

$$n_0 - p_0 + Q_{ct0} - Q_{vt0} + Q_{db0}^- - Q_{db0}^+ = 0 \quad (\text{C.10})$$

où Q_{ct0} et Q_{vt0} sont les densités totales à l'équilibre des charges négatives et positives sur les états de la QBC et de la QBV respectivement, et sont données par:

$$Q_{ct0} = \int_{E_v}^{E_c} N_{ct}(E) f_0(E) dE \quad (\text{C.11.a})$$

$$Q_{vt0} = \int_{E_v}^{E_c} N_{vt}(E) [1 - f_0(E)] dE \quad (\text{C.11.b})$$

Q_{db0}^- et Q_{db0}^+ sont les concentrations de LPs dans les états de charges D^- et D^+ respectivement. La répartition des électrons à l'équilibre sur ces deux niveaux corrélés des LPs ne peut pas être décrite par la fonction de Fermi-Dirac. Les fonctions d'occupation $f_0^+(E)$, $f_0^0(E)$ et $f_0^-(E)$ expriment la probabilité pour que la LP soit dans l'état

de charge D^+ , D^0 et D^- respectivement. Ces fonctions sont obtenues à partir de la statistique générale régissant les défauts à plusieurs états de charge [46]. Les expressions des fonctions d'occupation sont les suivantes:

$$\begin{cases} f_0^+ = \frac{1}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_{F0} - E_{db}}{k_B T}\right) + \exp\left(\frac{2(E_{F0} - E_{db}) - U}{k_B T}\right)} \\ f_0^0 = 2 f_0^+ \exp\left(\frac{E_{F0} - E_{db}}{k_B T}\right) \\ f_0^- = f_0^+ \exp\left(\frac{2(E_{F0} - E_{db}) - U}{k_B T}\right) \end{cases} \quad (C.12)$$

où E_{db} est le niveau d'énergie discret correspondant à la LP dans les états de charge D^0 ou D^+ , et U est l'énergie de corrélation. Les concentrations totales des LPs négatives et positives respectivement s'écrivent alors:

$$Q_{db0}^- = N_{db} f_0^- \quad (C.13.a)$$

$$Q_{db0}^+ = N_{db} f_0^+ \quad (C.13.b)$$

où N_{db} est la concentrations totale de LPs.

En remplaçant toutes les charges par leurs expressions respectives, il ne reste qu'une seule inconnue dans l'équation (C.10) qui est le niveau de Fermi E_{F0} . La méthode Newton est utilisée pour la résolution numérique d'une telle équation non linéaire pour calculer E_{F0} pour chaque température.

Coefficients d'émission thermique

Nous avons vu apparaître les coefficients d'émission des porteurs, dans les différents taux d'émission des différents niveaux, établis par la statistique de HSR. Ces coefficients pour les états de queues de bandes et des liaisons pendantes sont déterminés analytiquement à l'équilibre thermique en utilisant le principe du bilan détaillé [14,15]. Les coefficients d'émission pour les queues de bandes déduits à partir des équations cinétiques à l'équilibre:

$$e_n^{ct(vt)}(E) = C_n^{ct(vt)} n_1(E) \quad (C.14.a)$$

$$e_p^{ct(vt)}(E) = C_p^{ct(vt)} p_1(E) \quad (C.14.b)$$

où n_1 et p_1 sont les concentrations d'électrons et de trous dans la bande de conduction et la bande de valence, respectivement, dans le cas où le niveau de Fermi coïncide avec le niveau E . Elles sont données par:

$$n_1(E) = N_c \exp \frac{E - E_c}{k_B T} \quad (\text{C.15.a})$$

$$p_1(E) = N_v \exp \frac{E_v - E}{k_B T} \quad (\text{C.15.b})$$

Pour les coefficients d'émission des LPs dans leurs différents états de charge, déduits également en appliquant le principe du bilan détaillé pour chaque niveau d'énergie à l'équilibre. On obtient:

$$e_n^- = n_0 \frac{f_0^0}{f_0^-} C_n^0 \quad (\text{C.16.a})$$

$$e_n^- = n_0 \frac{f_0^+}{f_0^0} C_n^+ \quad (\text{C.16.b})$$

$$e_p^0 = p_0 \frac{f_0^-}{f_0^0} C_p^- \quad (\text{C.16.c})$$

$$e_p^+ = p_0 \frac{f_0^0}{f_0^+} C_p^0 \quad (\text{C.16.d})$$

C. IV. Formulation et mise en équations du MPC

C. IV. 1. Introduction

Dans l'expérience du MPC, l'échantillon est éclairé par une lumière monochromatique modulée sinusoïdalement dans le temps. La modulation de l'excitation lumineuse se traduit sur le taux de génération qui peut s'écrire de la forme $G = G_{dc} + G_{ac} \exp(j\omega t)$, avec $G_{dc} \gg |G_{ac}|$. Le principe de l'expérience du MPC est donc d'appliquer une faible perturbation alternative à un échantillon qui nous permettra de négliger les termes croisés du deuxième ordre dans les équations qui vont suivre. Lorsque le régime permanent est établi, et que la réponse du système est linéaire, on obtient un photocourant lui aussi modulé sinusoïdalement mais avec un déphasage par rapport à la lumière d'excitation. Cela nous permettra de faire une analyse en régime de petits signaux en développant toutes les grandeurs physiques F considérées, en une partie continue, avec un indice dc, plus une partie alternative, qui est une grandeur complexe, avec un indice ac:

$F = F_{dc} + F_{ac} \exp(j\omega t)$ où ω est la fréquence du signal et j est le nombre complexe tel que $j^2 = -1$. Les expressions des concentrations des porteurs libres, et donc celle du courant, peuvent s'écrire de la forme:

$$\begin{aligned} n &= n_{dc} + n_{ac} \exp(j\omega t) \\ p &= p_{dc} + p_{ac} \exp(j\omega t) \\ I &= I_{dc} + I_{ac} \exp(j\omega t) \end{aligned} \quad (C.17)$$

L'expression générale du courant est donnée par:

$$I = Sq\xi(\mu_n n + \mu_p p) \quad (C.18)$$

où q est la valeur absolue de la charge d'un électron, ξ est le champ électrique appliqué, S la section à travers laquelle circule le courant, et μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous respectivement dans les états étendus.

Pour simplifier le traitement et pouvoir donner une solution à ce problème, il nous faut l'hypothèse que toutes les grandeurs sont homogènes dans tout le matériau. Cela est seulement valable pour les échantillons à géométrie coplanaire. Pour notre calcul, nous considérons le cas d'une couche mince munie d'électrodes coplanaires, éclairées de façon uniforme, en supposant aussi que les concentrations n et p sont uniformes sur toute la surface de l'échantillon.

Pour déterminer le photocourant modulé, il faut calculer les concentrations de charges n et p en utilisant les équations fondamentales des semiconducteurs. La neutralité de charge doit être vérifiée. La condition de neutralité tient compte de toutes les charges fixes et mobiles. Nous utilisons aussi l'équation de continuité des électrons qui exprime l'interaction entre les électrons et les états des queues de bandes et les liaisons pendantes, soit le système équations:

L'équation de neutralité:

$$n - p + \int_{E_v}^{E_c} N_{ct}(E) f^{ct}(E) dE - \int_{E_v}^{E_c} N_{vt}(E) [1 - f^{vt}(E)] dE + N_{db} (f^- - f^+) = 0 \quad (C.19)$$

L'équation de continuité pour les électrons:

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} = & G - \int_{E_v}^{E_c} \left[n C_n^{ct} [1 - f^{ct}(E)] - e_n^{ct}(E) f^{ct}(E) \right] N_{ct}(E) dE - \\ & - \int_{E_v}^{E_c} \left[n C_n^{vt} [1 - f^{vt}(E)] - e_n^{vt}(E) f^{vt}(E) \right] N_{vt}(E) dE + \\ & + [e_n^- f^- - (C_n^0 n - e_n^0) f^0 - n C_n^+ f^+] N_{db} \end{aligned} \quad (C.20)$$

C. IV. 2. Occupation des états localisés dans les deux régimes (dc et ac)

Pour établir les équations (C.19) et (C.20), on a besoin des fonctions d'occupation qui tiennent compte de la modulation c'est-à-dire des deux termes dc et ac introduits par les expressions de n et p de (C.17). Ces fonctions s'écrivent à leur tour de la forme suivante pour tous les états localisés pris en compte:

$$f(E) = f_{dc}(E) + f_{ac}(E) \exp(j\omega t) \quad (C.22)$$

Les deux queues de bandes:

Les queues de bandes peuvent être assimilées à des distributions continues d'états monovalents et indépendants. La fonction d'occupation sur ces états est déduite de la statistique de HSR. L'équation cinétique qui régit l'occupation des électrons sur la QBC et la QBV est la suivante:

$$\begin{aligned} \frac{d[N_x(E) f^x(E)]}{dt} = & n C_n^x N_x(E) [1 - f^x(E)] - e_n^x(E) N_x(E) f^x(E) + \\ & + e_p^x(E) N_x(E) [1 - f^x(E)] - p C_p^x N_x(E) f^x(E) \end{aligned} \quad (C.23)$$

($x \equiv ct$ pour la QBC et $x \equiv vt$ pour la QBV)

Comme la modulation du taux de génération est faible, on fait un calcul en régime de petits signaux en substituant dans l'équation (C.23) les concentrations n et p par leurs expressions données en (C.17) et la fonction d'occupation (C.22). En égalisant les parties réelles et les parties imaginaires entre elles, on déduit de l'équation (C.23) les expressions suivantes:

$$n_{dc} C_n^x (1 - f_{dc}^x(E)) - e_n^x(E) f_{dc}^x(E) + e_p^x (1 - f_{dc}^x(E)) + p_{dc} C_p f_{dc}^x(E) = 0 \quad (C.24.a)$$

$$\begin{aligned}
 j\omega f_{ac}^x(E) = & (-n_{dc}C_n^x - e_n^x(E) - e_p^x(E) - p_{dc}C_p^x)f_{ac}^x(E) + \\
 & + n_{ac}C_n^x(1 - f_{dc}^x(E)) - p_{ac}C_p^x f_{dc}^x(E)
 \end{aligned} \tag{C.24.b}$$

Ces équations nous permettent de déterminer la fonction d'occupation par les électrons en régime stationnaire ou continu (f_{dc}^x) ainsi que celle en régime alternatif (f_{ac}^x) sur les deux queues de bandes:

- *Régime continu (dc):*

$$f_{dc}^x(E) = \frac{n_{dc}C_n^x + e_p^x(E)}{n_{dc}C_n^x + e_n^x(E) + p_{dc}C_p^x + e_p^x(E)} \tag{C.25.a}$$

- *Régime alternatif (ac):*

$$f_{ac}^x(E) = \frac{n_{ac}C_n^x [1 - f_{dc}^x(E)] - p_{ac}C_p^x f_{dc}^x(E)}{j\omega + n_{dc}C_n^x + e_n^x(E) + p_{dc}C_p^x + e_p^x(E)} \tag{C.25.b}$$

Les liaisons pendantes:

Nous calculons les fonctions d'occupation relatives à chaque état de charge de la liaison pendante suivant l'idée de Schokley-Read, en faisant le bilan des échanges entre les liaisons pendantes et les états étendus. A partir des variations des taux d'occupation relatives à chaque centre, on peut construire un système d'équations qui nous permet de calculer ces fonctions. Pour cela nous reprenons les équations (C.5) et (C.6) et nous adoptons pour plus de simplicité le changement de variables, proposé par Okamoto *et al.* [47], suivant:

$$N^0 = e_p^0 + n_{dc}C_n^0 \tag{C.26.a}$$

$$N^+ = e_p^+ + n_{dc}C_n^+ \tag{C.26.b}$$

$$P^0 = e_n^0 + p_{dc}C_p^0 \tag{C.26.c}$$

$$P^- = e_n^- + p_{dc}C_p^- \tag{C.26.d}$$

Alors les équations (C.5) et (C.6) vont s'écrire simplement de la manière suivante:

$$\frac{df^+}{dt} = P^0 f^0 - N^+ f^+ \quad (\text{C.27.a})$$

$$\frac{df^-}{dt} = N^0 f^0 - P^- f^- \quad (\text{C.27.b})$$

$$\frac{df^0}{dt} = [N^0 + P^0] f^0 - N^+ f^+ + P^- f^- \quad (\text{C.27.c})$$

Dans ce système d'équations aussi, nous substituons les concentrations n , p et les fonctions d'occupations par leurs expressions complexes. Nous allons séparer la partie continue de la partie alternative afin de tirer les fonctions d'occupations dans les deux régimes et pour les trois états de charge.

- *Régime continu (dc)*

La composante continue de ce système d'équations (C.27) est la suivante:

$$N_{dc}^0 f_{dc}^0 - P_{dc}^- f_{dc}^- = 0 \quad (\text{C.28.a})$$

$$P_{dc}^0 f_{dc}^0 - N_{dc}^+ f_{dc}^+ = 0 \quad (\text{C.28.b})$$

$$f_{dc}^0 + f_{dc}^+ + f_{dc}^- = 1 \quad (\text{C.28.c})$$

En résolvant ce système d'équations, nous obtenons les expressions de, f_{dc}^+ , f_{dc}^0 et f_{dc}^- en fonction des différents taux d'émission et de capture pour une énergie donnée. Cela nous donne:

$$f_{dc}^+ = \frac{P_{dc}^0 P_{dc}^-}{P_{dc}^0 P_{dc}^- + N_{dc}^+ P_{dc}^- + N_{dc}^0 N_{dc}^+} \quad (\text{C.29.a})$$

$$f_{dc}^0 = \frac{N_{dc}^+}{P_{dc}^0} f_{dc}^+ \quad (\text{C.29.b})$$

$$f_{dc}^- = \frac{N_{dc}^0}{P_{dc}^-} f_{dc}^0 \quad (\text{C.29.c})$$

Ces équations ont déjà été obtenues et utilisées par d'autres auteurs pour étudier la photoconductivité dans le a-Si:H [47-49]. Notons que l'expression de f_{dc}^- dans l'équation (C.29.c) est obtenue à partir de l'expression f_{dc}^+ par une simple transformation de notation que nous appelons τ et qui est la suivante: changer toutes les lettres N ou n en P ou p (tous les P ou p en N ou n) et tous les signes $-$ en $+$ (tous les signes $+$ en $-$). Nous remarquons que l'expression f_{dc}^0 reste inchangée par la transformation τ [32].

• *Régime alternatif (ac)*

Pour la composante alternative on obtient

$$N^0 f_{ac}^0 - p_{ac} C_p^- f_{dc}^- + n_{ac} C_n^0 f_{dc}^0 = f_{ac}^- (j\omega + P^-) \quad (C.32.a)$$

$$P^0 f_{ac}^0 + p_{ac} C_p^0 f_{dc}^0 - n_{ac} C_n^+ f_{dc}^+ = f_{ac}^+ (j\omega + N^+) \quad (C.32.b)$$

$$f_{ac}^0 + f_{ac}^+ + f_{ac}^- = 0 \quad (C.32.c)$$

Nous déduisons les expressions de f_{ac}^+ , f_{ac}^0 et f_{ac}^- en fonction des différents taux d'émission et de capture pour une énergie donnée, après résolution de ce système de trois équations à trois inconnues. Notons que les concentrations n_{ac} et p_{ac} sont des grandeurs complexes et peuvent s'écrire de la manière suivante:

$$\begin{aligned} n_{ac} &= n_r + jn_i \\ p_{ac} &= p_r + jp_i \end{aligned} \quad (C.33)$$

Après simplification nous obtenons les expressions des fonctions d'occupation du régime alternatif:

$$\begin{cases} f_{ac}^+ = n_r \alpha_n^+ + n_i \beta_n^+ + p_r \alpha_p^+ + p_i \beta_p^+ + j(-n_r \beta_n^+ + n_i \alpha_n^+ - p_r \beta_p^+ + p_i \alpha_p^+) \\ f_{ac}^0 = n_r \alpha_n^0 + n_i \beta_n^0 + p_r \alpha_p^0 + p_i \beta_p^0 + j(-n_r \beta_n^0 + n_i \alpha_n^0 - p_r \beta_p^0 + p_i \alpha_p^0) \\ f_{ac}^- = n_r \alpha_n^- + n_i \beta_n^- + p_r \alpha_p^- + p_i \beta_p^- + j(-n_r \beta_n^- + n_i \alpha_n^- - p_r \beta_p^- + p_i \alpha_p^-) \end{cases} \quad (C.34)$$

Nous avons détaillé les expressions des coefficients de n_r , p_r , n_i et p_i dans l'annexe A.

C. IV. 3. Calcul du MPC

L'introduction du terme de modulation sur les différentes grandeurs dans les équations (C.19) et (C.20) conduit à un groupe de quatre équations explicitées ci-dessous:

L'équation de neutralité en régime stationnaire:

$$n_{dc} - p_{dc} + Q_{ct} - Q_{vt} + Q_{db}^- - Q_{db}^+ = 0 \quad (C.35)$$

où Q_{ct} et Q_{vt} sont les densités totales des charges négatives et positives sur la QBC et la QBV respectivement, Q_{db}^- et Q_{db}^+ sont les concentrations de LPs dans les états de charges D^- et D^+ respectivement.

L'équation de recombinaison en régime stationnaire:

$$0 = G_{dc} - R_{ct} - R_{vt} - R_{db} \quad (C.36)$$

où R_{ct} , R_{vt} et R_{db} sont les taux nets de recombinaison sur la QBC, la QBV et les LPs, respectivement.

L'équation de conservation de charge en régime alternatif:

$$n_{ac} - p_{ac} + \int_{E_v}^{E_c} N_{ct}(E) f_{ac}^{ct}(E) dE + \int_{E_v}^{E_c} N_{vt}(E) f_{ac}^{vt}(E) dE + N_{db} (f_{ac}^- - f_{ac}^+) = 0 \quad (C.37)$$

L'équation de continuité pour les électrons en régime alternatif:

$$\begin{aligned} j\omega n_{ac} = & G_{ac} + \int_{E_v}^{E_c} [(n_{dc} C_n^{ct} + e_n(E)) f_{ac}^{ct} - n_{ac} C_n^{ct} (1 - f_{dc}^{ct}(E))] N_{ct}(E) dE \\ & + \int_{E_v}^{E_c} [(n_{dc} C_n^{vt} + e_n(E)) f_{ac}^{vt} - n_{ac} C_n^{vt} (1 - f_{dc}^{vt}(E))] N_{vt}(E) dE \\ & + [e_n^-(E) f_{ac}^- - n_{ac} C_n^+ f_{ac}^+ - n_{ac} C_n^+ f_{dc}^+] N_{db} \\ & - [n_{ac} C_n^0 f_{dc}^0 + (n_{dc} C_n^0 - e_n^0) f_{ac}^0] N_{db} \end{aligned} \quad (C.38)$$

Les concentrations n_{dc} et p_{dc} sont calculées à partir du système d'équations non linéaire formé par les équations (C.35) et (C.36) du régime stationnaire [50].

Pour calculer les concentrations en régime alternatif n_{ac} et p_{ac} , il faut là également séparer au préalable leur partie réelle et leur partie imaginaire (voir équations C.33) et les introduire ainsi dans les équations (C.37) et (C.38). nous aboutissons ainsi à un système linéaire de quatre équations à quatre inconnues: n_r , p_r , n_i et p_i . Le système à résoudre sous forme matricielle s'écrit comme suit:

$$\begin{pmatrix} A_1 & B_1 & C_1 & D_1 \\ A_2 & B_2 & C_2 & D_2 \\ A_3 & B_3 & C_3 & D_3 \\ A_4 & B_4 & C_4 & D_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_r \\ p_r \\ n_i \\ p_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -G_{ac} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (C.39)$$

Les coefficients des différentes concentrations sont explicités en détail dans l'annexe B.

La composante alternative du courant s'écrit alors:

$$I_{ac} = Sq\xi (\mu_n n_{ac} + \mu_p p_{ac}) = Sq\xi [(\mu_n n_r + \mu_p p_r) + j(\mu_n n_i + \mu_p p_i)] \quad (C.40)$$

Le déphasage du photocourant par rapport à l'excitation est donné par:

$$\tan \phi = - \frac{\mu_n n_i + \mu_p p_i}{\mu_n n_r + \mu_p p_r} \quad (C.41)$$

$$\text{Avec} \quad I_{ac} = |I_{ac}| e^{-i\phi}$$

On déduit alors l'amplitude du photocourant modulé:

$$|I_{ac}| = Sq\xi \sqrt{(\mu_n n_r + \mu_p p_r)^2 + (\mu_n n_i + \mu_p p_i)^2} \quad (C.42)$$

C. IV. 4. Formules de reconstruction de la densité d'états

Plusieurs expressions analytiques de la densité d'états, utilisant le courant MPC et son déphasage, ont été établies pour les semiconducteurs amorphes de manière générale, aussi bien en régime hautes fréquences (HF) qu'en régime basses fréquences (BF). Cela a été possible à l'aide de simplifications réalisées sur l'écriture des équations cinétiques. Pour le régime HF, dans lequel on a la prédominance du processus de piégeage et dépiégeage, nous pouvons citer principalement les formules établies par Brüggemann *et al.* [27] et Hattori *et al.* [43]. Koropecski *et al.* [44] ont proposé une relation pour les BF où on a prédominance de la recombinaison.

Régime HF (HF-MPC)**Formule de Brüggemann**

Dans notre travail nous calculons la densité d'états à partir du photocourant modulé et du déphasage en utilisant la formule de Brüggemann [27]. Elle a été établie en régime hautes fréquences à partir des équations cinétiques écrites simplement dans le cadre du modèle du multipliéage. Elle est valable seulement lorsque le courant provient d'un seul type de porteurs de charge et pour un échantillon à géométrie coplanaire. De plus, seule une distribution continue d'états monovalents de même type est prise en compte. Ainsi, pour le cas où c'est les électrons qui sont majoritaires, elle s'écrit:

$$N(E_{\omega n}) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{C_n k_B T} \left(S q \xi \mu_n G_{ac} \frac{\sin \phi}{|I_{ac}|} - \omega \right) \quad (C.43)$$

avec

$$E_c - E_{\omega n} = k_B T \log \frac{v_n}{\omega} \quad (C.44)$$

où k_B est la constante de Boltzmann, T est la température, q est la valeur absolue de la charge d'un électron, ξ est le champ électrique appliqué, S la section à travers laquelle circule le courant, E_c est l'énergie du bas de la bande de conduction, $E_{\omega n}$ l'énergie des électrons sondés à la fréquence f et v_n la fréquence caractéristique des états dans la bande interdite qui peut s'écrire aussi sous la forme $v_n = C_n k_B T N(E_c)$, C_n est le coefficient de capture de l'état d'énergie considéré.

La relation (C.44) vient du fait que cette technique sonde les pièges pour lesquels la fréquence d'émission thermique coïncide avec la pulsation de la lumière c'est-à-dire $e_n(E_{\omega}) = \omega$. La formule de Brüggemann sera utilisée pour exploiter notre simulation du MPC pour retrouver le profile d'occupation des états localisés. Sa validité sera discutée et commentée dans le chapitre suivant

Formule de Hattori

Hattori [43] a proposé une formule similaire à partir d'un traitement différent dans la procédure de résolution d'équations similaires à celles de Brüggemann. Elle s'écrit sous la forme:

$$N(E_{\omega n}) = \frac{\mu_n}{C_n k_B T} S q \xi G_{ac} \omega \frac{d}{d\omega} \left[\frac{\cos(\phi)}{|I_{ac}|} \right] \quad (C.45)$$

Expérimentalement, elle est plus rarement utilisée par rapport à celle de Brüggenmann à cause de l'existence du terme de la dérivée. Cette dernière a tendance à amplifier le bruit accompagnant généralement le signal.

Dans le régime haute fréquence, les porteurs de charges libres subissent le mécanisme de piégeage et dépiégeage. Nous considérons une distribution arbitraire d'états monovalents. Les pièges qui assurent ce mécanisme se situent à l'extérieur des niveaux de démarcation, E_{dn} et E_{dp} pour les porteurs libres [52,53]. Ces niveaux vérifient la condition suivante: la probabilité qu'un électron (trou) d'être émis vers la bande de conduction (de valence) est la même que d'être capturé on écrit:

$$e_n(E_{dn}) \equiv C_n n \quad \text{et} \quad e_p(E_{dp}) \equiv C_p p \quad (\text{C.46})$$

Comme les expressions de ces niveaux de démarcation sont compliquées, nous les substituons souvent aux quasi-niveaux de Fermi des porteurs libres car ce sont des niveaux très proches [16]. Par conséquent, si on est à une énergie supérieure à E_{Fn} ou à une énergie inférieure à E_{Fp} , la probabilité d'émission est plus importante que celle de la capture, on écrit: $E > E_{Fn} \Rightarrow e_n(E) \gg C_n n$ et $E < E_{Fp} \Rightarrow e_p(E) \gg C_p p$. Les pièges qui se trouvent en dehors de l'intervalle délimité par E_{Fn} et E_{Fp} sont au régime de piégeage et dépiégeage.

Nous définissons aussi des niveaux de démarcation pour les porteurs piégés. Dans notre cas, la probabilité qu'un électron (trou) d'être émis vers la bande de conduction (de valence) est la même que de capturer un trou (électron) et d'être recombiné. Les expressions de ces niveaux sont compliquées aussi, alors on peut les remplacer aussi par les quasi-niveaux de Fermi des porteurs piégés on écrit:

$$e_n(E_{tn}) = e_p(E_{tp}) \equiv C_n n + C_p p \quad (\text{C.47})$$

Dans ce cas, pour les énergies comprises entre ces quasi-niveaux, $E_{tn} > E > E_{tp}$ on a alors: $C_n n + C_p p \gg e_n(E)$ et $C_n n + C_p p \gg e_p(E)$

La probabilité de recombinaison est plus importante que celle de réémission vers les états étendus. A partir de (C.46) et (C.47), il se vérifie

$$C_n n + C_p p > C_n n \quad \text{donc} \quad e_n(E_{tn}) \gg e_n(E_{Fn}) \quad \text{alors} \quad E_{tn} > E_{Fn}$$

$$C_n n + C_p p > C_p p \quad \text{donc} \quad e_p(E_{tp}) \gg e_p(E_{Fp}) \quad \text{alors} \quad E_{tp} > E_{Fp}$$

Pour un matériau de type n qui vérifie l'inégalité suivante, $C_n n \gg C_p p$, alors on peut confondre E_{Fn} et E_{dn} . Pour un matériau de type n qui vérifie l'inégalité $C_n n \gg C_p p$, de la relation (C.47), nous déduisons que nous pouvons confondre E_{Fn} et E_{tn} . Nous définissons donc le régime haute fréquence pour $\omega \gg \omega_c$, où $\omega_c = C_n n_{dc} + C_p p_{dc}$ est la fréquence seuil ou fréquence de transition. L'expérience du photocourant modulé HF est sensible au régime de piégeage et dépiégeage.

Régime BF (LF-MPC)

Formule de Koropecski

Des études ont été publiées dans le domaine de l'exploitation du MPC dans le régime de basses fréquences. Koropecski *et al.* ont proposé une formule intéressante dans le régime basses fréquences [42]. D'autres expressions simplifiées ont été établies [44]. En régime BF (typiquement entre 0 et 200 Hz) c'est la recombinaison qui prédomine. Il a été montré que la phase ϕ dépend linéairement de la fréquence ω et que la pente est liée à la densité d'états prise au quasi-niveau des électrons E_{Fn} . Cette équation s'écrit:

$$g(E_{Fn}) = \frac{1}{\ln 2} \frac{G_{dc}}{k_B T} \frac{\tan(\phi)}{\omega} \quad (\text{C.48})$$

Nous aurons à revenir à cette relation à la fin du chapitre D pour identifier les différents régimes du MPC en fonction de la fréquence.

C. V. Paramètres et procédure de calcul

Nous avons besoin des valeurs des paramètres qui apparaissent dans les équations pour effectuer la simulation numérique de la technique du MPC. Les paramètres relatifs à la densité d'états introduite dans notre simulation se veulent représentatifs du a-Si:H de bonne qualité. Ces paramètres sont donnés dans le tableau C.3.

Largeur du gap de mobilité:	$E_G = 1.8 \text{ eV}$
Mobilité des porteurs libres:	$\mu_n = 10 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}\text{s}^{-1}$ $\mu_p = 1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}\text{s}^{-1}$
Queue de bande de conduction:	$N_{ct}^0 = 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ $k_B T_c = 30 \text{ meV}$ $C_n^{ct} = C_p^{ct} = 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
Queue de bande de valence:	$N_{vt}^0 = 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ $k_B T_v = 70 \text{ meV}$ $C_n^{vt} = C_p^{vt} = 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
Liaisons pendantes:	$N_{db} = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ $U = 0.4 \text{ eV}$ $E_{db} = 0.85 \text{ eV}$ $C_n^0 = C_p^0 = 3 \times 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ $C_n^+ = C_p^- = 50 \times C_n^0$

Tableau C.3: Paramètres microscopiques du a-Si:H utilisés dans la simulation numérique.

Description du calcul numérique pour le régime stationnaire (dc)

L'équation de neutralité (C.35) et celle de la recombinaison (C.36) forment un système d'équations non linéaires dont les inconnues sont les concentrations des électrons et des trous libres n_{dc} et p_{dc} . Comme le a-Si:H non dopé présente un caractère de type n, la concentration des électrons est supérieure à celle des trous de plusieurs ordres de grandeur. Pour cette raison, nous préférons généralement prendre comme variables les deux quasi-niveaux de Fermi E_{Fn} et E_{Fp} qui restent du même ordre de grandeur dans les calculs. Les concentrations des électrons et des trous s'écrivent en fonction des quasi-niveaux de Fermi comme suit:

$$n = N_c^0 \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_c}{k_B T}\right) \quad (C.45.a)$$

$$p = N_v^0 \exp\left(\frac{E_v - E_{Fp}}{k_B T}\right) \quad (C.45.b)$$

Pour évaluer numériquement n et p il faut calculer numériquement E_{Fn} et E_{Fp} .

Le système doit être résolu par une méthode numérique. Nous avons choisi la méthode itérative de Newton où seules les dérivées partielles du premier ordre pour les termes en fonction des quasi-niveaux de Fermi sont considérées.

Le calcul des intégrales où intervient la densité d'états est fait par une méthode numérique. Nous utilisons la méthode d'intégration des trapèzes où le pas en énergie est le millièème de la largeur du gap. Nous pouvons ainsi résoudre les équations en E_{Fn} et E_{Fp} nécessaires pour le calcul des concentrations n_{dc} et p_{dc} .

Description du calcul numérique pour le régime alternatif (ac)

Nous avons développé une simulation numérique qui permet de calculer le photocourant modulé pour chaque fréquence, température et flux lumineux incident. A une fréquence f donc à une pulsation $\omega = 2\pi f$, et à une température T données, nous calculons les coefficients de la matrice (C.39). Les parties réelles et imaginaires de n_{ac} et p_{ac} sont ensuite calculées à partir de la résolution du système d'équations linéaires (C.39). Le photocourant modulé ainsi que le déphasage ϕ sont déterminés.

Nous avons écrit un programme en utilisant le développeur Delphi 5 qui dérive du Pascal. Ce développeur permet de manipuler et de stocker des chiffres grâce à la propriété "extended" pour la déclaration des variables permettant de bénéficier d'une précision à 20 chiffres qui est dans notre cas suffisant pour éviter les erreurs de troncature pouvant résulter de la manipulation de nombres d'ordres de grandeur très différents. De plus ce logiciel qui est basé sur la programmation orienté objet offre aussi l'avantage d'élaborer une ou plusieurs interfaces graphiques.

Chapitre D

Simulation numérique du MPC et reconstruction de la densité d'états

D. I. Introduction

La technique du photocourant est basée sur le fait que les états localisés à une énergie donnée, sont reliés au déphasage et à l'amplitude du photocourant modulé (MPC) à des fréquences spécifiques. Ces deux grandeurs sont utilisées pour extraire la densité d'états. Il est à noter que seule la région des hautes fréquences des spectres expérimentaux correspond à la densité d'états [42].

Dans ce chapitre, nous présentons les résultats obtenus à partir de la simulation numérique présentée précédemment. Le courant MPC ainsi que le déphasage calculés sont utilisés pour reconstruire une partie de la densité d'états localisés $N(E_{\text{on}})$ dans le gap du a-Si:H en régime hautes fréquences (HF) à partir de la formule de Brüggemann [27]. Son domaine de validité sera discuté. L'occupation de la queue de bande de conduction (QBC) et de celle de la bande de valence (QBV) par les porteurs de charge sont explicitées. L'influence des paramètres microscopiques les plus importants, considérés séparément, est présentée. La transition entre les régimes basses fréquences (BF) et HF, en fonction de la température, est identifiée pour différentes valeurs du taux de génération. Nous finirons par une discussion sur tous les résultats obtenus.

D. II. Reconstruction de la densité d'états en régime HF

Avant de calculer le MPC et le déphasage ϕ , nous avons validé notre code de calcul pour la partie continue en traçant la photoconductivité stationnaire à partir de n_{dc} et de p_{dc} en fonction de la température et en fonction du taux de génération. Les résultats obtenus sont en accord avec des travaux déjà publiés sur la photoconductivité stationnaire calculée dans le a-Si:H [48-51]. Il est à noter que les parties alternatives des différentes concentrations et fonctions d'occupation dépendent étroitement des grandeurs en régime stationnaire ou continues (dc). Nous rappelons ici que la concentration d'électrons libres n_{dc} est supérieure à celle des trous libres p_{dc} pour toute température et pour les taux de

génération dont il sera question dans ce travail. Cela confirme le type n bien connu du a-Si:H non dopé.

Nous avons utilisé dans notre calcul les paramètres microscopiques standard listés dans le tableau C.3 du § C.IV correspondant à un échantillon de a-Si:H dit de bonne qualité électronique. Le coefficient d'absorption est considéré constant et sa valeur est $\alpha = 4 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$. Il correspond à la forte absorption car l'énergie des photons est supérieure à la largeur du gap qui engendre une génération de porteurs libres bande à bande. Le flux continu est pris égal à $\phi_{dc} = 10^{13} \text{ photons/cm}^2/\text{s}$ et le flux alternatif à $\phi_{ac} = \phi_{dc}/100$. Ils correspondent respectivement à un taux de génération de $G_{dc} = 4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ et $G_{ac} = G_{dc}/100$. Pour le a-Si:H, la fréquence de modulation f est généralement prise entre 1 Hz et 50 kHz et la température T est variée de 150 K à 450 K [23]. Les limites de l'intervalle de température ont été choisies propres au comportement standard du a-Si:H. Il ne s'agit là que de valeurs moyennes.

À une température donnée, nous calculons le photocourant MPC complexe à partir de la simulations numérique qui, rappelons-le, tient compte de tous les échanges de charges entre les états localisés du modèle et les états étendus. La section de l'échantillon et le champ électrique sont pris égaux à $S = 4 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2$ et $\xi = 3000 \text{ V cm}^{-1}$ qui correspondent à des valeurs généralement rencontrées expérimentalement. L'amplitude du MPC $|I_{ac}|$ et le déphasage ϕ calculés sont alors injectés dans la formule de Brüggemann (C.43) pour déterminer, pour chaque fréquence, la valeur $N(E_{\omega n})$ de la densité d'états. Dans notre calcul, le coefficient de capture C_n qui intervient dans cette relation est pris égale à C_n^{ct} .

Nous représentons sur la figure D.1 la densité d'états ainsi obtenue pour des températures variant de 160 à 440 K, par pas de 20 degrés, et pour des fréquences allant de 1 Hz jusqu'à 60 kHz. Comme l'expression de Brüggemann a été établie pour les hautes fréquences, l'allure de la densité d'états est donnée par l'enveloppe supérieure des courbes. Cette enveloppe correspond aux points calculés aux plus hautes fréquences pour chaque température. Néanmoins, nous discernons à partir de la figure que ceci reste valable pour des températures pas trop élevées, approximativement inférieures à 280 K. En effet, nous observons un bon accord entre la densité calculée et celle introduite pour les basses

températures. L'apparition d'un pic large voisin de l'état D^- de la liaison pendante est principalement le résultat de l'intervention des liaisons pendantes dans les différents échanges.

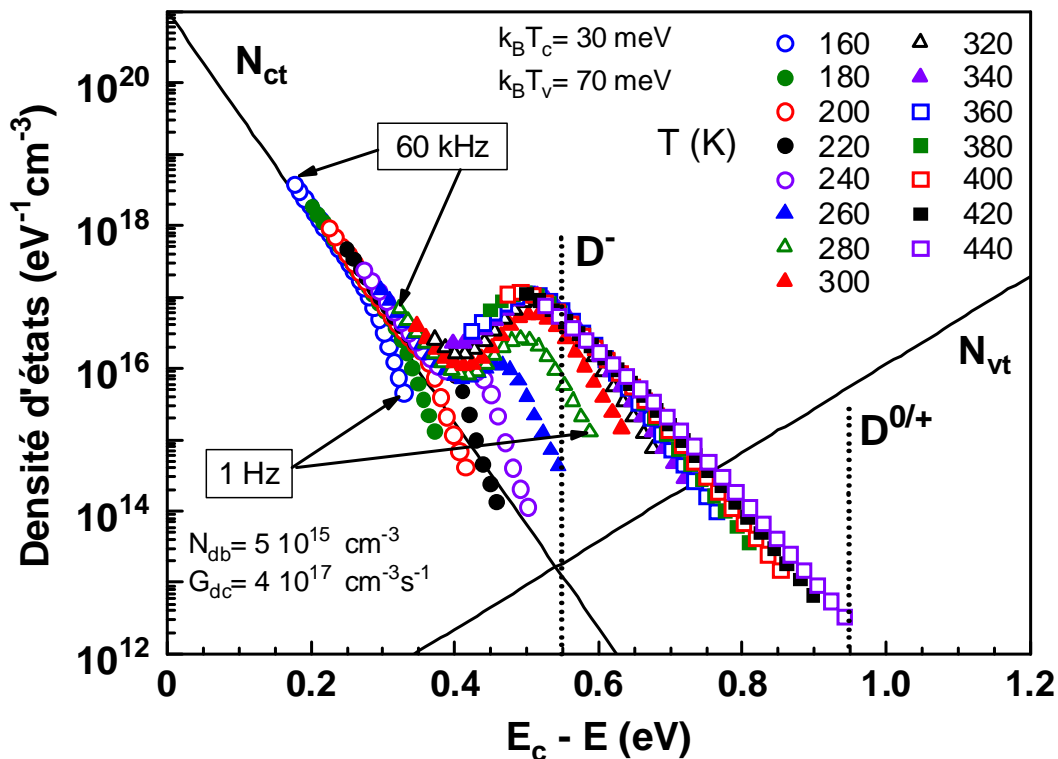


Figure D.1: Les densités d'états des deux queues de bandes (notées N_{ct} et N_{vt}) introduites dans la simulation (lignes continues) et les positions des états corrélés des liaisons pendantes sont représentées conjointement avec la densité d'états $N(E_{an})$ (symboles) de la relation (C.43) reconstruite à partir de la simulation du MPC pour plusieurs températures ($160 < T(K) < 440$ par pas de 20 degrés). La fréquence est variée entre 1 Hz et 60 kHz. Les paramètres standard sont utilisés.

Pour mieux comprendre les phénomènes mis en jeu, nous avons tracé sur la figure D.2 la variation des positions dans le gap des quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous, E_{Fn} et E_{Fp} , en fonction de la température, car c'est des paramètres importants dans la technique du MPC. Le niveau E_{F0} est également représenté. Aux très faibles températures, l'écart entre les quasi-niveaux est très important puis diminue quand la température augmente jusqu'à la position d'équilibre aux hautes températures. Nous déduisons qu'aux très faibles températures nous sommes dans le régime de recombinaison et dans ce cas la formule de Bruggemann n'est plus valable,

Pour les températures comprises entre 100 et 280 K, le quasi-niveau de Fermi des électrons E_{Fn} est situé entre le bas de la bande de conduction E_c et le niveau D^- . Cela signifie que dans ce domaine les liaisons pendantes n'émettent pas encore leurs électrons. Mais dès que E_{Fn} franchit le niveau D^- , c'est à dire aux températures supérieures à environ 280 K, les états des liaisons pendantes entrent en jeu dans les processus de piégeage et de dépiégeage.

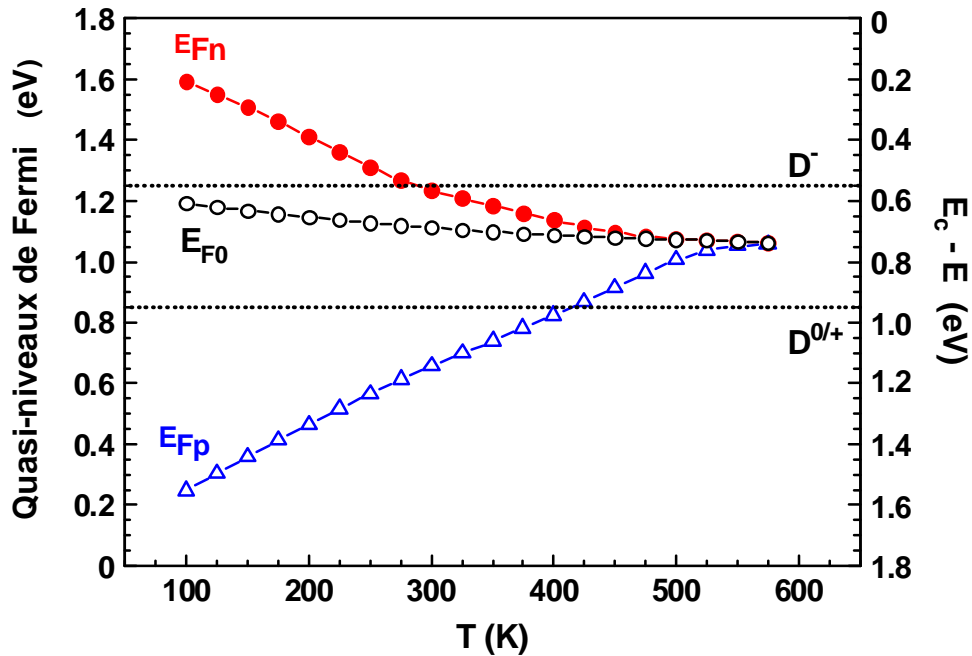


Figure D.2: Evolution du quasi-niveau de Fermi des électrons E_{Fn} , de celui des trous E_{Fp} et du niveau de Fermi E_{F0} en fonction de la température.

Pour mieux expliciter cet effet, nous représentons sur la figure D.3 l'évolution en fonction de la température de la concentration d'électrons dans la QBC, Q_{ct} , de la concentration de trous dans la QBV, Q_{vt} , ainsi que des densités des liaisons pendantes (LPs) dans les différents états de charge D^- , D^0 , et D^+ , Q_{db}^- , Q_{db}^0 et Q_{db}^+ . Il s'agit de grandeurs stationnaires. Aux basses températures, nous constatons que la neutralité est assurée principalement par Q_{ct} et Q_{vt} . Ensuite, lorsque la température augmente et que

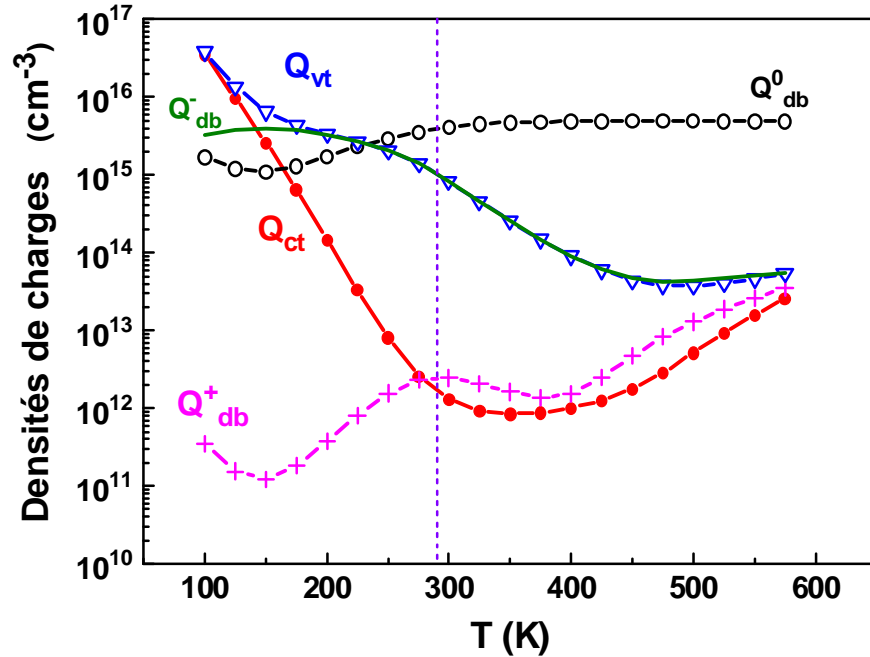


Figure D.3: Evolution de toutes les densités de charge sur les états localisés en fonction de la température: densité de charge positive sur la QBV (Q_{vt}), densité de charge négative sur la QBC (Q_{ct}) et les concentration des liaisons pendantes dans les états D^- , D^0 et D^+ (Q_{db}^- , Q_{db}^0 et Q_{db}^+).

Q_{ct} diminue, Q_{db}^- prend le relais [49,50]. Ce qui nous intéresse ici c'est de remarquer que lorsqu'on s'approche de 280 K (en pointillés sur la figure), Q_{db}^0 augmente et devient supérieure à Q_{db}^- . Cela explique bien l'intervention des liaisons pendantes dans les échanges avec les états étendus de la bande de conduction.

D. III. Densité d'états et occupation des queues de bandes

Pour quatre températures spécifiques: 160 K, 200 K, 300 K et 400 K, nous représentons sur les figure D.4 (a) à D.4 (d) les diagrammes d'énergie illustrant l'occupation des états localisés des deux queues de bandes du modèle: N_{Qct} est la répartition des électrons piégés sur la QBC et N_{Qvt} est la répartition des trous piégés sur la QBV. Le niveau d'énergie associé à D^- y est représenté. Pour chaque température, la densité d'états reconstruite $N(E_{\omega n})$ ainsi que le quasi-niveau de Fermi pour les électrons sont tracés.

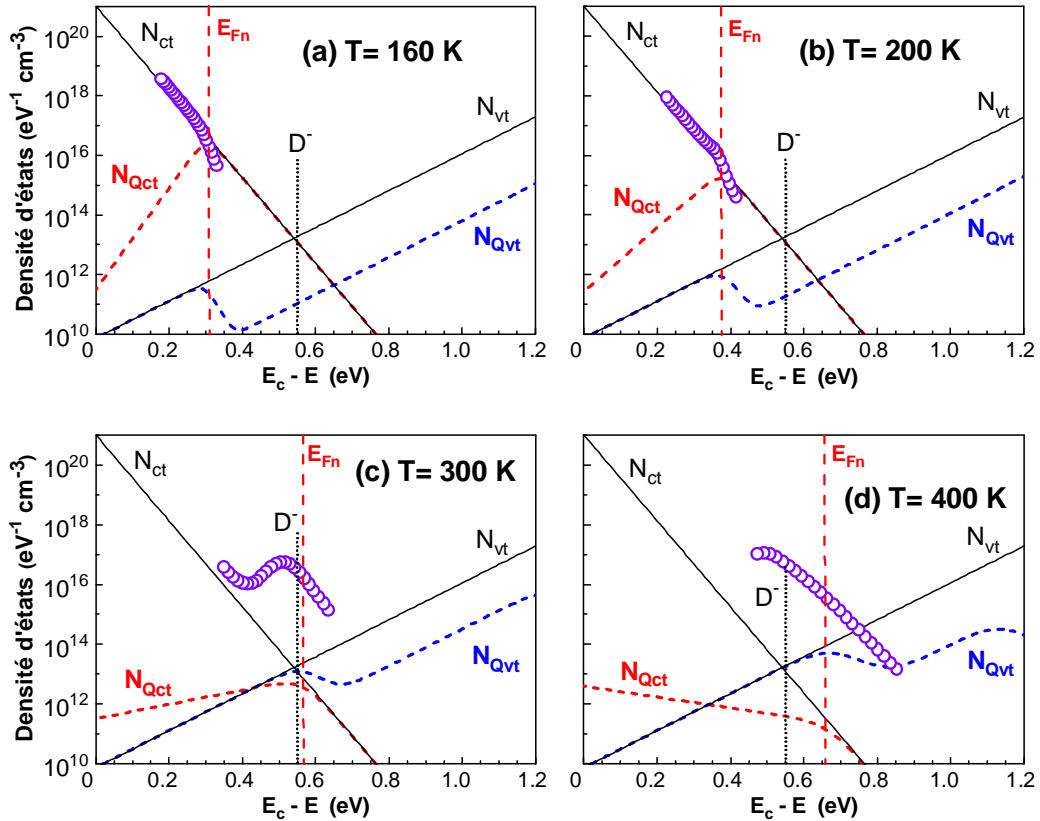


Figure D.4: Tracés des profils d'occupation des états localisés de la QBC (N_{Qct}) par les électrons et de la QBV (N_{Qvt}) par les trous en fonction de l'énergie du gap pour quatre températures: (a) 160 K, (b) 200 K, (c) 300 K et (d) 400 K. Pour chaque température, les quasi-niveaux de Fermi pour les électrons et pour les trous, E_{Fn} et E_{Fp} , ainsi que la densité calculée $N(E_{\omega n})$ respective sont représentés.

Comme on s'y attendait, nous remarquons que les pièges justes au dessus du quasi-niveau de Fermi E_{Fn} , sont vides, et que la QBC se dépeuple à mesure que la température augmente. Pour 160 et 200 K nous observons une bonne corrélation entre $N(E_{\text{on}})$ et la densité d'états introduite dans la simulation. Il s'agit de la QBC pour les états pièges situés au dessus de E_{Fn} . Ceci reste valable pour les températures pour lesquelles E_{Fn} reste loin au dessus du niveau D^- . Nous sommes ainsi dans le domaine de validité de la relation de Brüggemann dont l'utilisation requiert l'existence d'un seul type d'états localisés monovalents. Lorsque la température augmente, le mélange d'états localisés intervenant dans les différents échanges conduit à une mauvaise reconstruction de la densité d'états réellement existant dans le gap. Pour 300 K et au delà, il y a l'apparition de cette bosse dont l'origine semble provenir principalement de l'existence des liaisons pendantes.

D. IV. Effets des états localisés

Nous présentons dans cette partie la contribution des divers paramètres microscopiques du modèle de densité d'états du a-Si:H sur le profil de la densité d'états reproduite $N(E_{\text{on}})$ par le MPC. Nous faisons varier séparément l'énergie caractéristique de chaque queue de bande, $k_B T_c$ et $k_B T_v$, la concentration totale N_{db} ainsi que la position des niveaux d'énergie des liaisons pendantes dans le gap.

D. IV. 1. Les queues de bandes

Nous avons repris dans le calcul les mêmes paramètres relatifs à la méthode du MPC cités ci-dessus. Dans ce qui suit, les autres paramètres microscopiques non mentionnés sont pris égaux aux paramètres standard. Les figures D.5 (a) à D.5(c) montrent l'influence de l'énergie caractéristique $k_B T_c$ de la QBC sur la densité reconstruite $N(E_{\text{on}})$. Deux valeurs de $k_B T_c$ (25 et 35 meV) sont prises autour de la valeur standard (30 meV). Lorsque nous faisons varier la largeur de la QBC, la densité d'états dans la partie supérieure du gap suit. Nous remarquons d'abord que pour les faibles températures les spectres tracés rejoignent la forme de la queue de bande de conduction.

Plus la pente caractéristique $k_B T_c$ est importante, mieux la reconstruction $N(E_{\omega n})$ reproduit la densité d'état de la QBC et ce pour des températures plus élevées. Il semble que la QBV, même faible dans cette gamme d'énergie, influe sur le profil de densité reconstruit. Dans la relation de Brüggemann il n'était question que d'une seule distribution d'états monovalents. Souvent, dans les simulations de propriétés électriques et photoélectriques dans le a-Si:H, lorsque nous utilisons le modèle standard de densité d'états, les densités des deux queues de bandes ne sont pas tronquées au voisinage du milieu du gap. La raison est que son influence y devient négligeable. Pour les plus hautes températures, $N(E_{\omega n})$ retrouve la même allure puisque la QBC n'intervient plus dans cette gamme d'énergie.

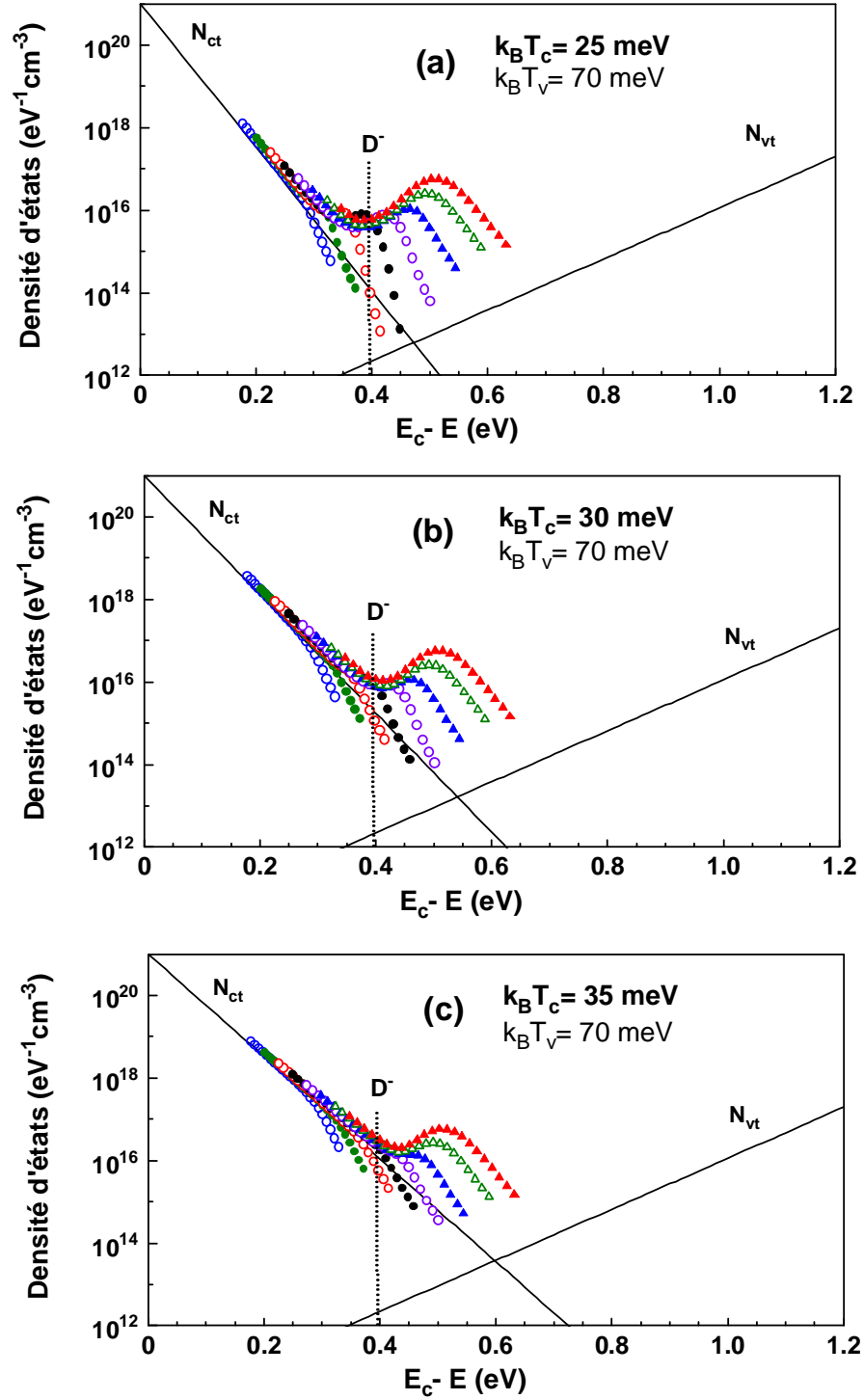


Figure D.5: Profil de la densité d'états reconstruite $N(E_{om})$ pour différentes valeurs de l'énergie caractéristique $k_B T_c$ de la QBC. La température est variée entre 160 et 300 K par pas de 20 degrés.

Les figures D.6 (a) à D.6(c) représentent l'occupation des deux queues de bandes pour les différentes valeurs de la pente caractéristique $k_B T_c$. Pour chaque valeur nous avons tracé le profil de la densité d'états calculé pour deux températures: 160 et 300 K. A $T = 160\text{K}$, la densité d'états calculée joint la queue de bande de conduction, surtout au dessus du quasi-niveau de Fermi E_{Fn} . A $T = 300\text{K}$, nous avons une tendance linéaire de $N(E_{on})$ pour les hautes fréquences sans rejoindre la densité d'états introduite de la QBC. Cette tendance persiste même si nous augmentons la fréquence au delà de 60 kHz.

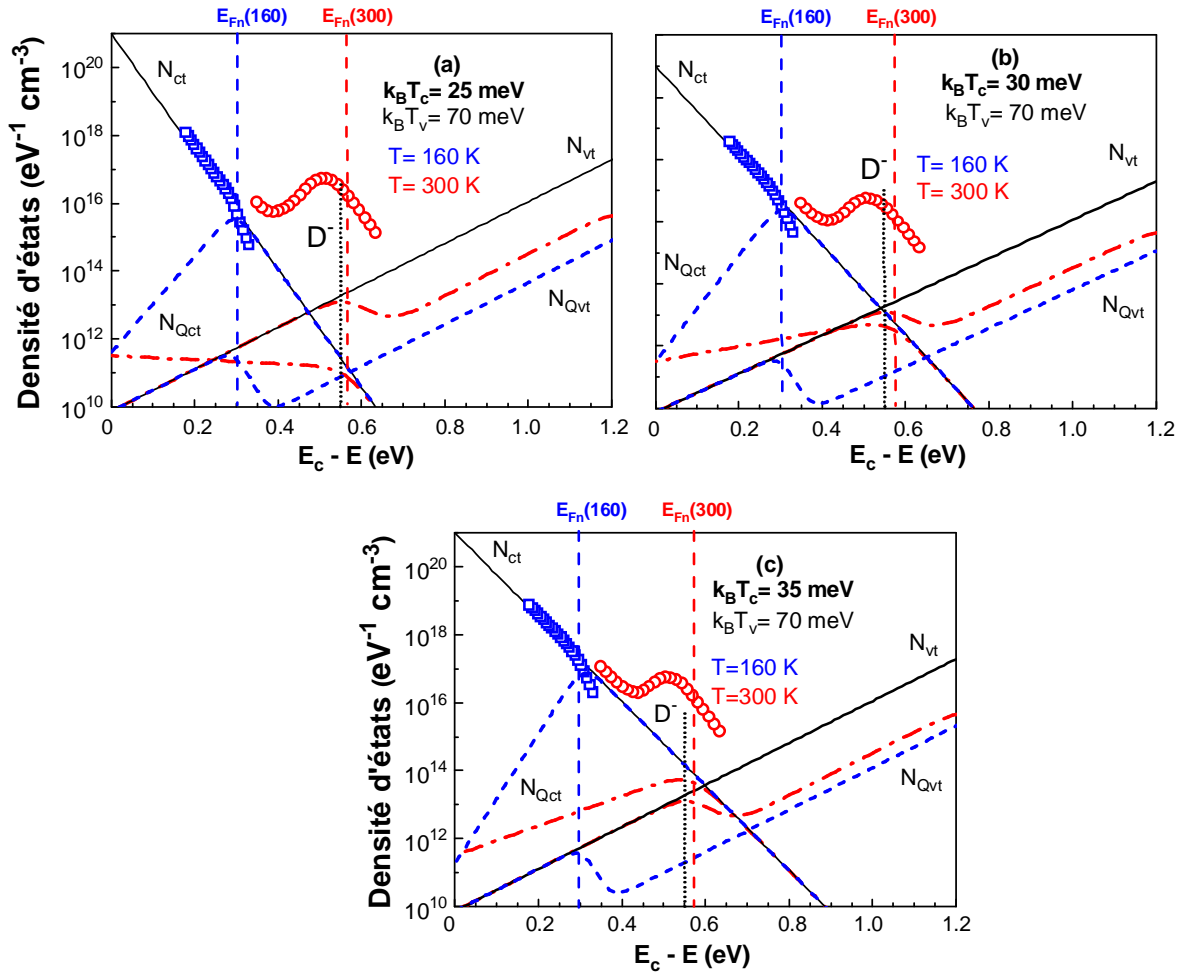


Figure D.6: Tracés des profils d'occupation des états de la QBC (N_{Qct}) et la QBV (N_{Qvt}) en fonction de l'énergie pour trois valeurs de $k_B T_c$. Le quasi-niveau de Fermi E_{Fn} pour les électrons libres et le profil de la densité d'états calculé sont représentés pour deux températures significatives: 160 et 300 K.

Les figures D.7 (a) à D.7(c) montrent l'influence de l'énergie caractéristique $k_B T_V$ de la QBV sur la densité reconstruite $N(E_{\omega_n})$. Deux valeurs de $k_B T_V$ (60 et 80 meV) sont prises autour de la valeur standard (70 meV). Pour la partie supérieure, $N(E_{\omega_n})$ reste quasiment inchangée. Nous remarquons aussi que le quasi-niveau de Fermi des électrons varie faiblement avec la valeur de $k_B T_V$. Nous enregistrons aussi que les pics d'occupation ont toujours lieu à la même position. Globalement, nous pouvons dire que la largeur de la QBV influe peu sur la forme générale de la densité reconstruite.

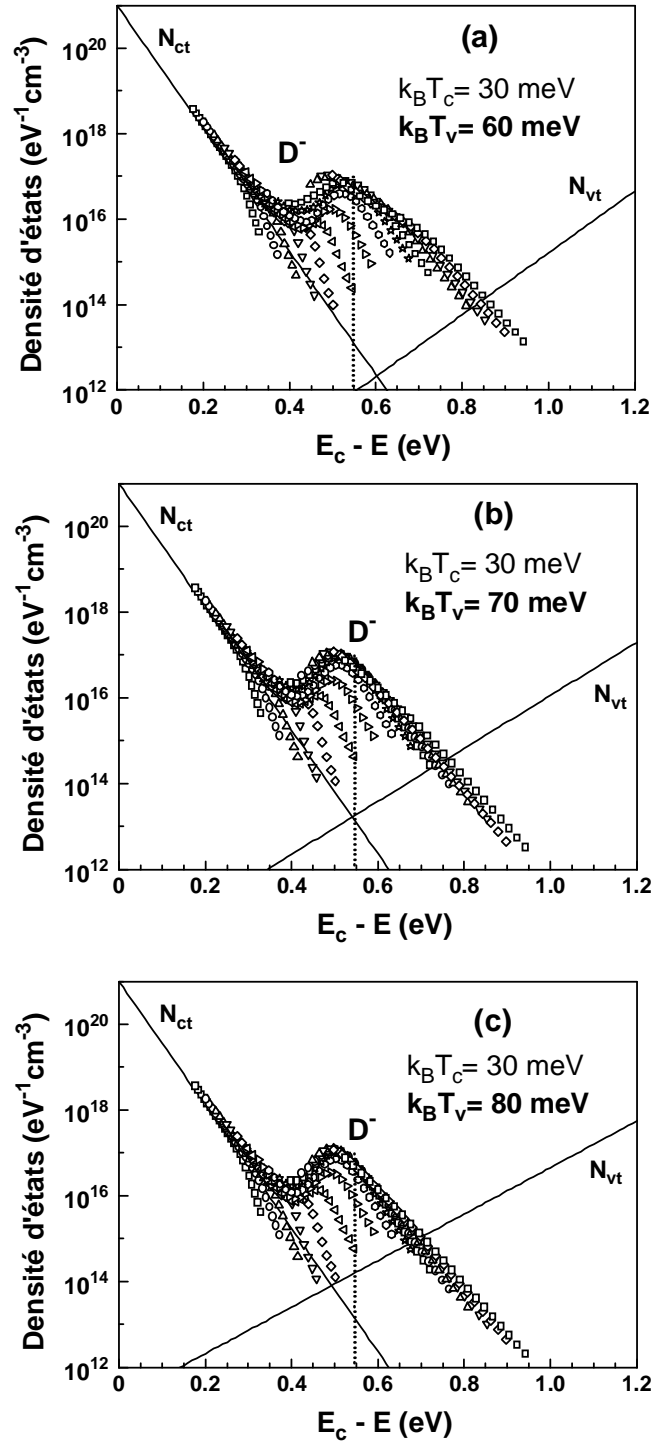


Figure D.7: Profil de la densité d'états reconstruite $N(E_{om})$ pour différentes valeurs de l'énergie caractéristique de la QBV $k_B T_v$. La température est variée entre 160 et 440 K par pas de 20 degrés.

D. IV. 2. Les liaisons pendantes

D. IV. 2. a. Effet de la concentration N_{db}

Les figure D.8 (a) à D.8(d) montrent l'influence de la concentration totale des liaisons pendantes N_{db} sur le profil de la densité d'états reconstruite $N(E_{on})$. Quatre valeurs sont examinées. Deux valeurs (10^{16} et 10^{17} cm^{-3}) supérieures à la valeur standard et deux autres (0 et 10^{15} cm^{-3}) lui sont inférieures.

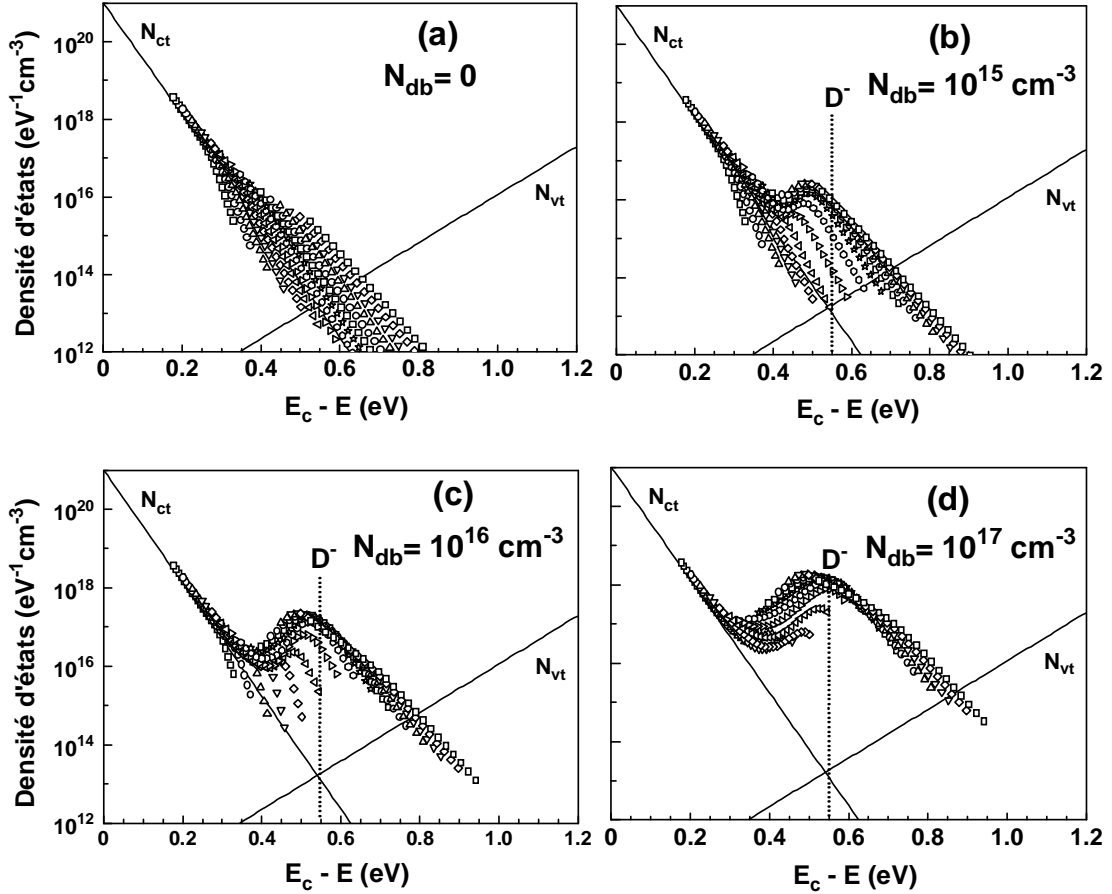


Figure D8: Profil de la densité d'états reconstruite $N(E_{on})$ pour différentes valeurs de la densité totale de liaisons pendantes N_{db} . La température est variée entre 160 et 440 K par pas de 20 degrés.

Pour la valeur extrême $N_{db} = 0$, nous constatons la disparition totale de la bosse. Néanmoins, lorsque la température augmente, la densité reconstruite ne reproduit plus que la QBC ni la somme de QBC et QBV. Pour les autres valeurs de N_{db} , nous observons que

la pente reste et un élargissement et une élévation de la bosse et une réduction de la gamme en énergie de reconstruction de la QBC lorsque N_{db} augmente.

Pour mieux expliciter le rôle de la concentration totale des liaisons pendantes, la figure D.9 montre, pour $T = 240\text{ K}$, l'influence de N_{db} sur le profil de la densité d'états reconstruite $N(E_{\omega n})$. Cinq valeurs sont examinées entre 0 et 10^{17} cm^{-3} .

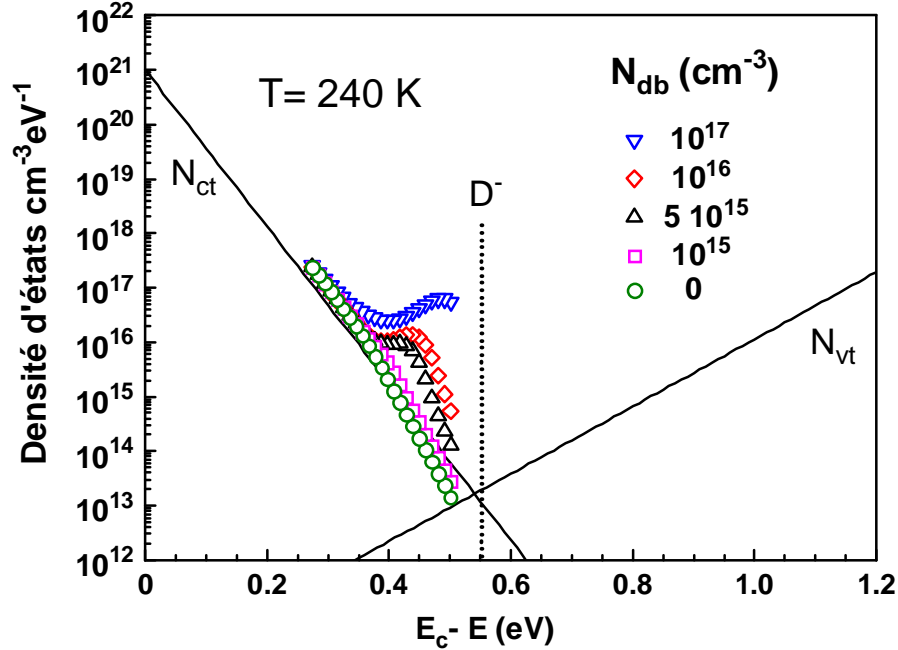


Figure D.9 : La densité d'états reconstruite $N(E_{\omega n})$ à $T = 240\text{ K}$ pour différentes valeurs de concentration totale N_{db} des liaisons pendantes.

Le cas $N_{db} = 0$ peut être intéressant pour identifier le rôle de la QBV telle que prise dans notre modèle. Nous représentons sur la figure D.10 la densité d'états reconstruite $N(E_{\omega n})$ pour $N_{db} = 0$ pour trois différentes températures (160, 300 et 400 K). Pour 160 K, nous avons une bonne corrélation entre la densité du modèle et $N(E_{\omega n})$. Pour 300 K, la densité calculée s'écarte légèrement pour les hautes fréquences puis s'éloigne nettement à plus haute température. Lorsque la température augmente, la formule de Brüggemann n'est plus valable.

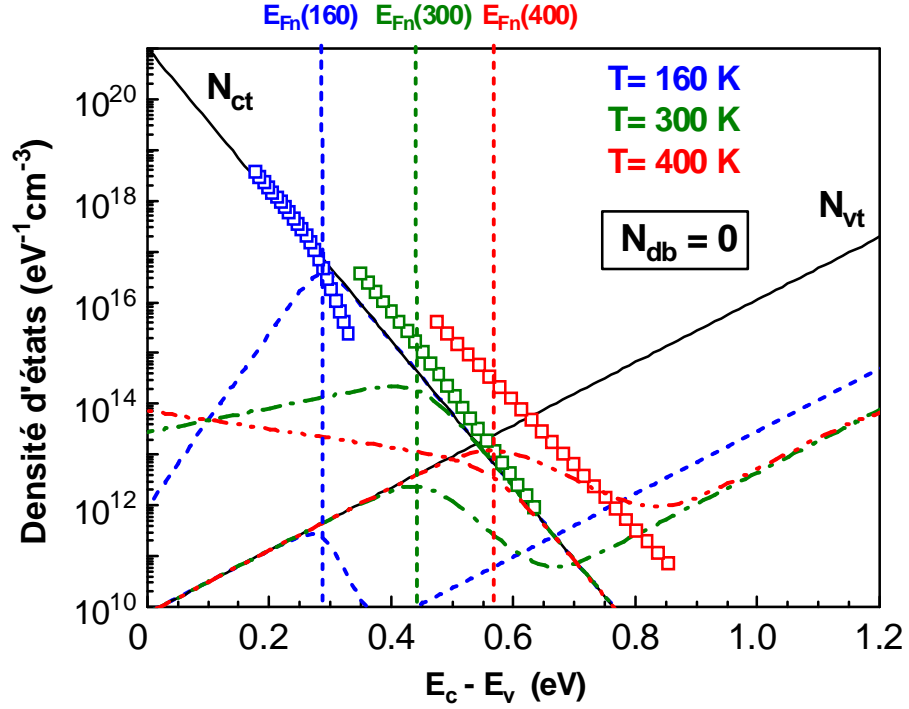


Figure D.10: Tracés des profils d'occupation des états de la QBC (N_{Qct}) et de la QBV (N_{Qvt}) sont représentées conjointement avec la densité d'états $N(E_{on})$ en fonction de l'énergie du gap pour $N_{db}=0$ pour trois températures (160, 300 et 400 K). Les énergies E_{Fn} sont les quasi-niveaux de Fermi pour les électrons libres respectifs pour chaque température.

D. IV. 2. b. Effet du niveau E_{db}

Les figures D.11 (a) à D.11 (c) montrent l'effet de la position du niveau D^0/D^+ (E_{db}) sur la densité d'états reconstruite $N(E_{on})$. Nous remarquons que ce paramètre agit principalement sur la largeur de la bosse. Il faut noter que l'énergie de corrélation $U = 0.4\text{ eV}$ est maintenue pour les trois valeurs de E_{db} . Lorsque le niveau d'énergie du niveau D^- se rapproche de la bande de conduction, la bosse apparaît à des énergies plus proches de E_c et devient moins large. Cela est dû au fait que les liaisons pendantes interviennent plus haut dans le gap. Lorsqu'au contraire, le niveau D^- s'éloigne de E_c , la bosse s'étale.

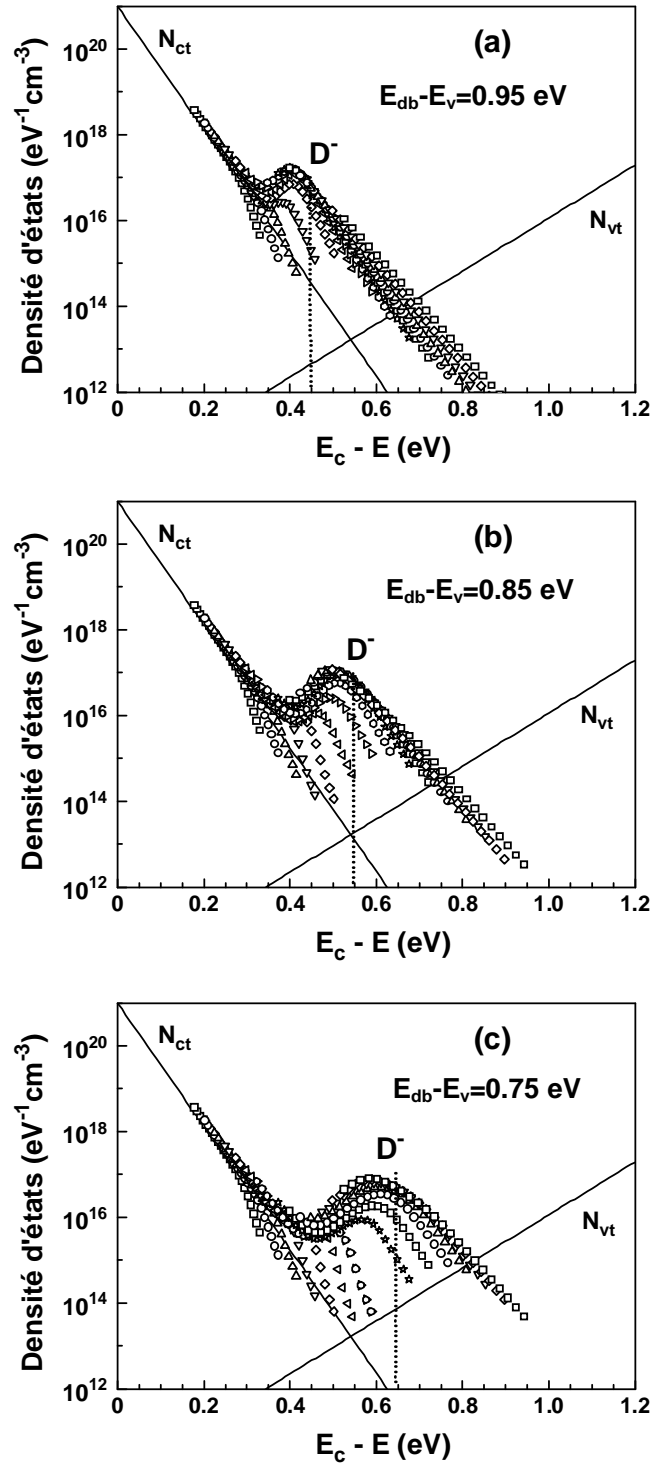


Figure D.11 : Profil de la densité d'états reconstruite $N(E_\omega)$ pour différentes valeurs de la position dans le gap des états corrélés des liaisons pendantes E_{db} . L'énergie de corrélation U est maintenue constante et égale à 0.4 eV. La température est variée entre 160 et 440 K par pas de 20 degrés.

Pour conforter cette discussion, nous traçons sur la figure D.12 l'évolution en fonction de la température des quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous, E_{Fn} et E_{Fp} , ainsi que le niveau de Fermi E_{F0} . Nous remarquons que lorsque le niveau D^- s'approche de E_c ($E_{db} = 0.9$ eV), il intervient dans les échanges à plus basse température.

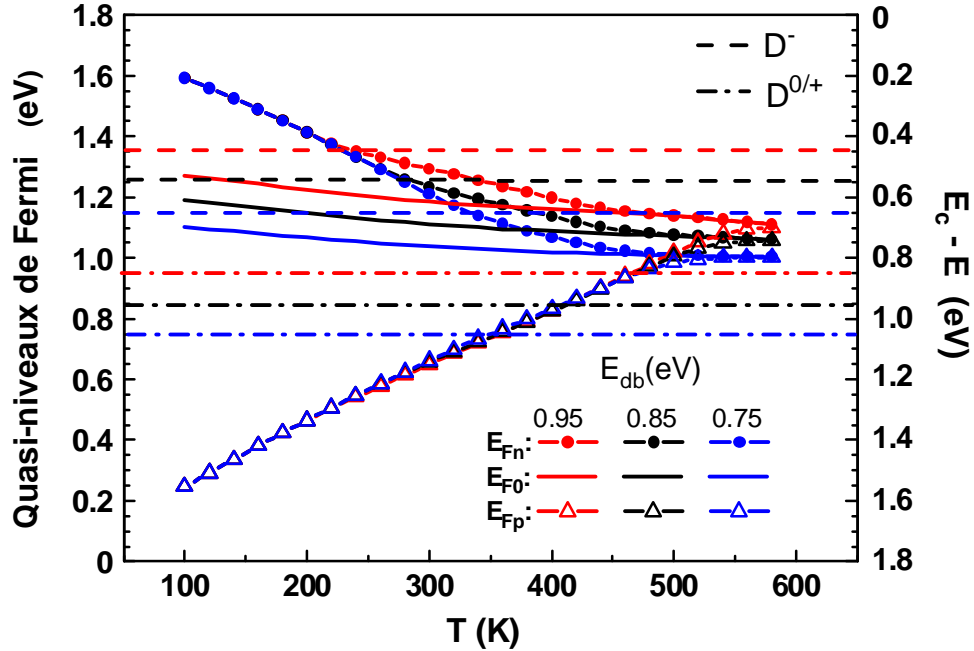


Figure D.12: Evolution du quasi-niveau de Fermi des électrons E_{Fn} , de celui des trous E_{Fp} et du niveau de Fermi E_{F0} en fonction de la température pour les trois valeurs du niveau E_{db} des liaisons pendantes.

D. V. Le MPC et le taux de génération

D. V. 1. Influence du taux de génération sur $N(E_{\text{con}})$

Le taux de génération optique est un paramètre important dans l'expérience du MPC, car c'est lui qui donne lieu aux porteurs de charges libres. Lorsque nous appliquons un flux lumineux sur l'échantillon, il perturbe l'équilibre thermodynamique et cause la création des quasi-niveaux de Fermi. Nous avons vu au chapitre précédent que les concentrations des porteurs de charges et les fonctions d'occupation dans le régime ac dépendent de leurs homologues dans le régime dc. Nous étudions dans ce paragraphe l'influence du taux de génération sur le profil de la densité d'états.

Nous présentons sur la figure D.13 le profil de la densité d'états pour quatre taux de génération G_{dc} . Les figures D.13 (a) et D.13 (b) représentent $N(E_{\omega n})$ pour deux faibles taux de générations: $G_{dc} = 4 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ et $4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ respectivement. Nous constatons que les courbes de densité calculées obtenues aux basses températures et aux hautes fréquences se recouvrent bien et coïncident avec la queue de bande de conduction du modèle. Nous avons donc une bonne estimation de $k_B T_c$. Aux hautes températures et basses fréquences nous constatons l'apparition de la bosse. Les figures D.13(c) et D.13(d) représentent la densité reconstruite pour $G_{dc} = 4 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ et $4 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$: elles correspondent aux flux forts. Les courbes obtenues ne se recouvrent

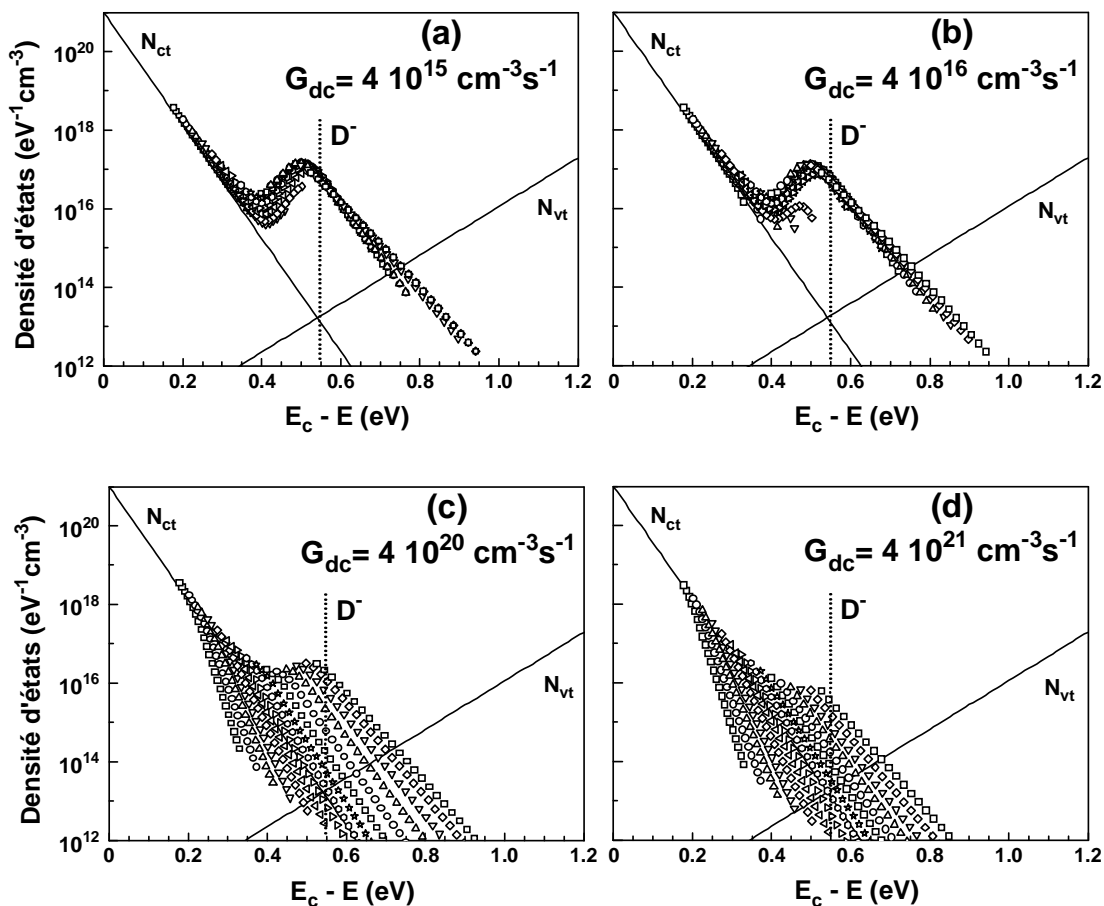


Figure D.13: Profil de la densité d'états reconstruite $N(E_{\omega n})$ pour différentes valeurs du taux de génération G_{dc} . La température est variée entre 160 et 440 K par pas de 20 degrés.

pas systématiquement, même pour les hautes fréquences et les basses températures. L'enveloppe n'est pas bien définie.

Pour élucider cette variation observée sur la densité d'états, nous avons besoin d'identifier si les centres sont responsables du piégeage et dépiégeage ou de la recombinaison. Pour cela nous traçons les taux nets de capture par chaque groupe d'états localisés, ainsi que la variation des quasi-niveaux de Fermi, en fonction du taux de génération. Nous représentons sur la figure D.14 (a) l'évolution des quasi-niveaux de Fermi en fonction du taux de génération pour deux températures. Aux faibles taux de génération, l'écart entre les deux quasi-niveaux de Fermi est faible, et les centres se situant à l'extérieur des quasi-niveaux est plus important qu'à l'intérieur, par conséquent c'est le régime du piégeage et dépiégeage qui est favorisé. Lorsque le taux de génération devient important, à partir de $10^{18} \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$, l'écart s'élargit et dans cette situation c'est le régime de recombinaison qui prédomine.

Sur la figure D.14 (b) sont reportés les taux nets de captures des électrons par la QBC, la QBV et les LPs, U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb} , respectivement, en fonction du taux de génération G_{dc} . Nous vérifions bien que la recombinaison s'accroît avec le taux de génération. Ceci est dû à une séparation des quasi-niveaux de Fermi très prononcée qui favorise le régime de recombinaison pour le photocourant modulé et non celui de piégeage-dépiégeage, lequel est nécessaire pour une exploitation correcte des données du MPC en régime HF.

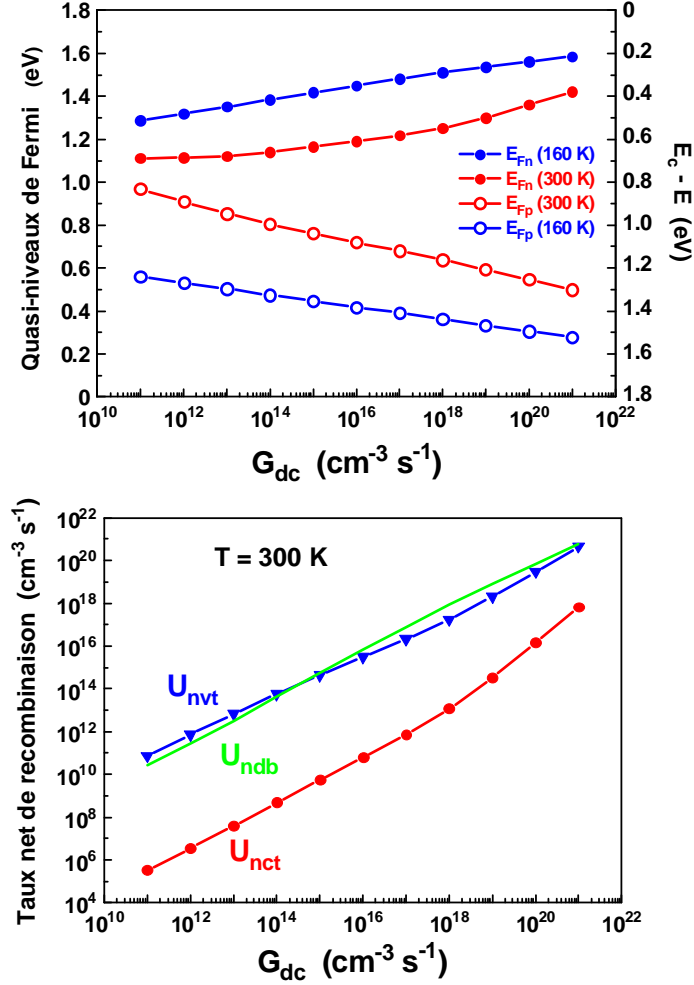


Figure D.14: Evolution des quasi-niveaux de Fermi E_{Fn} et E_{Fp} (a) ainsi que les taux nets de recombinaison partiels des électrons (U_{nct} , U_{nvt} et U_{ndb}).(b) en fonction du taux de génération G_{dc} .

D. V. 2. Transition du régime BF au régime HF

La transition entre les deux régimes BF et HF a lieu lorsque $\omega_c = C_n n_{dc} + C_p p_{dc}$ [31]. Nous l'appellons fréquence de coupure ou fréquence seuil. Cette valeur peut être estimée expérimentalement à partir du tracé de $\cos(\phi)/|I_{ac}|$ en fonction de la fréquence [41]. Il est à rappeler que ce terme apparaît dans la dérivée de l'expression de $N(E_{\omega n})$ proposée par Hattori [43]. En effet, $\cos(\phi)/|I_{ac}|$ est constant lorsque $\omega \ll \omega_c$, dans le régime de recombinaison, et augmente lorsque $\omega \gg \omega_c$, régime de piégeage-dépiégeage. Ce tracé permet ainsi de distinguer le régime de recombinaison du régime de piégeage-

dépiégeage. Nous pouvons déterminer également la fréquence ω_C par une autre méthode, qui consiste à tracer $\tan(\phi)$ en fonction de la fréquence [41]. Ce terme intervient dans l'expression de la densité d'états déterminée en régime BF [44]. Dans ce cas, comme nous l'avons rappelé au § C.IV.4, c'est l'évolution linéaire du terme $\tan(\phi)$ avec la fréquence qui correspond à la recombinaison.

La figure D.15 présente le tracé de l'expression normalisée $(qG_{ac} \cos(\phi) / |I_{ac}|)$ en fonction de la fréquence à $T=160$ K, pour cinq valeurs du taux de génération G_{dc} qui varie de $4 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ à $4 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$. Nous remarquons que pour les taux de génération $G_{dc} = 4 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ et $4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ les courbes sont croissantes en fonction de la fréquence, et quelles se superposent, c'est-à-dire elle ne varie pas en fonction du G_{dc} pour ces valeurs faibles du taux de génération. La condition ω supérieure à $(C_n n_{dc} + C_p p_{dc})$ est constamment vérifiée quelle que soit la fréquence, nous sommes donc en régime de piégeage et dépiégeage. Pour $G_{dc} = 4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$, nous constatons qu'aux basses fréquences une petite partie de la courbe est constante, après une fréquence donnée, qui est la fréquence seuil, elle commence à augmenter et rejoint les autres courbes. Quand le taux de génération est plus grand, $G_{dc} = 4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ et $G_{dc} = 4 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$, nous constatons l'apparition de parties constantes qui se présentent sous formes de plateaux jusqu'à la fréquence seuil puis un accroissement des courbes. Elles convergent ensuite toutes vers une courbe unique. La largeur du plateau est plus grande lorsque le flux incident est important, car il y a création de porteurs de charges et la fréquence $C_n n_{dc} + C_p p_{dc}$ devient plus importante. Cette variation est due à une transition entre les deux régimes. Le rapport $(\cos(\phi) / |I_{ac}|)$ est indépendant de la fréquence et augmente avec le flux dans le régime de recombinaison. Et inversement, dans le régime de piégeage et dépiégeage, il dépend de la fréquence et ne dépend plus du flux, il est à noter que ce cas de figure représente les états monovalents [31].

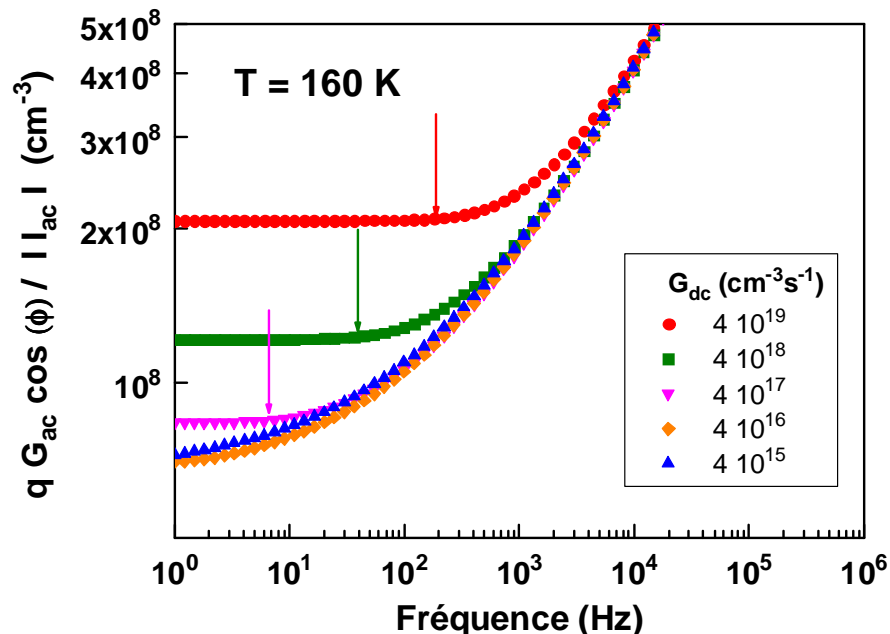


Figure D.15: Tracés de $q G_{ac} \cos(\phi) / |I_{ac}|$, calculé à partir de notre simulation à $T=160$ K avec les paramètres standard, en fonction de la fréquence, pour différentes valeurs du taux de génération G_{dc} . Les flèches indiquent les fréquences de transition.

La figure D.16 représente la variation de $\tan(\phi)$ en fonction de la fréquence pour cinq taux de génération compris entre $4 \cdot 10^{15}$ et $4 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$. Pour les faibles taux de générations, l'allure de $\tan(\phi)$ évolue de façon monotone avec la fréquence. A partir de $G_{dc} = 4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$, il y a apparition d'une portion linéaire qui s'élargit quand G_{dc} augmente. Quand la fréquence augmente, toutes les courbes de rejoignent. D'après la relation de la relation de Koropecki [44], cette partie correspond au régime de recombinaison. La pulsation $\omega_c = 2\pi f_c$, qui délimite la partie linéaire qui représente le régime de recombinaison, de la partie non linéaire qui exprime le piégeage et dépiégeage, est la fréquence de transition.

D'autre part, dans le cas d'un seul type d'états monovalents, l'estimation de ω_c permet de remonter à une estimation du rapport C_n/μ_n . En supposant par exemple, que les électrons sont les porteurs majoritaires, de sorte que la concentration des électrons soit très grande par rapport à la concentration des trous, et que la mobilité des électrons est élevée

par rapport à celle des trous, nous avons alors $\omega_c = C_n n_{dc}$. La valeur de n_{dc} peut être obtenue à partir des mesures du photocourant par la relation:

$$n_{dc} = \frac{I_{dc}}{S q \xi \mu_n} \quad (D.1)$$

Le rapport C_n/μ_n s'obtient par l'égalité suivante:

$$\frac{C_n}{\mu_n} = \frac{S q \xi \omega_c}{I_{dc}} \quad (D.2)$$

Si nous admettons que $\mu_n = 10 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, ce rapport nous permet ainsi d'évaluer le coefficient de capture des électrons par la queue de bande de conduction.

Nous nous proposons de retrouver la valeur de ce rapport à partir des résultats de notre simulation. L'évaluation de la valeur de ω_c peut se faire à partir des courbes obtenues sur les figure D.15 et D.16. Celle du photocourant I_{dc} est obtenue à partir de notre calcul en régime continu. A titre de vérification, nous considérons la courbe représentant le taux de

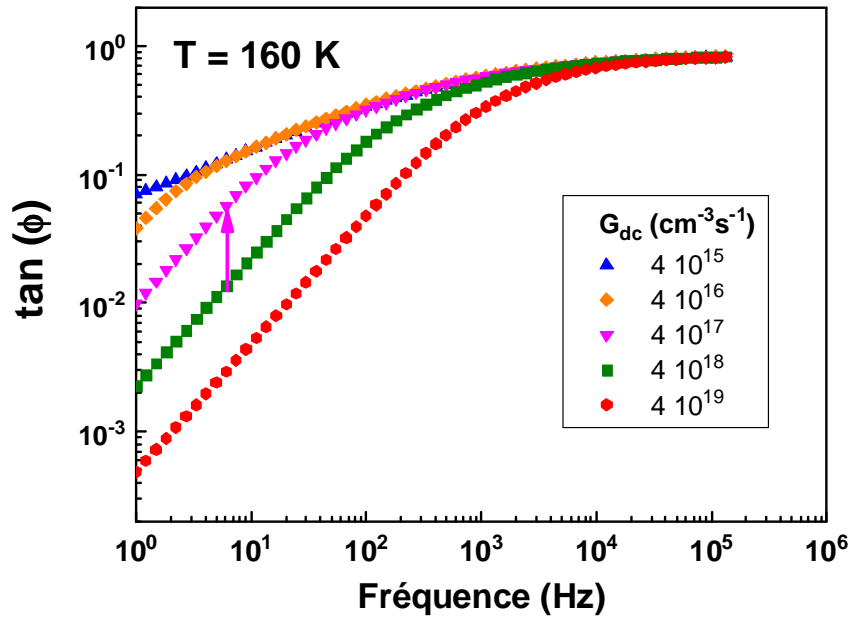


Figure D.16: Tracé de $\tan(\phi)$ en fonction de la fréquence, à une température $T=160 \text{ K}$ et pour différentes valeurs du taux de génération G_{dc} . Les paramètres standard sont utilisés.

génération $G_{dc} = 4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ et pour $T=160 \text{ K}$ pour laquelle la valeur de la fréquence de transition obtenue du tracé de $\cos\phi/|I_{ac}|$ et qui se positionne juste avant la fin du plateau est $f_c = 6.3 \text{ Hz}$. Le rapport C_n/μ_n vaut alors $0.91 \cdot 10^{-9} \text{ V cm}$. L'autre estimation de cette fréquence, se fait à partir du tracé de $\tan(\phi)$, juste avant la fin de la partie linéaire, donne $f_c = 7.6 \text{ Hz}$ et dans ce cas le rapport C_n/μ_n vaut $1.1 \cdot 10^{-9} \text{ V cm}$. Nous rappelons que le rapport C_n/μ_n introduit dans le calcul vaut 10^{-9} V cm . Il est à noter que la valeur de la fréquence de transition extraite des graphes ne peut être qu'approximative. Ceci est dû au fait que nous ne pouvons pas déterminer avec exactitude la fin de la zone linéaire, même dans les résultats calculés. La transition se fait de façon progressive.

Regardons maintenant la représentation de ces grandeurs à une température pour laquelle la formule de Brüggemann ne reproduit pas exactement la densité d'états introduite. Nous reportons sur la figure D.17 les tracés de $(qG_{ac} \cos(\phi))/|I_{ac}|$ en fonction de la fréquence obtenu à une température de $T=300 \text{ K}$, pour plusieurs taux de génération. Nous avons choisi cette température pour mettre en évidence la contribution des liaisons pendantes, nous constatons que toutes les courbes se croisent, c'est le comportement typique dû à l'intervention des liaisons pendantes dans les échanges [32]. Cela traduit la réponse de différents types de pièges ayant différents coefficients de captures, à la modulation, simultanément. La différence observée entre les représentations des figures D.15 et D.17, s'explique par la position des niveaux discrets des liaisons pendantes, par rapport au quasi-niveau de Fermi des électrons libres. Nous avons vu dans la section D.III qu'à $T=160 \text{ K}$ la position de D^- est loin au-dessous de E_{Fn} : il n'y a que la queue de bande de conduction qui participe aux transitions électroniques. Par contre à $T=300 \text{ K}$, le niveau D^- se situe au dessus de E_{Fn} : nous avons alors deux classes de défauts ayant des coefficients de capture différentes qui participent au processus de piégeage et dépiégeage. Cela engendre le croisement des courbes pour les différents taux de génération.

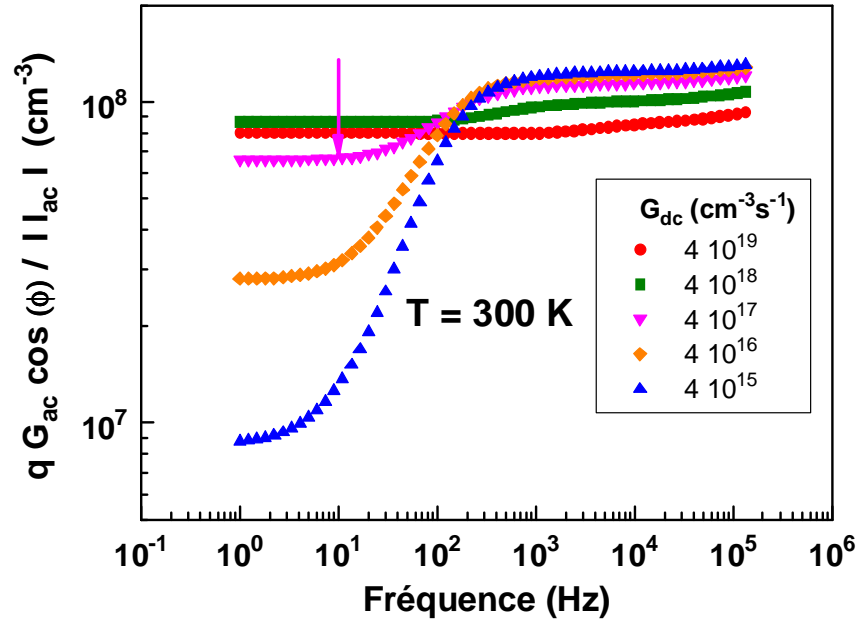


Figure D.17: Tracés de $q G_{ac} \cos(\phi) / |I_{ac}|$, calculé à partir de notre simulation à $T=300$ K avec les paramètres standard, en fonction de la fréquence, pour différentes valeurs du taux de génération G_{dc} .

La figure précédente ne permet pas de bien définir la fin du régime de recombinaison, nous tracons alors l'évolution de $\tan(\phi)$ en fonction de la fréquence (Figure D.18). Nous obtenons une meilleure précision de la fréquence de coupure ou fréquence de transition. La fréquence déduite de la figure D.17, pour $G_{dc} = 4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ et pour $T=300$ K, est $f_c = 9.97 \text{ Hz}$ d'où $C_n / \mu_n = 0.7 \cdot 10^{-9} \text{ V cm}$. La fréquence de transition déduite de la figure D.18 est $f_c = 12 \text{ Hz}$ d'où $C_n / \mu_n = 0.86 \cdot 10^{-9} \text{ V cm}$. Même à cette température à laquelle nous avons un mélange d'états localisés intervenant dans les échanges, nous pouvons ainsi estimer le plus petit coefficient de capture. Il correspond à la plus petite fréquence de transition.

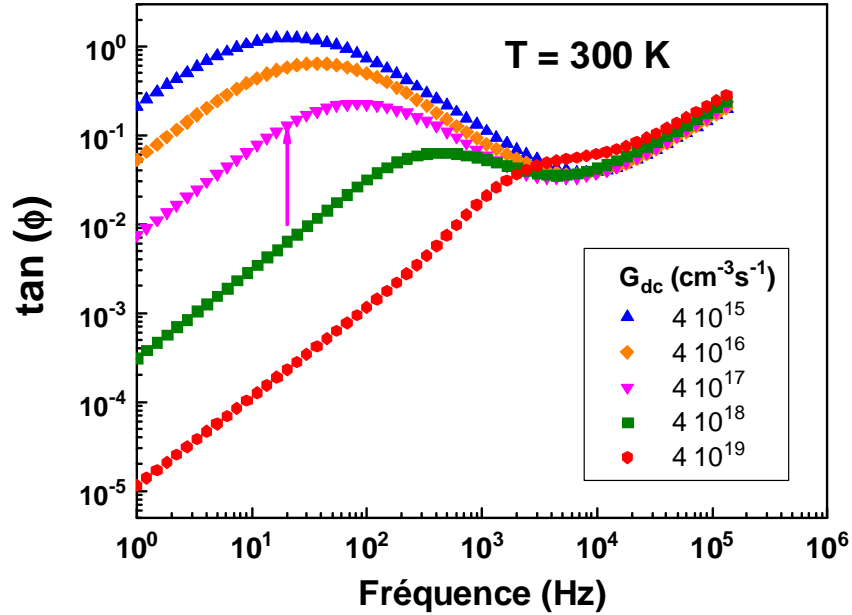


Figure D.18: Tracé de $\tan(\phi)$ en fonction de la fréquence, à une température $T=300\text{ K}$ et pour différentes valeurs du taux de génération G_{dc} . Les paramètres standard sont utilisés.

La figure D.19 illustre les tracés de $qG_{ac} \cos(\phi)/|I_{ac}|$ en fonction de la fréquence pour des taux de génération allant de $4 \cdot 10^{15}$ à $4 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ en absence de liaisons pendantes ($N_{db}=0$). Il n'y a donc que les états des queues de bandes qui contribuent dans le processus de piégeage et dépiégeage. Nous remarquons l'apparition des plateaux larges qui signifie qu'on est dans le régime de recombinaison. Ils évoluent avec le taux de génération. Ensuite, toutes les courbes se rejoignent. L'évolution de ces courbes est comparable à celles observées dans le cas d'un seul type de pièges monovalents [31,32] sauf que la largeur des plateaux est grande: c'est la génération thermique des porteurs de charge qui fait que la somme $C_n n_{dc} + C_p p_{dc}$ est grande, donc de la recombinaison même aux faibles flux.

Nous traçons aussi la variation de $\tan(\phi)$ en fonction de la fréquence (Figure D.20) et nous constatons que là aussi l'évolution des courbes est semblable aux résultats trouvés dans le cas d'un seul type de pièges monovalents. Nous constatons que la partie linéaire de toutes les courbes tendent vers la même valeur.

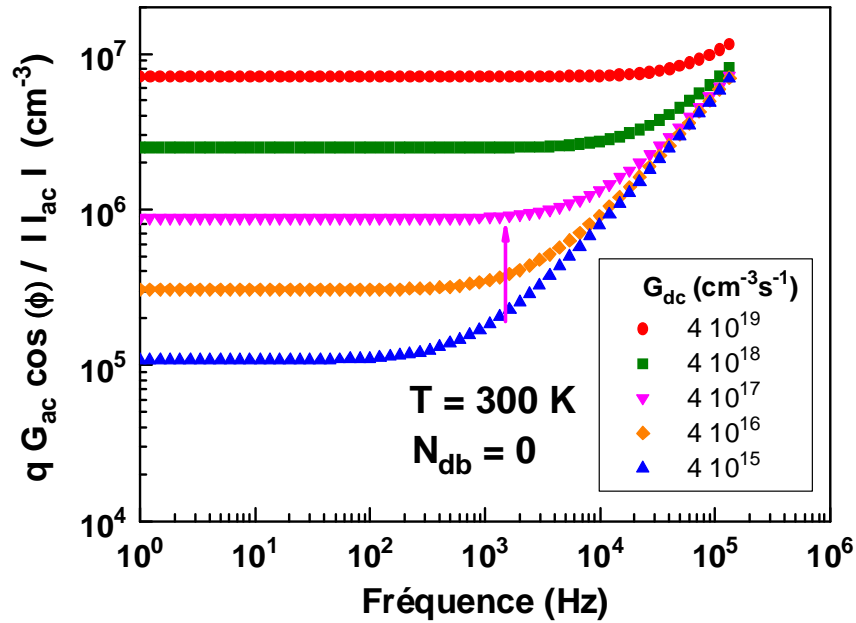


Figure D.19: Tracés de $q G_{ac} \cos(\phi) / |I_{ac}|$, calculé à partir de notre simulation à $T=300$ K avec les paramètres standard sauf $N_{db} = 0$, en fonction de la fréquence, pour différentes valeurs du taux de génération G_{dc} .

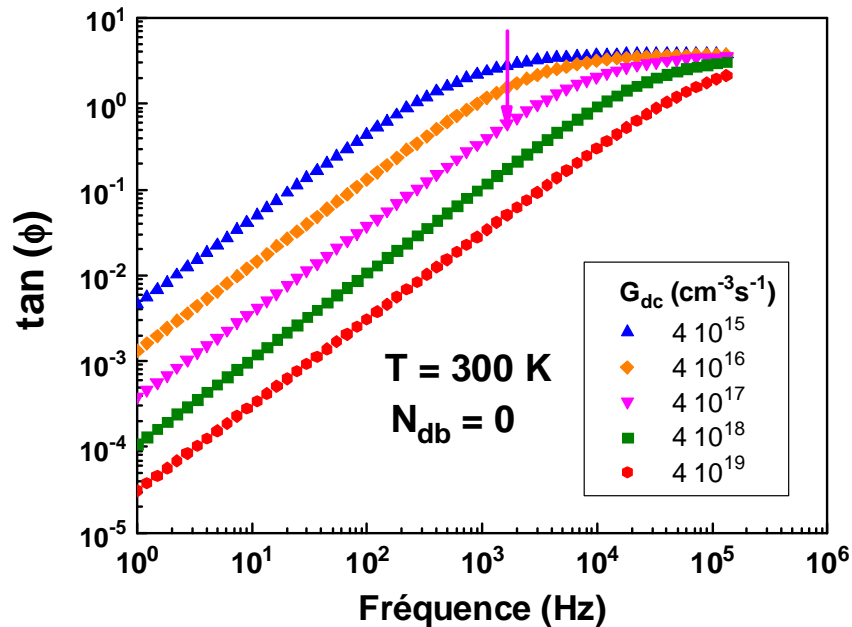


Figure D.20: Tracé de $\tan(\phi)$ en fonction de la fréquence, à une température $T=300$ K et pour différentes valeurs du taux de génération G_{dc} . Les paramètres standard sont utilisés sauf $N_{db} = 0$.

A titre d'illustration, nous procédons à la vérification de la valeur du rapport C_n/μ_n pour $G_{dc} = 410^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$. La fréquence de transition déduite de la figure D.19 vaut $f_c = 1600 \text{ Hz}$ d'où $C_n/\mu_n = 1.42 \cdot 10^{-9} \text{ V cm}$. Celle déterminée à partir de la figure D.20 vaut $f_c = 1663 \text{ Hz}$ qui conduit à $C_n/\mu_n = 1.48 \cdot 10^{-9} \text{ V cm}$. Une fois de plus, nous retrouvons approximativement les valeurs introduites dans le calcul.

D. VI. Discussion

Après avoir calculé numériquement le photocourant modulé (MPC) nous l'avons utilisé pour reconstruire la densité d'états dans le gap du a-Si:H. Nous avons utilisé principalement la relation de Brüggemann. Une bonne corrélation entre la densité calculée et celle introduite dans le modèle a été trouvée. Le domaine de validité de cette relation est tributaire de la nature des transitions en présence. A basse température et à hautes fréquences seule la QBC est concernée par les échanges de type piégeage-dépiégeage avec la bande de conduction. Ceci a été vérifié à travers les tracés d'expressions significatives révélant les transitions entre le régime de recombinaison et celui du mutipiégeage. Dans cette zone, nous retrouvons bien le profil de la QBC dans la partie supérieure du gap.

A plus haute température, nous avons obtenu une bosse plus ou moins large selon les paramètres microscopiques introduits. Son origine s'explique par la différence des sections de capture entre la queue de bande de conduction et les liaisons pendantes. De plus, lors de la résolution des équations cinétiques pour l'établissement de la relation de Brüggemann, une des hypothèses a consisté à remplacer une expression par la fonction de Dirac. Pour des énergies plus basses, l'utilisation de cette formule doit être faite avec précaution. Un traitement analytique spécifique qui tienne compte de la coexistence de deux types d'états localisés est nécessaire.

L'étude méthodique de l'effet des paramètres microscopiques, pris séparément, nous donne néanmoins une description qualitative de la tendance des résultats calculés pour des états profonds. Lorsque le renflement est important, cela signifie qu'il existe une densité importante de liaisons pendantes.

Une étude de l'évolution du déphasage en fonction de la fréquence, à travers des relations remarquables, pour plusieurs taux de génération est présentée. Nous avons montré l'existence de deux régimes distincts qui dépendent de la fréquence, de la température et du flux de lumière incident: le régime haute fréquence (HF) et le régime basse fréquence (BF). Nous avons pu ainsi identifier les fréquences de coupure associée au rapport du coefficient de capture sur la mobilité des électrons libres qu'on peut évaluer.

Conclusion

Au cours de ce travail, une simulation numérique du photocourant modulé (MPC) dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Une analyse théorique de cette technique a été présentée. Le modèle standard de la densité d'états (queues de bandes exponentielles et deux niveaux discrets corrélés des liaisons pendantes) a été utilisé. Toutes les transitions des électrons et des trous entre les états localisés et les états étendus ont été prises en compte. Le calcul du photocourant stationnaire et du courant MPC a nécessité l'utilisation de méthodes numériques pour la résolution des diverses équations.

Le courant MPC ainsi obtenu a été exploité pour la détermination de la densité d'états localisés dans la partie supérieure du gap du a-Si:H. La relation analytique classique de Brüggemann a été utilisée. Les possibilités d'une telle relation simple à utiliser ont été discutées et commentées. Comme il a été stipulé dans les hypothèses de son établissement, cette relation est utilisable dans le régime de piégeage-dépiégeage qui prédomine en HF, à basse température et pour des taux de génération pas trop élevés. Nous avons ainsi retrouvé l'énergie caractéristique de la pente de la queue de bande de conduction.

L'apparition d'un renflement au voisinage du niveau doublement occupé de la liaison pendante D^- , pris dans le modèle comme étant un niveau discret, peut avoir principalement deux causes. La première provient des hypothèses utilisées pour l'établissement de la relation de Brüggemann et l'autre de la concomitance dans les échanges de deux types d'états localisés. Ceci entraîne dans la réponse du courant MPC d'un mélange des régimes de piégeage-dépiégeage et de recombinaison.

Une étude systématique de l'influence des paramètres microscopiques a permis de voir comment varie le profil de densité calculé. Nous avons pu voir ainsi comment agissent en particulier les liaisons pendantes sur la forme et l'importance du renflement. L'ensemble des résultats obtenus peut éventuellement renseigner sur l'importance et la position des états profonds. Cela pourrait être possible particulièrement pour un même échantillon auquel nous aurions fait subir des changements de structure (dégradation, recuit, etc...).

Nous avons également examiné l'évolution du photocourant en fonction de la fréquence à travers des relations significatives pour identifier le passage du régime BF au régime HF. La fréquence de coupure ainsi déterminée a été utilisée pour retrouver un

rapport important de deux paramètres microscopiques du a-Si:H: le coefficient de capture d'un état de la queue de bande de conduction sur la mobilité des électrons dans les états étendus. Cette vérification, possible expérimentalement, peut constituer une exploitation directe possible de la mesure du courant MPC et de son déphasage.

L'étude de la simulation numérique proposée dans ce mémoire constitue une initiation intéressante pour étudier la technique du courant MPC qui constitue jusqu'à nos jours [29] une méthode de caractérisation assez puissante des semiconducteurs amorphes de manière générale. Plusieurs travaux [32,37,42] sont publiés pour lever les limitations de l'approche des relations analytiques classiques déjà établies. Pour cela il faut des approches analytiques et numériques plus approfondies pour pouvoir tenir compte d'une densité d'états réaliste du semiconducteur et des processus possibles existant dans les cinétiques des porteurs de charges.

Comme perspective de ce travail, le code numérique peut être adapté en tenant compte d'une distribution en gaussiennes des états des liaisons pendantes. Pour cela il faudrait appliquer avec précaution la statistique d'occupation pour de tels états corrélés. Ensuite, il faudrait élargir l'étude aux basses fréquences pour pouvoir sonder des états en profondeur du gap.

Annexe A

Soit les quantités A, B et Δ :

$$\begin{aligned} A &= (P^0 P^- + N^+ P^- + N^0 N^+ - \omega^2) \\ B &= \omega(P^0 + P^- + N^+ + N^0) \\ \Delta &= A^2 + B^2 \end{aligned}$$

Les coefficients de n_r , p_r , n_i et p_i pour la fonction d'occupation f_{ac}^+ sont:

$$\begin{aligned} \alpha_n^+ &= -\frac{[P^0 A C_n^0 f_{dc}^0 + ((P^- + N^0)A + \omega B)C_n^+ f_{dc}^+]}{\Delta} \\ \beta_n^+ &= \frac{[-P^0 B C_n^0 f_{dc}^0 + (\omega A - (P^- + N^0)B)C_n^+ f_{dc}^+]}{\Delta} \\ \alpha_p^+ &= -\frac{[P^0 A C_p^- f_{dc}^- + ((P^- + N^0)A + \omega B)C_p^0 f_{dc}^0]}{\Delta} \\ \beta_n^+ &= -\frac{[P^0 A C_p^- f_{dc}^- - (\omega A - (P^- + N^0)B)C_p^0 f_{dc}^0]}{\Delta} \end{aligned}$$

Les coefficients de n_r , p_r , n_i et p_i pour la fonction d'occupation f_{ac}^0 sont:

$$\begin{aligned} \alpha_n^0 &= \frac{[-(N^+ A + \omega B)C_n^0 f_{dc}^0 + (P^- A + \omega B)C_n^+ f_{dc}^+]}{\Delta} \\ \beta_n^0 &= \frac{[-(N^+ B - \omega A)C_n^0 f_{dc}^0 + (P^- B - \omega A)C_n^+ f_{dc}^+]}{\Delta} \\ \alpha_p^0 &= \frac{[(N^+ A + \omega B)C_p^- f_{dc}^- - (P^- A + \omega B)C_p^0 f_{dc}^0]}{\Delta} \\ \beta_p^0 &= \frac{[(N^+ B - \omega A)C_n^- f_{dc}^- + (P^- B - \omega A)C_p^0 f_{dc}^0]}{\Delta} \end{aligned}$$

Les coefficients de n_r , p_r , n_i et p_i pour la

fonction d'occupation f_{ac}^- peuvent être déduits des coefficients de f_{ac}^+ par la transformation

τ . Notons que les expressions A, B et Δ restent inchangées par cette transformation.

Annexe B

Les expressions des coefficients de la matrice apparaissant dans le système d'équations (C.39) sont données par:

$$\begin{aligned}
 A_1 = & \int_{E_v}^{E_c} N_{ct} C_n^{ct} (1 - f_{dc}^{ct}) \left[\frac{C_n^{ct} (n + n_1) (C_n^{ct} (n + n_1) + C_p^{ct} (p + p_1))}{(C_n^{ct} (n + n_1) + C_p^{ct} (p + p_1))^2 + \omega^2} - 1 \right] dE + \\
 & \int_{E_v}^{E_c} N_{vt} C_n^{vt} (1 - f_{dc}^{vt}) \left[\frac{C_n^{vt} (n + n_1) (C_n^{vt} (n + n_1) + C_p^{vt} (p + p_1))}{(C_n^{vt} (n + n_1) + C_p^{vt} (p + p_1))^2 + \omega^2} - 1 \right] dE + \\
 & + N_{db} [e_n^- \alpha_n^- - C_n^+ n \alpha_n^+ - C_n^+ f_{dc}^+ - C_n^0 f_{dc}^0 - (C_n^0 n_{dc} - e_n^0) \alpha_n^0]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B_1 = & \int_{E_v}^{E_c} N_{ct} \frac{C_n^{ct} (n + n_1) (C_n^{ct} (n + n_1) + C_p^{ct} (p + p_1)) C_p^{ct} f_{dc}^{ct}}{(C_n^{ct} (n + n_1) + C_p^{ct} (p + p_1))^2 + \omega^2} dE + \\
 & \int_{E_v}^{E_c} N_{vt} \frac{C_n^{vt} (n + n_1) (C_n^{vt} (n + n_1) + C_p^{vt} (p + p_1)) C_p^{vt} f_{dc}^{vt}}{(C_n^{vt} (n + n_1) + C_p^{vt} (p + p_1))^2 + \omega^2} dE + \\
 & + N_{db} [e_n^- \alpha_p^- - C_n^+ n \alpha_p^+ - (C_n^0 n - e_n^0) \alpha_p^0]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C_1 = & \int_{E_v}^{E_c} N_{ct} C_n^{ct} (1 - f_{dc}^{ct}) \omega \frac{C_n^{ct} (n + n_1)}{(C_n^{ct} (n + n_1) + C_p^{ct} (p + p_1))^2 + \omega^2} dE + \\
 & \int_{E_v}^{E_c} N_{vt} C_n^{vt} (1 - f_{dc}^{vt}) \left[\frac{C_n^{vt} (n + n_1)}{(C_n^{vt} (n + n_1) + C_p^{vt} (p + p_1))^2 + \omega^2} dE + \right. \\
 & \left. + N_{db} [e_n^- \beta_n^- - C_n^+ n \beta_n^+ - (C_n^0 n - e_n^0) \beta_n^0] + \omega \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_1 = & - \int_{E_v}^{E_c} N_{ct} C_p^{ct} f_{dc}^{ct} \omega \frac{C_n^{ct} (n + n_1)}{(C_n^{ct} (n + n_1) + C_p^{ct} (p + p_1))^2 + \omega^2} dE - \\
& - \int_{E_v}^{E_c} N_{vt} C_p^{vt} f_{dc}^{vt} \omega \frac{C_n^{vt} (n + n_1)}{(C_n^{vt} (n + n_1) + C_p^{vt} (p + p_1))^2 + \omega^2} dE + \\
& + N_{db} [e_n^- \beta_p^- + C_n^+ n \beta_p^+ - (C_n^0 n - e_n^0) \beta_p^0]
\end{aligned}$$

$$A_2 = -C_1$$

$$B_2 = -D_1$$

$$C_2 = A_1$$

$$D_2 = B_1$$

$$\begin{aligned}
A_3 = & 1 + \int_{E_v}^{E_c} N_{ct} \frac{C_n^{ct} (1 - f_{dc}^{ct}) [C_n^{ct} (n_{dc} + n_1) + C_p^{ct} (p_{dc} + p_1)]}{[C_n^{ct} (n_{dc} + n_1) + C_p^{ct} (p_{dc} + p_1)]^2 + \omega^2} dE + \\
& + \int_{E_v}^{E_c} N_{vt} \frac{C_n^{vt} (1 - f_{dc}^{vt}) [C_n^{vt} (n_{dc} + n_1) + C_p^{vt} (p_{dc} + p_1)]}{[C_n^{vt} (n_{dc} + n_1) + C_p^{vt} (p_{dc} + p_1)]^2 + \omega^2} dE - N_{db} (\alpha_n^+ - \alpha_n^-)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_3 = & -1 - \int_{E_v}^{E_c} N_{ct} \frac{C_p^{ct} f_{dc}^{ct} [C_n^{ct} (n_{dc} + n_1) + C_p^{ct} (p_{dc} + p_1)]}{[C_n^{ct} (n_{dc} + n_1) + C_p^{ct} (p_{dc} + p_1)]^2 + \omega^2} dE - \\
& - \int_{E_v}^{E_c} N_{vt} \frac{C_p^{vt} f_{dc}^{vt} [C_n^{vt} (n_{dc} + n_1) + C_p^{vt} (p_{dc} + p_1)]}{[C_n^{vt} (n_{dc} + n_1) + C_p^{vt} (p_{dc} + p_1)]^2 + \omega^2} dE - N_{db} (\alpha_p^+ - \alpha_p^-)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_3 = & \int_{E_v}^{E_c} N_{ct} \frac{\omega C_n^{ct} (1 - f_{dc}^{ct})}{[C_n^{ct} (n_{dc} + n_1) + C_p^{ct} (p_{dc} + p_1)]^2 + \omega^2} dE \\
& + \int_{E_v}^{E_c} N_{vt} \frac{\omega C_n^{vt} (1 - f_{dc}^{vt})}{[C_n^{vt} (n_{dc} + n_1) + C_p^{vt} (p_{dc} + p_1)]^2 + \omega^2} dE - N_{db} (\beta_n^+ - \beta_n^-)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_3 = & - \int_{E_v}^{E_c} N_{ct} \frac{\omega C_p^{ct} f_{dc}^{ct}}{[C_n^{ct}(n_{dc} + n_1) + C_p^{ct}(p_{dc} + p_1)]^2 + \omega^2} dE \\
& - \int_{E_v}^{E_c} N_{vt} \frac{\omega C_p^{vt} f_{dc}^{vt}}{[C_n^{vt}(n_{dc} + n_1) + C_p^{vt}(p_{dc} + p_1)]^2 + \omega^2} dE - N_{db}(\beta_p^+ - \beta_p^-)
\end{aligned}$$

$$A_4 = -C_3$$

$$B_4 = -D_3$$

$$C_4 = A_3$$

$$D_4 = B_3$$

Références

- [1] K. Morigaki, *Physics of Amorphous Semiconductors* (Imperial College Press and World Scientific Publishing, London, 1999).
- [2] R. C. Chittik, J. H. Alexander, H. F. Sterling, *J. Electrochemical Soc.* 116, 77 (1969).
- [3] W. E. Spear, P. G. Lecomber, *Phil. Mag.* 33, 935 (1976).
- [4] W. E. Spear, R. J. Loveland, A. Alsharbaty, *J. of Non-Cryst. Sol.* 15 410 (1974).
- [5] P.W. Anderson, *phys. Rev.* 109, 1492 (1958).
- [6] M. H.Cohen, H. Fritzsche, S. R.Ovshinsky, *phys. Rev. Lett.* 22, 1065 (1969).
- [7] N. F.Mott, *phil. Mag. B* 19, 835 (1969).
- [8] E. A. Davis, N. F. Mott, *Phil. Mag.* 22, 903 (1970).
- [9] N. F. Mott, E. A. Davis, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, 2nd Edition (Clarendon Press, Oxford, 1979).
- [10] P. G. Le Comber, A. Madan, W. E. Spear, *J. of Non-Cryst. Sol.* 11, 219-234, (1972).
- [11] R. A. Street, D.K. Biegelsen, *J. Non-Cryst. Solids* 35 & 36, 651 (1980).
- [12] H. Dersch, J. Stuke, J. Beichler, *Phys. Status Solidi B* 105, 265 (1981).
- [13] D. Adler, M. Silver, M. P. Shaw, V. Canella, *MRS Symp. Proc. Vol. 70*, 113 (1986).
- [14] R. N. Hall, *Phy. Rev.* 87, 387 (1952).
- [15] W. Shockley, W. T. Read, *Phys. Rev.* 87, 835 (1952).
- [16] G. W. Taylor, J. G. Simmons, *J. of Non Cryst. Solids* 8-10, 940 (1972).
- [17] M. Vanecek, J. Kocka, J. Stuchlik, A. Triska, *Sol. Stat. Comm.* 39, 1199 (1981).
- [18] A. C. Boccara, W. B. Jackson, N. M. Amer, D. Fournier, *Applied Optics* 20 (8), 1333 (1981).
- [19] H. Oheda, *J. Appl. Phys.* 52, 6693 (1981).
- [20] H. G. Grimmeis, *Lebdo, J. Appl. Phys.* 46. 2155 (1975).
- [21] W. B. Jackson, S. M. Kelso, C. C. Tsai, J. W. Allen, S. J. Oh, *Phys. Rev. B* 31, 5187 (1985).
- [22] J. M. Hvan, M. H. Brodsky, *Phys. Rev. Lett.* 46, 371 (1981).

- [23] R. Pandya, E. A. Schiff. *J. Non-Cryst. Solid*, 66, 193 (1984).
- [24] H. Oheda, *Phil. Mag. B* 52, 857 (1985).
- [25] J. M. Marshall, P. G. Le Comber, W. E. Spear, *Solid State Commun.* 54, 11 (1985).
- [26] T. Tiedje, in *Semiconductors and Semimetals Vol. 21, Part C*, ed. J. I. Pankove (Academic Press, Orlando, 1984), p. 207.
- [27] R. Brüggemann, C. Main, J. Berkin, S. Reynolds, *Phil. Mag. B* 62, 29 (1990).
- [28] P. Kounavis, *J. of Non-Cryst. Sol.* 352. 1068 (2006).
- [29] J. A. Schmidt, C. Longeaud, R. R. Koropecski, R. Arce, J. P. Kleider, *J. of Non-Cryst. Solids* 354, 2914 (2008).
- [30] H. Oheda, S. Yamazaki, T. Yoshida, A. Matsuda, H. Okushi, K. Tanaka, *Jpn. Appl. Phys.* 21, L440 (1982).
- [31] C. Longeaud, J. K. Kleider, *Phys. Rev. B* 45, 11672 (1992).
- [32] C. Longeaud, J. K. Kleider, *Phys. Rev. B* 48, 8715 (1993).
- [33] G. Schumm, G. H. Bauer, *Phys. Rev. B* 39, 5311 (1989).
- [34] R. Herberhol, T. Walter, H. W. Schock, *J. Appl. Phys.* 76, 2904 (1994).
- [35] R. Brüggemann, J. P. Kleider, C. Longeaud, D. Mencaraglia, J. Guillet, J. E. Bourée, C. Nikura, *J. Non Cryst. Solids* 266-269, 258 (2000).
- [36] F. Zhong, J. D. Cohen, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 258, 813 (1992).
- [37] K. C. Palinginis, J. D. Cohen, J. C. Yang, S. Guha, *J. Non Cryst. Solids* 266-269, 665 (2000).
- [38] C. Main, D. P. Webb, R. Brüggemann, S. Reynolds, *J. Non Cryst. Solids* 137-138, 951 (1991).
- [39] C. Longeaud, J. K. Kleider, P. Kaminski, R. Koslowski, M. Pawlowski, J. Cwirko, *Semicond. Sci. Techn.* 14, 747 (1999).
- [40] C. Longeaud, J. K. Kleider, M. Cuniot, *Opt. Mater.* 4, 27 (1995).
- [41] J. D. Cohen, J. Heath, K. C. Palinginis, J. C. Yang, S. Guha, *J. Non Cryst. Solids* 299-302, 449 (2002).
- [42] P. Kounavis, *Phys. Rev. B* 64, 45204 (2001).
- [43] K. Hattori, Y. Adachi, M. Anzai, H. Okamoto, Y. Hamakawa, *J. Appl. Phys.* 76, 2841 (1994).

- [44] R. R. Koropecski, J. A. Schmidt, R. Arce, J. Appl. Phys. 91, 8965 (2002).
- [45] L. Ainouche, *Détermination de la densité d'états localisés par les techniques du photocourant module et du transitoire du photocourant dans le silicium amorphe hydrogéné déposé par pulvérisation DC magnétron*, Thèse de Magister, USTHB, Alger (2003).
- [46] W. Shockley, J. T. Last, Phys. Rev. 107, 392 (1957).
- [47] H. Okamoto, H. Kida, Y. Hamakawa, Phil. Mag. B 49, 231 (1984).
- [48] F. Vaillant, D. Jousse, J.-C. Bruyere, Phil. Mag. B 57, 649 (1988).
- [49] T. Smail, *Photoconductivité et recombinaison dans le silicium amorphe hydrogéné*, Thèse de Magister, USTHB, Alger (1991).
- [50] T. Smail, T. Mohammed-Brahim, Phil. Mag. B 64, 675 (1991).
- [51] M. Q. Tran, Phil. Mag. B 72, 35 (1995).
- [52] A. Rose, "Concepts in Photoconductivity and Allied Problems" (Wiley, New York, 1963).
- [53] A. Rose, Phys. Rev. 97, 322 (1955).